



İZMİR EKONOMİ
ÜNİVERSİTESİ

XIII. YOĞUN MADDE FİZİĞİ – İZMİR TOPLANTISI

15 MAYIS 2026

yymf³⁵

PROGRAM VE ÖZET KİTAPÇIĞI

Bu yıl on üçüncüsü düzenlenen YMF – İzmir toplantısının amacı Yoğun Madde Fiziği ve ilgili alanlardaki bilimsel çalışmalara katkıda bulunmak, bilim insanları arasındaki bilgi alışverişini hızlandırmak ve yeni bilimsel ortaklıklara vesile olmaktır.

Bu toplantının düzenlenmesinde emeği geçen kurul üyelerine, gönüllü öğrenci arkadaşlarımıza, tüm katılımcılara ve sponsorlarımıza teşekkürü borç biliriz.

YMF – İzmir
İEÜ Düzenleme Kurulu

XIII. Yoğun Madde Fiziği – İzmir Toplantısı

15 Mayıs 2026 İzmir Ekonomi Üniversitesi

D Blok Çok Amaçlı Salon

TOPLANTI PROGRAMI		
08:30 – 09:15	Kayıt	
09:15 – 09:30	Açılış Konuşmaları	
1. Oturum		D: Davetli K: Kısa konuşma
09:30 – 10:00	Ramazan Şahin – Atatürk Üniversitesi Ultrahızlı ve Elektro-Optik Kontrol ile Yeniden Yapılandırılabilir Kuantum Plazmonik Sistemler	D1
10:00 – 10:30	Serap Aksu – Koç Üniversitesi Sıfır-Yansımali Optik Metayüzeylerin İyileştirilmesi ve Klinik Adaptasyonu	D2
10:30 – 11:00	ARA – POSTER	
2. Oturum		
11:00 – 11:30	Devrim Güçlü – İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü Yarıiletken Yapay Grafen Nanosistemlerde Nagaoka Ferromanyetizması	D3
11:30 – 12:00	Fadıl İyikanat – Dokuz Eylül Üniversitesi 2B Malzemelerde Polariton Destekli Doğrusal Olmayan Optik Yanıt	D4
12:00 – 12:15	Barış Pekerten – University at Buffalo (SUNY) Düzlemsel Josephson eklentilerinde topolojik süperiletkenlik ölçümü ve süperiletken diyot etkisi	K1
12:15 – 14:00	ÖĞLE YEMEĞİ – POSTER	
3. Oturum		
14:00 – 14:30	Göktuğ Karpaz – Sabancı Üniversitesi Çok Cisimli Açık Kuantum Sistemlerinde Senkronizasyon	D5
14:30 – 14:45	Muammer Yasin Hacısalihoğlu – Ankara Üniversitesi TrZr ₃ Süperiletkenlerinin Lokal Yapısının Sıcaklığa Bağlı Evrimi: Negatif Termal Genleşme ile İlişkisi	K2
14:45 – 15:00	Kadir Can Doğan – İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü MnPS ₃ Nanoşeritlerinde Genişlik ve Kenar Bağımlı Özelliklerin İncelenmesi	K3
15:00 – 15:15	Dicle Yılmaz – Dokuz Eylül Üniversitesi Rastgele Alan Ising Modelinin Kritik Yavaşlaması ve Karmaşık Alınanlığı	K4
15:15 – 16:15	ARA – POSTER	
4. Oturum		
16:15 – 16:45	Gürsoy B. Akgüç – İzmir Ekonomi Üniversitesi Aktif Schrödinger Denkleminin Spektral Analizi ile Olasılık Dağılımlarının Yeniden Oluşturulması	D6
16:45 – 17:00	Yalım Cansın Karacan – Dokuz Eylül Üniversitesi Kenar Etkileri ve Sonlu Boyut Altında Tek Tabakalı Nil ₂ Nanoparçacıklarında Skyrmion Oluşumu	K5
17:00 – 17:15	Gülşen Doğan – Dokuz Eylül Üniversitesi Antiferromanyetik Olarak Bağlanmış Çift Katmanlı Nanosistemlerde Skyrmion-Meron Evrimi	K6
17:15 – 17:30	Fırat Yılmaz – Entegre Kuantum Bilişim Teknolojileri A.Ş. (ENQUBT) Safsızlık Olmadan Lokalizasyon ile Klasik Safsızlık Fiziğinin Bağlantısı	K7
17:30 – 18:30	KAPANIŞ	
18:30	Akşam yemeği için buluşma	

DAVETLİ KONUŞMALAR

Yarıiletken Yapay Grafen Nanosistemlerde Nagaoka Ferromanyetizması

A. Devrim Güçlü

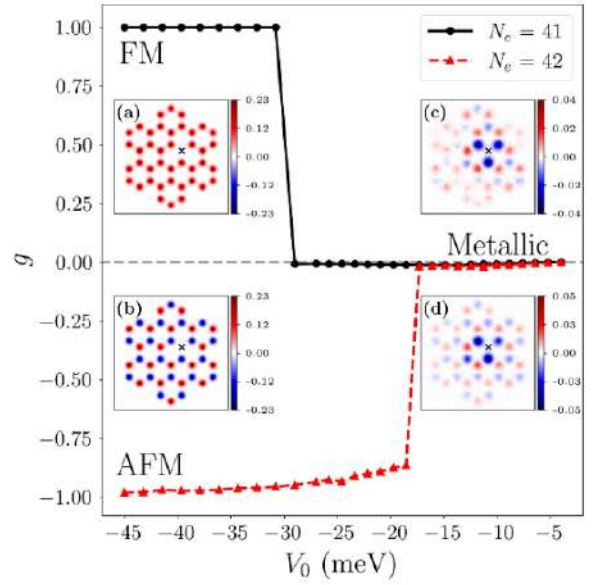
İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü Fizik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, GaAs/AlGaAs kuantum kuyuları üzerine nanoyapılandırılmış yarıiletken yapay grafen sistemlerinde Nagaoka ferromanyetizmasının ortaya çıkışını, yüksek hassasiyetli Varyasyonel Monte Carlo (VMC) ve Difüzyon Monte Carlo (DMC) yöntemleriyle gösteriyoruz. 42 noktalı hegzagonal örgü geometrisinde, elektron sayısının yarı doluluk seviyesinden ± 1 değiştirilmesiyle AFM \rightarrow FM faz geçişi gözlemlenmekte ve bu geçişin gerçekleşmesi için Hubbard parametresi $U/t \approx 60$ kritik eşik olarak belirlenmektedir. Coulomb saçılma terimlerinin FM fazı kararlı kıldığı, Tam Köşegenleştirme (ED) hesaplarıyla da doğrulanmaktadır.

Nagaoka ferromanyetizması, yarı dolu bir kafeste tek bir boşluğun tam spin polarizasyonuna yol açtığını öngören, Hubbard modeli çerçevesinde matematiksel olarak kanıtlanmış bir olgudur. Ancak bu fenomen, büyük ölçekli ve gerçekçi sistemlerde bugüne kadar gözlemlenememiştir. Mevcut çalışmalar yalnızca 2×2 boyutundaki elektrostatik kuantum nokta dizileriyle ve optik kafeslerle sınırlı kalmış; Coulomb etkileşiminin tam katkısını içeren gerçekçi modeller incelenmemiştir.[1]

Diğer yandan, yapay grafen (YG), AlGaAs/GaAs kuantum kuyuları üzerine nanoyapılandırılmış kuantum nokta dizileriyle oluşturulan ve ayarlanabilir Dirac fiziğine olanak tanıyan güçlü bir kuantum simülasyonu platformudur. Bu sistemlerde $U/t \sim 100$ mertebesinde Hubbard parametresi öngörülmekte olup bu değer, güçlü korelasyon rejiminin incelenmesine imkân tanımaktadır [2,3].

Şekil 1'de 42 noktalı hegzagonal örgü geometrisinde yaptığımız VMC ve DMC hesaplamalarından elden ettiğimiz spin-spin korelasyon fonksiyonunun kuyu potansiyeli derinliğine göre değişimini gösteriyoruz. Kuyu potansiyel derinliği $|V_0|$ arttıkça U/t değeri de artar. 42 elektronlu yarı-dolu örgüde metalik fazdan antiferromanyetik faza geçiş görülürken, 41 elektron için, yani örgüye bir boşluk eklendiğinde ferromanyetik faza bir geçiş olduğu, yani Nagaoka ferromanyetizmasının tetiklendiği görülmektedir.



Şekil 1: Spin-spin korelasyon fonksiyonunun kuyu potansiyeli derinliğine göre değişimi

Kuantum Monte Carlo sonuçlarımızı desteklemek için yaptığımız tam köşegenleştirme hesaplamalarımız da benzer sonuçlar vermekte ve Coulomb saçılma terimlerinin FM fazı kararlı kıldığı gözlenmektedir. Bu çalışmamız, uzun-menzilli ve saçılma etkileşimlerini tam olarak hesaba katan gerçekçi Hamiltoniyen modeli çerçevesinde, tek elektron eklenmesi/çıkarılmasıyla tetiklenen Nagaoka ferromanyetizmasının büyük ölçekli katı hal sisteminde var olduğunu ilk kez ortaya koymaktadır.

Teşekkür: Bu çalışma 119F119 nolu 1001 projesi ile TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça:

1. Dehollain JP, Mukhopadhyay U, Michal VP, Wang Y, Wunsch B, Reichl C, Wegscheider W, Rudner MS, Demler E and Vandersypen LMK, Nature 579 528 (2020).
2. Öztarhan G, Potasz P, Güçlü AD, 2D Materials 13, 015012 (2026).
3. Kul EB, Öztarhan G, Çınar MN, Güçlü AD, Physical Review B 112 155101 (2025).

2B Malzemelerde Polariton Destekli Doğrusal Olmayan Optik Yanıt

Fadıl İyikanat

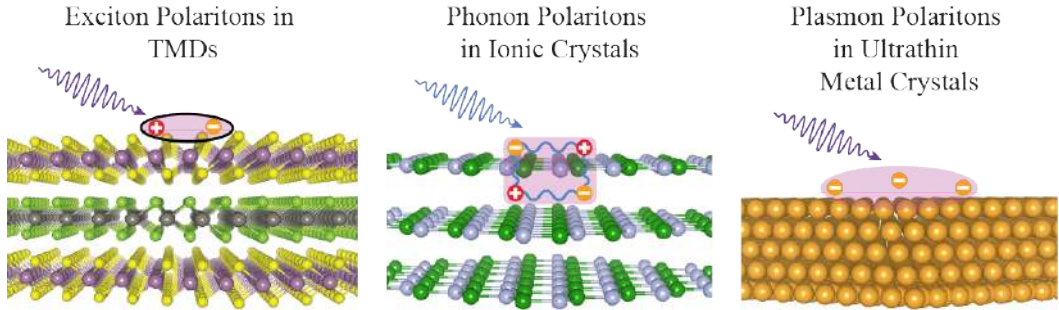
Dokuz Eylül Üniversitesi-Fizik Bölümü, 35160 İzmir

Malzemelerin optik yanıtını belirleyen temel mekanizmaların anlaşılması, düşük ışık şiddeti eşiklerinde dahi belirgin doğrusal olmayan optik yanıt sergileyen sistemlerin tasarlanması ve bu sistemlerin potansiyel uygulamalarının ortaya çıkarılması açısından kritik öneme sahiptir. İki boyutlu (2B) malzemelerde Coulomb perdelemesinin azalması ve kuantum sınırlama etkilerinin güçlenmesi, optik spektrumda belirgin foton-polariton etkileşimi izlerinin ortaya çıkmasına yol açmaktadır. Bu durum, 2B malzemelerde doğrusal olmayan optik yanıtta polaritonik etkilerin rolüne yönelik yoğun bir araştırma ilgisi doğurmuştur [1,2].

Bu konuşmada, 2B malzemelerde doğrusal olmayan optik yanıtın mikroskobik kökenlerini ve polaritonların bu süreçlerdeki belirleyici rolünü tartışacağız [3–5]. İyonik kristallerde fononlar, geçiş metali dikalkojenitlerinde (TMD'ler) eksitonlar ve ultra ince metal kristallerde plazmonlara odaklanarak (bkz. Şekil 1), bu sistemlerdeki ışık-madde etkileşimlerini sistematik olarak inceleyeceğiz. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) ve DFT ötesi

yöntemler (örneğin GW ve Bethe-Salpeter denklemi) dahil olmak üzere çeşitli ilk-prensipier yaklaşımlarını kullanarak, ele alınan 2B malzemelerin ayrıntılı elektronik, titreşimsel ve optik özelliklerini ortaya koyuyoruz. Ardından, polaritonların ışık ile etkileşimini çeşitli yaklaşımlar altında dikkate alarak sistemin hareket denklemini kuruyoruz. Bu denklemi zaman alanında veya pertürbatif yaklaşımlar çerçevesinde çözerek, ilgili malzemenin doğrusal optik yanıtını ve ikinci ile üçüncü harmonik üretimine karşılık gelen doğrusal olmayan duyarlılıklarını elde ediyoruz.

Özetle, çalışmalarımız polaritonların 2B malzemelerde doğrusal olmayan optik yanıtı belirgin şekilde güçlendirdiğini göstermektedir. Bu sonuçlar, polaritonların geniş bir optik spektrum aralığında doğrusal olmayan optik yanıtın etkin ve ayarlanabilir biçimde kontrolünü mümkün kıldığını ve optoelektronik ile kuantum optiği uygulamaları için önemli fırsatlar sunduğunu göstermektedir.



Şekil 1: Geniş bir 2B malzeme yelpazesi (TMD'ler, iyonik kristaller ve ultra ince metal kristaller dahil) tarafından desteklenen eksiton, fonon ve plazmon polaritonlarının şematik gösterimi. Fotonların bu polaritonlarla etkileşimi; kalınlığın değiştirilmesi veya heteroyapıların oluşturulması gibi çeşitli mekanizmalarla ayarlanabilir. Bu durum, farklı türlerde ultrahızlı süreçlerin ortaya çıkmasına ve doğrusal olmayan optik yanıtın belirgin şekilde güçlenmesine yol açar.

Kaynakça

1. X. Guo et al., "Polaritons in Van der Waals Heterostructures", *Adv. Mater.* **35**, 2201856 (2022).
2. J. Gu et al., "Enhanced nonlinear interaction of polaritons via excitonic Rydberg states in monolayer WSe₂", *Nat. Commun.* **12**, 2269 (2021).
3. F. İyikanat, A. Konečná ve F. J. García de Abajo, "Nonlinear Tunable Vibrational Response in Hexagonal Boron Nitride", *ACS Nano* **15**, 13415–13426 (2021).
4. Y. Wang, F. İyikanat et al., "Optical Control of High-Harmonic Generation at the Atomic Thickness", *Nano Lett.* **22**, 8455–8462 (2022).
5. Á. Rodríguez Echarri, F. İyikanat et al., "Nonlinear Photoluminescence in Gold Thin Films", *ACS Photonics* **10**, 2918–2929 (2023).

Aktif Schrödinger Denkleminin Spektral Analizi ile Olasılık Dağılımlarının Yeniden Oluşturulması

^{1,2}Gürsoy B. Akgüç

¹*İzmirEkonomi Üniversitesi, Fizik Bölümü*

²*Karmaşık Sistemler Araştırma ve Uygulama Merkezi (EKOKARSİM), İzmir Ekonomi Üniversitesi*

Modern skor tabanlı üretken modeller (SGM'ler), genellikle termal denge süreçlerine ve ağır sinir ağı eğitimlerine dayanır. Bu çalışmada, üretken modelleme sürecini **dengeden uzak aktif madde fiziđi** üzerinden yeniden kurguluyoruz.

Aktif Ornstein-Uhlenbeck (AOUP) dinamiklerini ve UCNA yaklaşımını kullanarak, asimetrik Fokker-Planck denklemini Hermitik bir Schrödinger denklemine eşliyoruz. Bu spektral dönüşüm sayesinde, ters-zamanlı difüzyonu yönlendiren skor fonksiyonunu veri eğitime (*data-driven training*) ihtiyaç duymadan tamamen **analitik olarak** elde ediyoruz.

Çift kuyulu ve Rosenbrock gibi karmaşık potansiyellerde gösterdiğimiz üzere, aktif gürültü pasif sistemlerdeki kinetik tuzaklanmayı aşarak karmaşık olasılık dağılımlarının yüksek hassasiyetle yeniden oluşturulmasını sağlamaktadır.

Ultrahızlı ve Elektro-Optik Kontrol ile Yeniden Yapılandırılabilir Kuantum Plazmonik Sistemler

Ramazan Şahin*^{1,2}

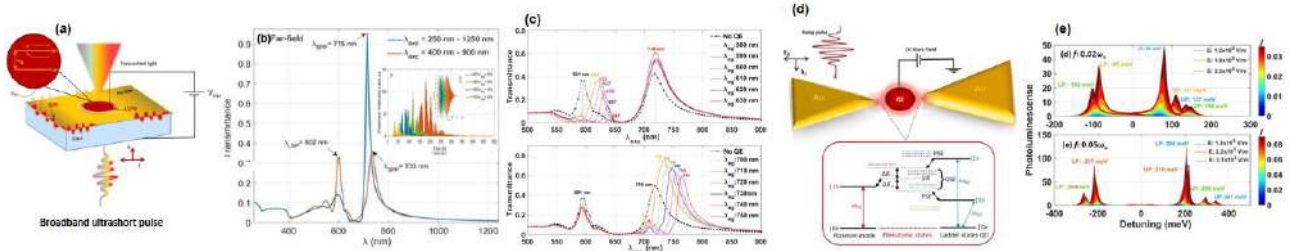
¹Astronomi ve Uzay Bilimleri Bölümü, Atatürk Üniversitesi, 25240, Erzurum, Türkiye

²Türkiye Ulusal Gözlemleri, TUG, 07058, Antalya, Türkiye

Görünür dalgaboyu aralığında plazmonik sistemlerin dinamik olarak kontrol edilebilmesi, yeni nesil nanofotonik cihazlar ve kuantum teknolojilerinin geliştirilmesi açısından kritik bir rol oynamaktadır. Bu çalışmada, plazmon-yayıcı etkileşimlerinin hem tamamen optik hem de elektro-optik yöntemlerle kontrolünü bir araya getirerek, optik frekanslarda çalışan kuantum plazmonik sistemler için yeniden yapılandırılabilir ayarlama stratejileri sunulmaktadır.

Ultrakısa lazer darbeleri kullanılarak lokalize ve yayılan plazmon modlarının etkin biçimde uyarılması sağlanmakta ve bu sayede olağanüstü optik geçirgenlik (EOT) üzerinde hem spektral hem de zamansal kontrol gerçekleştirilmektedir. Üç boyutlu FDTD simülasyonları ve kuantum osilatör modellemeleri, darbe süresi ve spektral bant genişliğinin uygun şekilde ayarlanmasıyla EOT şiddetinin üç mertebeye kadar artırılabilirliğini ve plazmon ömürlerinin yaklaşık 100 fs seviyesine kadar uzatılabilirliğini göstermektedir. Buna ek olarak, plazmonik nano yapılarla voltaj ile ayarlanabilen kuantum yayıcıların entegre edilmesiyle, sabit dalga boylarında geniş bantlı spektral ayarlama sağlanmakta ve EOT sinyallerinde yine üç mertebeye varan modülasyon elde edilmektedir. Kuantum yayıcıların görece uzun ömürlü yapısı, kısa ömürlü doğrusal olmayan plazmon modlarının yaşam süresini yaklaşık 129 fs'ye kadar uzatabilmektedir.

Çalışmanın devamında, optik Stark etkisi kullanılarak hem rezonans dışı hem de rezonans koşullarındaki plazmon-yayıcı etkileşimlerinde pleksitonik modların faz uyumlu kontrolü teorik olarak ortaya konmaktadır. Rezonans dışı durumda, Stark alanı üç seviyeli kuantum yayıcıdaki dejenerasyonu kaldırarak pleksitonik durumları rezonansa yaklaştırmakta ve Stark kaynaklı şeffaflık oluşumuna olanak sağlamaktadır. Ayrıca, küçük Stark kaymaları bile vakum Rabi bölünmesinde belirgin değişimlere (350 meV'ye kadar) yol açarak fotoluminesansın etkin biçimde kontrol edilmesini mümkün kılmaktadır. Rezonans durumunda ise optik Stark etkisi, Mollow üçlüsü benzeri yapıların oluşmasına ve girişim temelli kontrol mekanizmalarının ortaya çıkmasına neden olmakta; gözlenen Stark bölünmesi 491 meV seviyesine kadar ulaşabilmektedir.



Şekil 1: (a) Nanodeliğin içine yerleştirilmiş QE ile EOT yapısının şematik diyagramı (b) Ultrakısa darbenin farklı spektral bant genişlikleri için geçirgenlik spektrumları (c) QE'nin farklı seviye aralıkları (λ_{eg}) için geçirgenlik spektrumları. (d) Au bow-tie nanoantenna ve voltaj ayarlanabilir QE'nin hibrit kuantum plazmonik sistemi (e) Zayıf ve güçlü etkileşim rejiminde Stark alanının farklı değerleri için ayar bozma fonksiyonu olarak Stark ayarlı pleksitonların PL spektrumları.

Elde edilen sonuçlar, nanometre ölçeğinde ışığın dinamik olarak kontrol edilmesine yönelik güçlü bir yaklaşım sunmakta ve algılama, görüntüleme ile entegre fotonik uygulamalarında yüksek derecede ayarlanabilir plazmonik sistemlerin geliştirilmesine zemin hazırlamaktadır. Sonuçlarımız, nanometre ölçeğinde ışığın dinamik manipülasyonu için dayanaklı stratejiler sunarak, algılama, görüntüleme ve entegre fotonik uygulamalarında ayarlanabilir plazmonik cihazlar için yol açmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Yüzey Plazmon Rezonansı, Olağandışı Optik Geçirgenlik, Stark etkisi, Kuantum Yayıcı R.S., TÜBİTAK'ın 121F030 ve 123F156 numaralı projelerinden sağlanan destek için teşekkür etmektedir.

Kaynakça

1. H. Asif, M. E. Tasgin ve R. Sahin, "All-optical control of ultrafast plasmon resonances in the pulse-driven extraordinary optical transmission", J. Opt. 25, 075501 (2023). (Editor's Pick)
2. H. Asif, A. Bek, M. E. Tasgin ve R. Sahin, "Voltage-controlled extraordinary optical transmission in the visible regime", Phys. Rev. B. 109, 125425 (2024).
3. H. Asif ve R. Sahin, "Stark control of pleksiton states in incoherent quantum systems", Phys. Rev. A. 110, 023713(2024).

Sıfır-Yansımali Optik Metayüzeylerin İyileştirilmesi ve Klinik Adaptasyonu

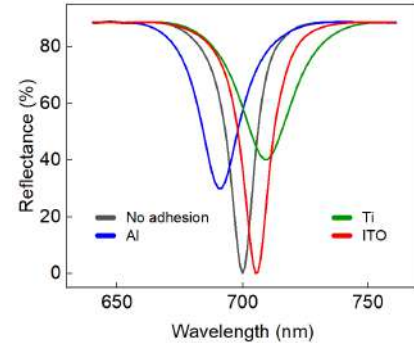
Serap Aksu

Koç Üniversitesi- Fizik Bölümü, 34450 İstanbul

Sıfır yansımali metayüzeyler sıvı biyopsi temelli diagnostik uygulamalar için gelecek vaat etmektedir. Fakat metayüzeylerin klinik çalışmalara uyarlanmasında belli sorunlar bulunmaktadır. Bu çalışmada belirlediğimiz problemleri analiz ederek çözümler öneriyoruz. Bu doğrultuda, metayüzeyleri minimum optik kayba sahip optimize edilmiş yapışma (adhezyon) katmanları kullanarak üretiyoruz. Modifiye edilmiş lazer litografisi kullanarak bu yüzeylerin geniş alanlı ve homojen nanofabrikasyonunu gerçekleştiriyor ve serum içinde beyin metastazı ile ilişkili biyobelirteçlerin tespitini gösteriyoruz.

Altın ince film kullanan sıfır yansımali metayüzeyler eşsiz bir algılama hassasiyet sunar ancak "yapışma-optik kayıp" dengesi sorunuyla karşı karşıyadırlar. Titanyum (Ti) gibi geleneksel yapışma katmanları stabiliteyi artırırken optik performansı düşürmektedir. Biz, alüminyum (Al) hem mekanik stabilite hem de minimum optik kayıp sağlayan en iyi sonuç olarak tanımlıyoruz. Alüminyumun, yapışma katmanı içermeyen altın filmlerle yarışacak düzeyde yakın alan tepkileri sağladığını gösteriyoruz. Optimum yapışma katmanını belirlemek için detaylı bir araştırma gerçekleştirildi. Metayüzeyler, modifiye edilmiş lazer interferans litografisi kullanılarak geniş alanlarda üretilmiştir. Nanoyapıların optik ve metrik homojenliği ölçülmüş ve elektron ışını litografisi (EBL) ile üretilenlerle karşılaştırılmıştır. Son olarak, bu platformun klinik uygunluğunu, beyin metastazı ile ilişkili proteinlerin ultra hassas tespiti ve zorlu çevresel koşullara dayanma yeteneği üzerinden kanıtlayarak; sağlam ve taşınabilir yeni nesil biyosensörlerin yolunu açıyoruz.

Yöntemler: Sıfır yansımali metayüzeyler, Ansys Lumerical kullanılarak hesaplamalı modelleme yoluyla tasarlanmıştır. Nanofabrikasyon, modifiye edilmiş lazer interferans litografisi [1,2] kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Alüminyum yapışma katmanlarının kusursuz emilim (perfect absorption) sağlamadaki avantajlarını vurgulamak için nanodisk anten mimarisine dayalı dar bantlı bir metal-yalıtkan-metal (MIM) soğurucu kullanılmıştır [1,2]. Cihaz; 100 nm Au taban düzlemi, 40 nm SiO₂ dielektrik ayırıcı ve 500 µm silikon taban üzerinde yer alan periyodik Au nanodisklerin (periyot: 650 nm; çap: 180 nm; kalınlık: 40 nm) üst katmanından oluşmaktadır. Stabilite ve



Şekil 1: 5nm kalınlığında farklı adhezyon malzemelerinin optik kaliteye etkisi gösterilmiştir.

performansı incelemek için metal-yalıtkan arayüzlerine 2,5 nm ve 5 nm kalınlığında yapışma katmanları entegre edilmiştir.

Deneysel sonuçlar, Al'un altın nanodisklerin ve ince filmlerin mekanik stabilitesini artırdığını, su akışı ve 40 kHz sonikasyon gibi zorlu koşullara dayandığını göstermektedir. Ti ile karşılaştırıldığında, Al tabanlı metayüzeyler daha yüksek elektrik yakın alan güçlenmesi sergileyerek yapışma katmanı olmayan yapıların performansına oldukça yakın sonuçlar vermektedir. Bu iyileştirme, Al tabanlı metayüzeylerin en büyük kırılma indisi tabanlı kaymayı (shift) üretmek için üstün algılama performansı sergilediği 50 kDa proteinlerin tespiti yoluyla daha da doğrulanmıştır.

Sonuç: Alüminyumun (Al), metayüzey entegrasyonunda geleneksel yapışma malzemesi olan titanyumdan daha iyi performans gösterdiğini deneysel olarak kanıtıyoruz. Geniş alanlı üretim, metayüzeyler üzerinde merceksiz (lens-free) tespitlere olanak sağlamaktadır. Mühendislik ürünü metayüzeyler kullanılarak, 1 pg/ml kadar düşük konsantrasyonlardaki ilgili biyobelirteçler tespit edilmiştir.

Kaynakça

1. N. Koc, A. Belarouci, E. Oktem, S. Aksu, Objective-Free Ultrasensitive Biosensing on Large-Area Metamaterial Surfaces in the Near-IR. ACS Appl Mater Interfaces 2024, 16(25):32516-32523
2. F. Ali, S. Aksu, A Narrow-Band Multi-Resonant Metamaterial in Near-IR. Materials 2020, 13(22):5140. <https://doi.org/10.3390/ma13225140>.

Çok Cisimli Açık Kuantum Sistemlerinde Senkronizasyon

Göktuğ Karpata

Sabancı Üniversitesi- Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956, İstanbul.

Bu çalışmada, yerel genlik sönümlenmesine maruz kalan XX spin zincirlerinde senkronizasyonu inceliyoruz. Modelin karanlık alt uzay yapısını analiz ederek, bu yapının gürültülü konumlar ve zincir uzunluğuna bağlı basit bir aritmetik fonksiyonla belirlendiğini gösteriyoruz. Yerel gözlenebilirler için kapalı bir ifade elde ediyor ve uç spinler arasında kararlı senkronizasyonun, keyfi başlangıç durumları için, ancak karanlık alt uzayın tam olarak bir tek-uyarım öz durumu desteklemesi halinde ortaya çıktığını gösteriyoruz. Aynı koşulun zincirin ucundaki spinler arasında sabit asimptotik dolaşıklığı da garanti ettiğini ispatlıyoruz.

Açık kuantum sistemlerinde çevreyle etkileşim çoğu zaman eşevresizliğe ve enerji kaybına yol açar. Bununla birlikte, uygun simetri ve karanlık alt uzay yapıları altında çevresel etkiler yalnızca bozucu bir mekanizma olmak zorunda değildir. Bu çalışmamızda, yerel genlik sönümlenmesine maruz kalan çok cisimli bir XX spin zincirinde senkronizasyonun hangi şartlar altında ortaya çıktığını inceliyoruz. Temel sonuçlardan ilki, senkronizasyonun doğrudan karanlık alt uzayın yapısı tarafından belirlendiğidir.

Ele aldığımız modelde N adet iki seviyeli sistem, en yakın komşu XX etkileşimiyle bağlanmıştır ve çevre zincirin belirli konumlarını yerel olarak etkilemektedir. Yerel genlik sönümlenmesi, bu konumlarda genliği olmayan olan tek uyarımlı öz durumları etkilemez. Dolayısıyla uzun zaman dinamiğinde yalnızca bu karanlık öz durumlar ve taban durumu kalır. Gürültülü konumlar olan m_i için tek uyarımlı karanlık öz durumların sayısı

$$r = OBE(N + 1, m_1, m_2, \dots, m_q) - 1,$$

şeklinde bir aritmetik koşulla bulunur. Bu ifade, aslında gürültülü bölgelerde düğüm oluşturan ve bu nedenle de genlik sönümlenmesinden hiçbir şekilde etkilenmeyen modları saymaktadır.

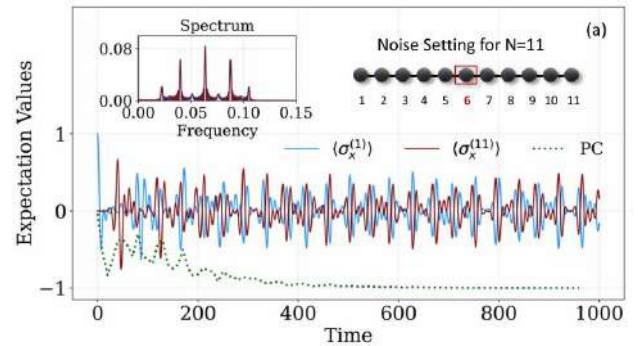
Çalışmamızın ikinci temel sonucu ise zincirde gözlemlenebilir büyüklükler için (örneğin belirli bir yöndeki spin-1/2 beklenen değerleri) kararlı senkronizasyonun ancak ve ancak uzun zaman dinamiğinde yalnızca bir tek-uyarımlı karanlık öz durum olması durumunda zincirin başlangıç halinden bağımsız bir şekilde ortaya çıkmasıdır. Başka bir deyişle, gösteriyoruz ki $r = 1$ olarak oldukça basit bir şekilde ifade edilen aritmetik koşul, zincirin uçları arasındaki senkronizasyon oluşumu için yeter ve gerek şarttır. Bu durumda

Kaynakça

1. Synchronization in a dissipative quantum many-body system, B. Çakmak, K. Sümer, S. Campbell, G. Karpata, arXiv:2604.18707 (2026).

zincirin ucundaki spinler aynı frekansta salınır ve spin-1/2 beklenen değerleri de sabit bir genlik oranıyla birbirine bağlanır. Buna karşılık, birden fazla karanlık tek-uyarım öz durumu varsa, uzun zaman dinamiği genel olarak çok-frekanslı hale gelir ve senkronizasyon oluşumu ve özellikleri başlangıç durumuna bağlı olur.

Bahsettiğimiz sonuçlar, kuantum sistemlerinde senkronizasyonun Hilbert uzayı içinde bulunan karanlık alt uzayların geometrik ve spektral yapısından kaynaklanan bir fenomen olduğunu göstermektedir. Ayrıca aynı mekanizma, uzun zaman rejiminde zincirin uç noktalarında olan spinler arasında sabit bir değere sahip kuantum dolaşıklığı oluşmasına da yol açmaktadır.



Şekil 1

Yerel genlik sönümlenmesi altındaki $N = 11$ uzunluklu XX spin zincirinde uç spin senkronizasyonu. Gürültü zincirin orta konumuna, $m = 6$, uygulanmıştır. Mavi ve kırmızı eğriler sırasıyla sol ve sağ uçlardaki spinlerin $\langle \sigma_x^{(1)} \rangle$ ve $\langle \sigma_x^{(11)} \rangle$ beklenti değerlerini, yeşil kesikli eğri ise senkronizasyon ölçütünü göstermektedir. Üstteki zincir şeması gürültülü konumu, sol üstteki ek grafik ise baskın frekans bileşenlerini göstermektedir.

KISA KONUŐMALAR

Düzlemsel Josephson eklentilerinde topolojik süperiletkenlik ölçümü ve süperiletken diyot etkisi

Barış Pekerten

University at Buffalo (SUNY), Buffalo, NY 14260, ABD

Düzlemsel Josephson eklemeleri, Majorana bağlı durumlarının manipülasyonu yoluyla hataya dayanıklı kuantum hesaplamayı mümkün kılacak topolojik süperiletkenliği barındırmak için bir platform sağlar. Neredeyse mükemmel arayüz geçirgenliğine sahip olacak şekilde üretilen bu Josephson eklemelerinin standart bir modeli, basit ve evrensel bir davranış öngörür: Zeeman alanının tek bir kritik değerinde sistem, bir π faz sıçraması ve kritik süperiletken akımda bir minimum ile karakterize edilen bir topolojik geçişe uğrar; faz farkı ve Zeeman alanının bir fonksiyonu olarak elmas şeklinde bir topolojik bölge oluşturur. Bizler, bu basit modelden farklı olarak, mükemmel arayüz geçirgenliği durumunda bile, sonlu boyutlu veya spin-orbit etkileşimi ve manyetik alan yönüyle belirlenen eşyönsüz bir sistem için çok daha zengin ve evrensel olmayan bir davranış buluyoruz. Bunun dışında Josephson eklemelerinin, tersinmeyen taşınımın ve süperiletken diyot etkisinin çarpıcı bir örneğini sergilediğini buluyoruz ve diyot etkisinin hangi yönelimlerde maksimize edildiğini ifade ediyoruz. Bu etkilerin görece basit bir akım-faz bağlantısı ölçümünden dahi çıkarılabildiğini gösteriyoruz. Ayrıca mikrodalga spektroskopisindeki gelişmelerden yararlanarak, topolojik süperiletkenliğin olası mikrodalga imzalarını tanımlamak amacıyla bir RF-SQUID içine yerleştirilmiş Al/InAs tabanlı düzlemsel Josephson eklemelerini ele alıyoruz. Çok sayıda Andreev bağlı durumuna sahip geniş bir düzlemsel Josephson eklemesinde bile, böyle bir topolojik imzanın mikrodalga sürücünün rezonans frekansı kaymasında ayırt edilebilir olduğunu gösteriyoruz. Bulgularımız, gelecekteki süperiletken spintronik araştırmalarına yol gösterici olmakta ve Abelyen olmayan istatistiklerin deneysel olarak tespit edilmesi ile ölçeklenebilir topolojik kuantum hesaplamasının uygulanması yönünde önemli bir adım teşkil etmektedir.

Kaynakça

1. B. Pekerten, J. D. Pakizer, B. Hawn, and A. Matos-Abiague, Anisotropic topological superconductivity in Josephson junctions, *Phys. Rev. B* 105, 054504 (2022).
2. N. Lotfizadeh, W. Schiela, B. Pekerten, P. Yu, W. Strickland, A. Matos-Abiague, and J. Shabani, Superconducting diode effect sign change in epitaxial Al-InAs Josephson junctions, *Commun. Phys.* 7, 120 (2024).
3. B. Pekerten, D. Brandão, B. Bussiere, D. Monroe, T. Zhou, J. E. Han, J. Shabani, A.-M. Abiague, and I. Žutić, Beyond the standard model of topological Josephson junctions: From crystalline anisotropy to finite-size and diode effects, *Appl. Phys. Lett.* 124, 252602 (2024).
4. B. Pekerten, D. Brandão, B. H. Elfeky, T. Zhou, J. E. Han, J. Shabani, and I. Žutić, Microwave signatures of topological superconductivity in planar Josephson junctions, *Phys. Rev. B* 110, 6 (2024).
5. B. H. Elfeky, K. Dindial, D. S. Brandão, B. Pekerten, J. Lee, W. M. Strickland, P. J. Strohbeen, A. Danilenko, L. Baker, M. Mikalsen, W. Schiela, Z. Liang, J. Issokson, I. Levy, I. Žutić, and J. Shabani, Microwave Andreev bound state spectroscopy in a semiconductor-based planar Josephson junction, *Phys. Rev. Research* 7, 013248 (2025).
6. B. Pekerten, A. C. Prasannan, and A. Matos-Abiague, Signatures of Topological Superconductivity and Josephson Diode Effects on the Magnetocurrent-Phase Relation of Planar Josephson Junctions, *arXiv:2603.07638*.
7. A. C. Prasannan, B. Pekerten, N. Alashkar, and A. Matos-Abiague, Anisotropic Superconducting Diode Effect in Planar Josephson Junctions, *arXiv:2604.17594*.

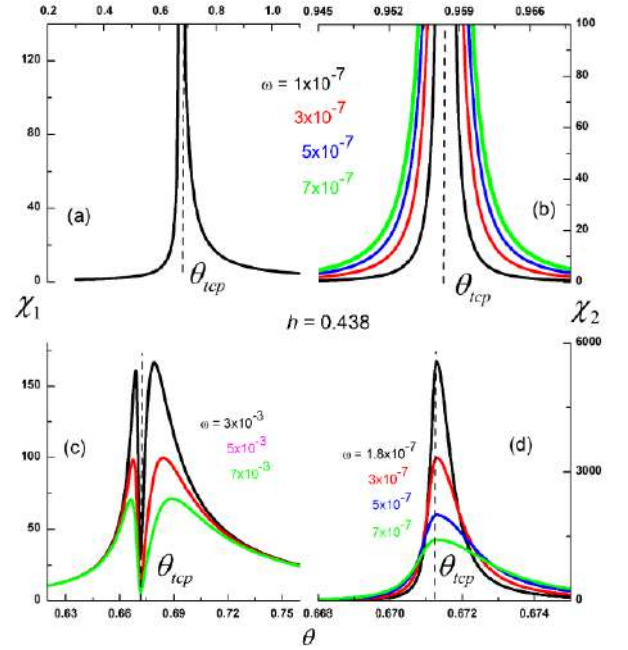
Rastgele Alan Ising Modelinin Kritik Yavaşlaması ve Karmaşık Alınganlığı

^{1,*}Dicle Yılmaz, ¹Gül Gülpınar, ²Songül Özüm¹Fizik Bölümü, Dokuz Eylül Üniversitesi, 35390, İzmir, Türkiye²Alaca Avni Çelik Meslek Yüksekokulu, Hitit Üniversitesi, 19600, Çorum, Türkiye*yilmaz.dicle@ogr.deu.edu.tr

Bu çalışmada, rastgele alanlı Ising modelindeki manyetik durulma süreçleri, tersinmez termodinamiğe dayanan fenomenolojik bir çerçeveye incelendi. Öncelikle bimodal dağılıma uyan rastgele manyetik alan varlığında sistemin faz geçiş özellikleri ortalama alan yaklaşımı altında analiz edildi [1]. Dinamik analizler, bimodal rastgele alan etkisini içeren, serbest enerjiye dayanan Landau-Khalatnikov denklemlerinin sayısal çözümleri ile gerçekleştirildi. Karakteristik durulma zamanının (τ) sürekli geçişler yakınında iraksama sergileyerek "kritik yavaşlama" olgusunu doğrulamasına karşın, süreksiz geçişlerde birinci dereceden faz değişimlerinin doğasıyla uyumlu sonlu atlamalar sergilediği saptandı.

Çalışmanın ikinci aşamasında, sistem periyodik bir dış alana tabi tutularak kararlı hal çözümlerine ulaşıldı ve AC manyetik alınganlık ifadesi elde edildi: $\chi_C(\omega, \theta) = \chi_2(\omega, \theta) - i\chi_1(\omega, \theta)$. Bu bağlamda, enerjinin sistem bünyesinde depolanmasını temsil eden dispersiyon, χ_1 ile verilen enerji kayıplarını simgeleyen absorpsiyon, χ_2 katsayılarının sıcaklık ve frekansa bağlı değişimleri, ikinci dereceden, birinci dereceden ve üçlü kritik nokta yakınında detaylıca incelendi.

Elde edilen bulgular, alınganlık bileşenlerinin düşük frekanslarda ($\omega\tau \ll 1$) simetrik iraksamalar, yüksek frekanslarda ($\omega\tau \gg 1$) ise karakteristik çukur ve tepe noktaları sergilediğini göstermektedir. Statik ve dinamik alınganlık sonuçları arasındaki tam uyum, kullanılan modelin doğruluğunu teyit etmekte ve rastgele alanların sistemde yarattığı pinning (çivilenme) etkisiyle spinlerin dış manyetik alana uyum sağlama yeteneğini kısıtlayarak dinamik kaybı arttırmaktadır [2]. Bu sonuçlar, düzensiz manyetik sistemlerdeki kararlı hal tepki mekanizmalarına dair önemli içgörüler sunarken, durağan hal istatistiksel fiziği çerçevesinde sürülen sistemlerin anlaşılmasına katkı sağlamaktadır.



Şekil 1: Bimodal rastgele alan Ising Modelinin dispersiyon ve absorpsiyon faktörlerinin düşük ve yüksek frekans rejimlerindeki üçlü kritik davranışı.

Kaynakça

1. A. Aharony, "Tricritical points in systems with random fields", Phys. Rev. B 18, 3318–3327 (1978).
2. M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris, M. Schwartz, "Critical behavior of the random-field Ising model", Phys. Rev. B 53 (10), 6362–6384 (1996).

Antiferromanyetik Olarak Bağlanmış Çift Katmanlı Nanosistemlerde Skymion-Meron Evrimi

Gülşen Doğan¹, Ümit Akıncı²

¹Dokuz Eylül Üniversitesi-Fen Bilimleri Enstitüsü, Nanobilim ve Nanomühendislik, 35390 İzmir

²Dokuz Eylül Üniversitesi-Fizik Bölümü, 35390 İzmir

Bu çalışma, skymionlar ve meronlar gibi topolojik manyetik yapıların oluşumunu ve kararlılığını incelemektedir. Monte Carlo simülasyonları kullanılarak, antiferromanyetik katmanlar arası etkileşime sahip çift katmanlı bir manyetik sistem analiz edilmiştir. Elde edilen bulgular, iki katmanın birbirine zıt topolojik yarı parçacık konfigürasyonları oluşturacak şekilde eşlenik davrandığını göstermektedir. Sistemin davranışı, hem harici manyetik alanın yokluğunda hem de uygulanan alan altında incelenmiş; bu sayede topolojik yapıların ortaya çıkma, dönüşme ve faz geçiş koşulları belirlenmiştir. Sonuçlar, farklı topolojik fazlar arasındaki geçişleri kontrol eden anizotropi rejimlerini ortaya koyarak, bu tür manyetik yapıların kontrolüne yönelik önemli bilgiler sunmaktadır.

Manyetik skymionlar, manyetizasyon yapısında ortaya çıkan, topolojik olarak korunan ve vortex benzeri spin konfigürasyonlarıyla karakterize edilen nanoskopik yapılardır. Bu yapılar, küçük boyutları, yüksek kararlılıkları ve düşük akım yoğunluklarıyla kontrol edilebilmeleri sayesinde dikkat çekmektedir. Geleneksel manyetik yapılara kıyasla çok daha düşük enerji gereksinimiyle hareket ettirilebilen skymionlar, enerji verimli veri depolama ve işleme teknolojileri için önemli bir adaydır. Bu bağlamda skymionics, skymion tabanlı sistemlerin spintronik ve nanoelektronik uygulamalarda kullanımını kapsayan gelişmekte olan bir araştırma alanıdır. Skymionların birkaç nanometre ölçeğine kadar küçülebilen boyutları ve dış etkilere karşı dayanıklı yapıları, onları geleceğin yüksek yoğunluklu ve düşük güç tüketimli bilgi taşıyıcıları olarak öne çıkarmaktadır [1,2]. Meronlar ve antimeronlar ise topolojik olarak skymionlardan ve antiskymionlardan farklıdır [3].

Bu çalışmada, skymionlar ve meronlar gibi topolojik manyetik yapıların kararlılığını ve dönüşümünü araştırmak için antiferromanyetik (AFM) katmanlar arası değişim etkileşimine sahip bir çift katmanlı sistemi incelemek üzere Monte Carlo simülasyonu kullanılmaktadır. Simülasyon sonuçlarımız, kolay düzlem anizotropisinin artmasının skymion kristal (SkX) fazını stabilize ettiğini ve meron-antimeron (MAX) kristal fazına geçişi tetiklediğini ortaya koymaktadır [4].

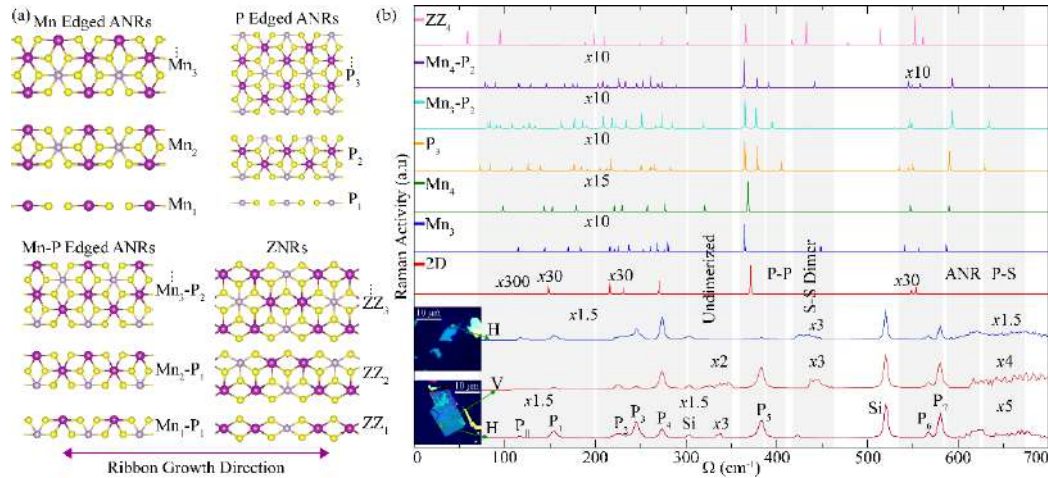
Sonuç olarak, çift katmanlı sistemler için kapsamlı bir faz diyagramı sunularak, antiferromanyetik olarak bağlanmış sistemlerin, uygulanan bir alan altında olup olmamasına ve anizotropinin doğasına bağlı olarak çeşitli topolojik yapılara (skymionlar, meronlar veya ara çoklu-Q yapılar) ev sahipliği yapabileceğini ve gelecekteki uygulamalar için bu yapıları kontrol etme yolları sunduğunu göstermektedir.

Kaynakça

1. Skyrme, T.H.R.: A unified field theory of mesons and baryons. Nuclear Physics 31, 556–569 (1962). [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(62\)90775-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(62)90775-7)
2. Nagaosa, N., & Tokura, Y. (2013). Topological properties and dynamics of magnetic skymions. Nature nanotechnology, 8(12), 899-911.
3. X.Z. Yu, et al., Transformation between meron and skymion topological spin textures in a chiral magnet, Nature 564 (2018) 95.
4. Doğan, G., & Akıncı, Ü. (2026). Skymion–meron transformation via an intermediate multi-Q state in a bilayer chiral magnet. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 649, 174116.

MnPS₃ Nanoşeritlerinde Genişlik ve Kenar Bağlı Özelliklerin İncelenmesiKadir Can Dogan,¹ Maria Ramos,² Mehmet Yagmurcukardes,³ Marco Gobbi,² ve Hasan Sahin^{3,4}¹*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir, Türkiye*²*Malzeme Fiziği Merkezi (Centro de Física de Materiales), 20018 Donostia-San Sebastián, İspanya*³*İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir, Türkiye*⁴*Sharjah Amerikan Üniversitesi, Sharjah, Birleşik Arap Emirlikleri*

Bu çalışmada, tek katmanlı manganez fosfor trisülfürün (MnPS₃) bir boyutlu nanoşeritleri, yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı hesaplamalar ve deneysel Raman spektroskopisi ölçümleri kullanılarak incelenmiştir. MnPS₃ tek katmanlarının yüksek simetrik kristalografik yönler boyunca kesilmesi, dört olası nanoşerit tipinin oluşmasına yol açmaktadır: Mn-Mn, P-P ve Mn-P kenarlı koltuk tipi ile zikzak kenarlı tip. Yapısal analizler, Mn-Mn veya Mn-P kenarlı koltuk tipi nanoşeritlerin genişliğe bağlı S-S dimerizasyonuna uğradığını, P-P kenarlı nanoşeritlerin ise eğimli P-P dambıllar oluşturduğunu göstermektedir; bu özellikler taramalı tünelleme mikroskobu görüntülerinde doğrudan gözlemlenebilmektedir. Manyetik olarak, koltuk tipi nanoşeritler Néel veya dimerize Néel antiferromanyetik düzeni stabilize ederken, zikzak tipi nanoşeritler, en dar iki durum hariç, genellikle ferromanyetik bir konfigürasyonu tercih etmektedir. Elektronik bant yapısı hesaplamaları, tüm koltuk tipi nanoşeritlerin yarı iletken davranış sergilediğini, en dar iki durum hariç tüm zikzak tipi nanoşeritlerin ise metalik olduğunu göstermektedir. Frekansa bağlı Raman aktivite hesaplamaları, MnPS₃ nanoşeritlerin kenar tipini ayırt etmeye olanak tanıyan karakteristik titreşim modlarının varlığını ortaya koymaktadır. Bu modlar, S-S dimerlerinden, S-P bağlarından ve dimerleşmemiş S atomlarından kaynaklanmakta olup, kenar yapısının ayırt edici imzaları olarak görev yapmaktadır. Elde edilen sonuçlar, MnPS₃ nanoşeritlerin elektronik, manyetik ve titreşimsel özelliklerinin kenar geometrisi ve şerit genişliği tarafından belirlendiğini göstermekte ve bu yapıların kenar mühendisliğine dayalı düşük boyutlu spintronik ve nanoelektronik uygulamalar için önemli bir potansiyele sahip olduğunu ortaya koymaktadır.



Şekil 1: MnPS₃ nanoşeritlerin (Mn-Mn, Mn-P, P-P kenarlı armchair ve Mn-S kenarlı zigzag) (a) yapısal görünüşleri ve (b) teorik ve deneysel Raman spektrumları.

Düşük boyutlu manyetik sistemlerde kenar geometrisi ve genişlik, ortaya çıkan fiziksel özellikleri kontrol eden temel parametrelerdir. İki boyutlu yapılardan bir boyutlu nanoşeritlere geçiş, kenar yeniden yapılanmaları ve kuantum sınırlama etkileri yoluyla elektronik ve manyetik davranışta önemli değişimlere yol açar.[1] Bu bağlamda MnPS₃ nanoşeritlerin yapısal, manyetik, titreşimsel ve elektronik özellikleri spin-polarize yoğunluk fonksiyonel teorisi ile incelenmiştir. Hesaplamalar Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) kullanılarak gerçekleştirilmiş ve değişim-korelasyon etkileri GGA+U yaklaşımı ile ele alınmıştır.

Kaynakça

1. Y.-W. Son, M. L. Cohen, S. G. Louie, "Energy gaps in graphene nanoribbons", Physical Review Letters 97, 216803(2006).

TrZr₃ (Tr = Co, Fe) Süperiletkenlerinin Lokal Yapısının Sıcaklığa Bağlı Evrimi : Negatif Termal Genleşme ile İlişkisi

M. Y. Hacısalihoğlu^{1,2,3}, M. Russo¹, Y. Mizuguchi⁴, N. L. Saini¹ ve G4 Grubu

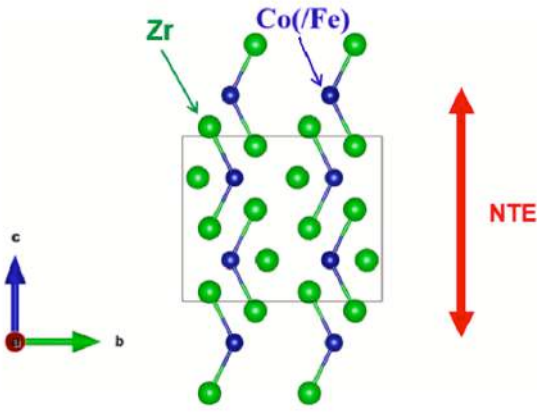
¹ Sapienza University of Rome, Department of Physics, 00185 Roma, İtalya

² Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06100 Ankara, Türkiye

³ Recep Tayyip Erdoğan University, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 53100 Rize, Türkiye

⁴ Tokyo Metropolitan University, Department of Physics, Tokyo, Japonya

Bu çalışma, ileri teknoloji uygulamaları açısından önemli bir malzeme sınıfı olan geçiş metali zirkonatlarından TrZr₃ (Tr= Co, Fe) süperiletkenlerinin lokal yapısını ve işgal edilmemiş elektronik durumlarını X-ışını soğurma ince yapı spektroskopisi (XAFS) kullanarak incelemektedir.



Şekil 1: CoZr₃ ve FeZr₃ bileşiklerinin ortorombik Re₃B tipi kristal yapısının, VESTA yazılımı kullanılarak c–b düzlemi boyunca yapılan izdüşümü. Negatif termal genleşme (NTE) yönü kırmızı ile vurgulanmıştır. NTE davranışında rol oynayan bağ ayrıca işaretlenmiştir.

Genişletilmiş X-ışını soğurma ince yapı (EXAFS) ölçümleri, sıcaklık artışıyla birlikte a ve b eksenleri boyunca uzanan bağların pozitif genleşme sergilediğini, buna karşın c-ekseni boyunca hizalanan bağların negatif termal genleşme (NTE) gösterdiğini ortaya koymuştur. Yapılan analizler, yaklaşık 3.08 Å

mesafesindeki spesifik bir Zr-Tr₂ bağ uzunluğunun bu anizotropik NTE davranışında kilit bir faktör olduğunu belirlemiştir.

Ortalama kare bağıl yer değiştirme (MSRD) parametresi kullanılarak yapılan incelemeler, NTE ile ilişkili bağlarda belirgin bir rijitlik zayıflaması ve yapısal düzensizlik olduğunu göstermiştir. Bu farkın özellikle bileşiminde daha yüksek olduğu ve bu sistemin kayda değer bir konfigürasyonel düzensizlik sergilediği saptanmıştır. Söz konusu düzensizliğin, lokal düzeydeki NTE etkisini ortalama kafes ölçeğinde sönmüleyerek malzemenin makroskopik olarak neredeyse sıfır termal genleşme (ZTE) sergilemesine neden olduğu saptanmıştır.

X-ışını soğurma kenara yakın yapı (XANES) analizleri ise, süperiletkenlik özelliklerinin, fonon frekanslarından ziyade, temel olarak Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu (DOS) tarafından yönetildiğini ileri ortaya koymaktadır. Elde edilen bu bulgular, Zr- esaslı sistemlerde süperiletkenlik ile NTE (negatif termal genleşme) arasındaki etkileşimi aydınlatmakta ve bu sistemlerin fonksiyonel özelliklerini modüle etmek için yeni yollar sunmaktadır.

Kaynakça

- 1 M. Russo, et al., *Temperature-dependent X-ray absorption study of the anisotropic negative thermal expansion of Co and Fe-based TrZr₃ compounds*, Materials Today Communications **48**, 113494 (2025).

Kenar Etkileri ve Sonlu Boyut Altında Tek Tabakalı NiI₂ Nanoparçacıklarında Skymion Oluşumu

Yalım Cansın Karacan , Yusuf Yüksel

Dokuz Eylül Üniversitesi - Fizik Bölümü , 35390 İZMİR

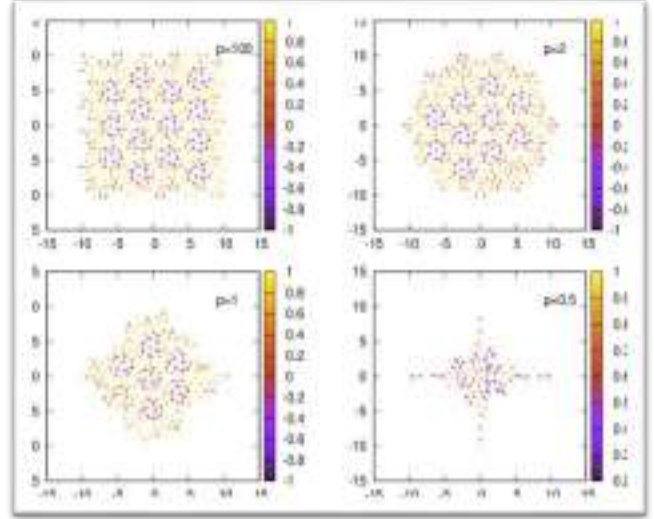
Bu çalışmada, tek tabakalı NiI₂ nanoparçacıklarında skymion oluşumu ve kararlılığı, sonlu boyut ve sınır etkileri bağlamında incelenmiştir. Nanoparçacık geometrisi Minkowski uzaklığı ile parametrik olarak tanımlanarak sınır şeklinin etkisi analiz edilmiştir. Metropolis algoritması tabanlı simülasyonlarla elde edilen sonuçlar, sınır geometrisinin skymion oluşumunda belirleyici olduğunu göstermektedir. Bu bulgular, topolojik manyetik fazların sistem geometrisi ile kontrol edilebileceğini ortaya koymaktadır.

Topolojik spin dokuları, özellikle skymionlar, yüksek kararlılıkları ve düşük enerji tüketimleri nedeniyle spintronik uygulamalar için güçlü adaylardır [1]. Bu çalışmada, tek tabakalı NiI₂ nanoparçacıklarında skymion ve türevi yapıların oluşumuna dair sonlu boyut ve kenar etkileri bağlamında Monte Carlo simülasyonları ile elde edilen sonuçlar paylaşılacaktır.

Gerçek nano yapılar da açık sınır koşulları ve geometrik hapsolme, manyetik düzeni belirleyen temel unsurlardır. Bu nedenle çalışmada nanoparçacık geometrisi Minkowski uzaklığı ile parametrik olarak tanımlanarak sınır şeklinin sistematik biçimde kontrol edilmesi sağlanmıştır.

Metropolis algoritmasına dayalı simülasyonlar [2] ile manyetizasyon, özgül ısı ve topolojik yük gibi nicelikler hesaplanmıştır. Sonuçlar, sınır geometrisinin skymion oluşumu ve kararlılığı üzerinde belirleyici bir rol oynadığını göstermektedir.

Bu çalışma, topolojik manyetik fazların yalnızca etkileşim parametreleriyle değil, aynı zamanda sistem geometrisiyle de kontrol edilebileceğini ortaya koymakta ve nanomanyetik sistem tasarımına yönelik önemli bir kuramsal çerçeve sunmaktadır.



Şekil 1: Farklı Minkowski normu (p) değerleri için NiI₂ nanoparçacıklarında spin dizilimleri. p parametresindeki değişim, parçacık geometrisini kare ($p = 100$) formundan elmas ($p = 1$) ve konkav ($p = 0.5$) formuna dönüş

Kaynakça:

1. Barone P. Picozzi S Amoroso, D. Spontaneous skymionic lattice from anisotropic symmetric exchange in a ni-halide monolayer. Nature Communications, 11:5784, October 2020.
2. Binder K. Landau, D. P. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, 2000.

Safsızlık Olmadan Lokalizasyon ile Klasik Safsızlık Fiziğinin Bağlantısı

Fırat Yılmaz

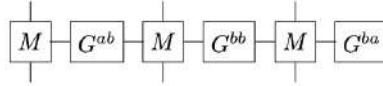
ENQUBT, Entegre Kuantum Bilişim Teknolojileri A. Ş., İstanbul 34467, Türkiye

Son yıllarda, safsızlık fiziğinin ötesinde, sistem boyutuyla doğru orantılı olarak artan sistem simetrilerinin olduğu sistemlerde, safsızlık olmadan lokalizasyon çatısıyla -özellikle dinamik sistemlerde- modeller tartışıldı. Bu sunumda, bahsi geçen sistemlerin bir çoğunun aslında safsızlık fiziğinin bir alt kategorisi olduğunu göstereceğim ve bu iki başlık arasındaki sınırın nereden çekileceğine dair edindiğim gözlemleri paylaşacağım. Bu çerçevede, örgü ayar teorilerindeki safsızlık fiziğiyle bağlantılara odaklanacağım.

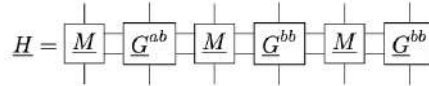
Yer-bağımlı ve diyagonal-olmayan düzensizlik fiziğinin [1], literatürde Blackman–Esterling–Berk (BEB) düzensizliği olarak bilinen formülasyonu için bir matris çarpım durumu (Matrix Product State, MPS) ve matris çarpım operatörü (Matrix Product Operator, MPO) temsili geliştiriyoruz. Bu çalışma, geleneksel düzensizlik modellerinin tensor-ağ dili içerisinde ifade edilmesine yönelik bir adım niteliğindedir.

Geliştirilen formülasyon, düzensizlik konfigürasyonlarının doğrudan tensor-ağ formalizmi içinde kodlanmasını ve ortalanmasını sağlayan sistematik bir çerçeve sunar. Böylece, düzensiz kuantum sistemlerinin DMRG-tipi algoritmalar kullanılarak incelenmesi için pratik bir yol açılır. Bu yaklaşım, özellikle Hubbard etkileşmesi gibi kritik terimlerin pertürbatif olmayan (non-perturbatif) düzeyde dahil edilmesine olanak sağlayabilecek ideal bir platform sunmaktadır.

Düzensizlik konfigürasyonları bağ-tensörlerine şekilde dönüştürülür:



G^{ab} düzensizlik tensörleri, daha sonrasında lokal Hilbert uzayına sahip MPO'lara dönüştürülerek



haline getirilir. En basit safsızlık (impurity) durumundan başlanarak, etkileşimsiz Anderson modeli [2], yerel korunmuş simetrilere sahip olmaksızın spinler aracılığıyla bağlanan bir fermiyonik model biçiminde [3] yeniden formüle edilmektedir. Bu eşlemede, bağımsız ve özdeş dağılımlı safsızlıklar eşit ağırlıklı yardımcı spin sektörleri olarak temsil edilirken, düzensizlik konfigürasyonlarının istatistiksel korelasyonları MPO yapısı içinde kodlanmaktadır.

Ayrıca, bu çerçevenin yerelleşme imzalarını yakalayıp yakalayamadığını incelemek amacıyla bir başlangıç (warm-up) DMRG hesabı gerçekleştirilmiştir. İki-nokta Green fonksiyonlarının yerelleşmeyi karakterize etmek için yeterli olmaması nedeniyle, bunun yerine yerelleşmiş fazın doğrudan bir göstergesi olarak DC iletkenliği $\sigma_{\alpha\beta}(\omega \rightarrow 0)$ hesaplanmaktadır.

Bu tensor-ağ yeniden formülasyonu, düzensizlik fiziği ile ortaya çıkan (emergent) ayar yapıları sergileyen modeller [4] arasında bir bağlantı kurmak için temel bir zemin oluşturmaktadır. Eşlik eden çalışmada bu çerçeve, kuantum bağ (quantum link) modelleri ile ilişkisini ve güncel araştırma konularından biri olan düzensizliksiz yerelleşme (disorder-free localization) bağlamında ergodisite kırılmasını inceleyecek şekilde genişletilmektedir.

Kaynakça

- [1] J. A. Blackman, D. M. Esterling, and N. F. Berk, Generalized Locator—Coherent-potential approach to binary alloys, *Phys. Rev. B* 4, 2412 (1971). D. M. Esterling, Simplified derivation of the matrix coherent-potential approximation for off-diagonal random alloys, *Phys. Rev. B* 12, 1596 (1975).
- [2] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, *Phys. Rev.* 109, 1492 (1958).
- [3] B. Paredes, F. Verstraete, and J. I. Cirac, Exploiting quantum parallelism to simulate quantum random many-body systems, *Physical Review Letters* 95, 140501 (2005).
- [4] A. Smith, J. Knolle, D. L. Kovrizhin, and R. Moessner, Disorder-free localization, *Phys. Rev. Lett.* 118, 266601 (2017). M. Brenes, M. Dalmonte, M. Heyl, and A. Scardicchio, Many-body localization dynamics from gauge invariance, *Phys. Rev. Lett.* 120, 030601 (2018). P. Karpov, R. Verdel, Y.-P. Huang, M. Schmitt, and M. Heyl, Disorder-free localization in an interacting 2D lattice gauge theory, *Physical Review Letters* 126, 130401 (2021).

POSTER SUNUMLARI

Çift Eksenli Kristal Alan Altındaki Spin-1 Ising Modelinin Manyetik Durulma Kuramı

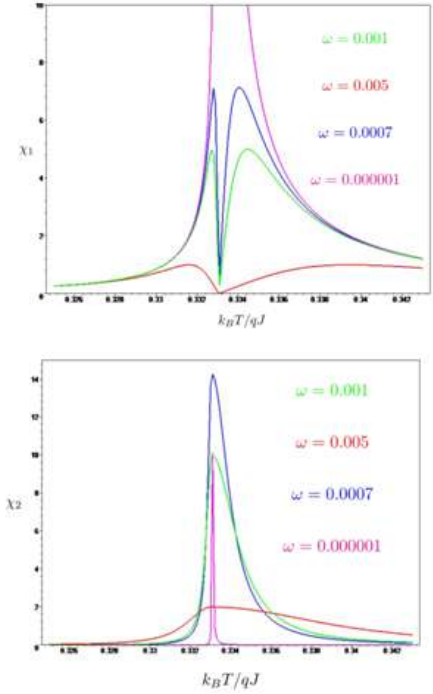
Bahar Alinaghi Hossein Abadi^{*1}, Gül Gülpınar¹¹ Dokuz Eylül Üniversitesi - Fizik Bölümü, 35160 İzmir

*bahar.alinaghihosseinabadi@ogr.deu.edu.tr

Çift eksenli spin-1 Ising modelinin termal faz geçişleri civarındaki manyetik durulma davranışları, denge istatistik mekaniği ile tersinmez termodinamik teorisini sentezleyen bir yöntemle incelenmiştir. $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - D_x \sum_i (S_i^x)^2 - D_y \sum_i (S_i^y)^2$ Hamiltoniyeni ile açıklanan modelde çift eksenli kristal alanın varlığı, kuantum etkileri nedeniyle faz geçişinin doğasını değiştirmekte ve sandviç yapılarındaki manyetik olmayan ara katman kalınlığına bağlı etkileri anlamada başarı sergilemektedir. Bu çalışmada, kuantum dalgalanmaların spin-1 Ising modelinin manyetik durulma süreçleri üzerine etkilerine odaklandık.

D_x ve D_y terimleriyle betimlenen enine kristal alanın varlığı, kuantum etkileri nedeniyle faz geçişinin doğasını değiştirmekte ve makroskobik düzen üzerindeki rekabeti belirlemektedir. Metodolojik olarak Landau Teorisi üzerine kurgulanan bu yaklaşımda, faz diyagramı elde edildi.

Manyetik durulma süreçlerini betimleyen karmaşık alinganlık ifadesini türetmek amacıyla, Landau Khalatnikov kinetik denklemleri iki farklı dış alan formu için sayısal olarak çözüldü: İlk aşamada, darbe formunda dış alana cevap incelendi durulma zamanları elde edildi. Ardından salınımlı dış alan mevcut iken kinetik denklemin kararlı hal çözümlerinden karmaşık alinganlık ifadesine elde ettik. Enine kristal alan (D_y) anizotropisi kaynaklı kuantum dalgalanmalarının sistemin dinamik cevabı üzerindeki etkisini belirlemek amacıyla karmaşık alinganlığın ($\chi_c = \chi_1(\omega, T) + i\chi_2(\omega, T)$) dispersiyon (χ_1) ve absorpsiyon (χ_2) faktörlerinin sıcaklıkla değişimleri çalışıldı. Enerji kayıplarını simgeleyen absorpsiyon, enerji depolanmasını temsil eden dispersiyon ikinci derece, birinci derece ve üçlü kritik noktalar (TCP) yakınında sıcaklık ve frekans değişimleri detaylıca incelendi. Düşük frekans rejiminde ($\omega\tau \ll 1$) kritik yavaşlama, dispersiyon faktöründe bir iraksama, absorpsiyon katsayısında simetrik bir pik gözlemlenmiştir. Yüksek frekans ($\omega\tau \gg 1$) rejiminde ise dispersiyon katsayısının sürekli geçişlerde sıfır değerine yöneldiği, absorpsiyon katsayısının ise geniş bir tepe sergilediği saptanmıştır. Bu sonuçlar, kuantum dalgalanmaları içeren manyetik sistemlerin kararlı hal cevabına dair önemli teorik çıkarımlar sağlamaktadır.



Şekil 1: Kristal Alan Altındaki Spin-1 Ising Modelinin a) dispersiyon, b) absorpsiyon faktörlerinin üçlü kritik nokta komşuluğundaki termal davranışları. $D_y/qJ = 0.5$ iken TCP koordinatları: $(D_x/qJ, k_B T/qJ) = (0.4243, 0.3330)$.

- [1] J. Ricardo, N. S. Branco. Variational-method study of the spin-1 Ising model with biaxial crystal-field anisotropy. *Physica E*, 77(1), Article 012104 (2008).
- [2] H. B. Nie, C. K. Ong, J. P. Wang, and Z. W. Li, *J. Appl. Phys.* 93 (2003) pp. 7252–7254.
- [3] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. "Theory of dynamic critical phenomena". *Reviews of Modern Physics*, 49(3) (1977) pp. 435–479.

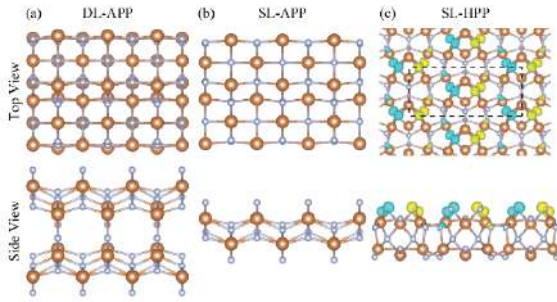
Sb₃N₅'te Boyutsallığa Bağlı Altermanyetizma ve Gerilim ile Ayarlanabilen Metal Yarı İletken Geçişi

Barış Yılmaz¹, Kadir Can Doğan¹, Uygur Berke Gür¹, Mehmet Yağmurdokardeş²

¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

²Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

Bu çalışmada, Sb₃N₅'in elektronik ve manyetik özelliklerinin boyutsal indirgemeye bağlı evrimi; yoğunluk fonksiyoneli teorisine dayalı ilk prensipler hesaplamaları kullanılarak, yığınsal halden iki boyutlu sınıra (çift ve tek katmanlı) kadar ortam ve yüksek basınç fazları karşılaştırılarak sistematik bir şekilde incelenmiştir. Fonon dağılım analizleri, yığınsal ve düşük boyutlu Sb₃N₅ yapılarının dinamik olarak kararlı olduğunu doğrulamaktadır. Yığınsal sınırdan, ortam basıncı fazı dolaylı bant aralıklı bir yarı iletken iken, yüksek basınç fazı metaliktir. Boyutsal indirgeme, çift katmanlı ortam basıncı formunun metalik karakterini korur, ancak tek katmanlı karşılığını doğrudan bant aralıklı bir yarı iletkeneye dönüştürür. Tüm yığınsal ve ortam basıncı düşük boyutlu fazlar yapısal olarak manyetik değildir. Buna karşılık, tek katmanlı yüksek basınç fazı tersinme simetrisini kırar ve çizgili bir antiferromanyetik taban durumunu stabilize ederek altermanyetik yarı iletken bir faz ortaya çıkarır. Çift eksenli gerilim altında, ortam basıncı fazları ayarlanabilir metal-yarı iletken geçişleri ve doğrudan-dolaylı bant aralığı değişimleri sergilerken, tek katmanlı yüksek basınç fazı dolaylı bant aralıklı bir yarı iletken olarak kalır. Dahası, gerilim mühendisliği, altermanyetik spin ayrılmasının birkaç on meV seviyesinde modüle edilmesini sağlar. Genel olarak Sb₃N₅, boyutsal hapsolmanın ve gerilimin ayarlanabilir elektronik özellikler ile yeni altermanyetik işlevsellikler sağladığı, simetriye duyarlı düşük boyutlu bir platform olarak öne çıkmaktadır.



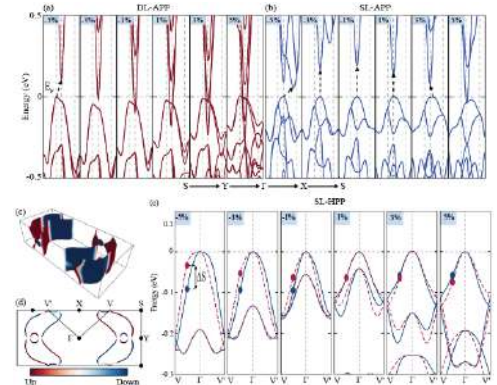
Şekil 1: Düşük boyutlu Sb₃N₅ yapılarının; (a) çift katmanlı ortam basıncı (DL-APP), (b) tek katmanlı ortam basıncı (SL-APP) ve (c) tek katmanlı yüksek basınç (SL-HPP) formları için optimize edilmiş üstten ve yandan görünüşleri.

Hesaplamalar, VASP ve GGA fonksiyoneli kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Şekil 1'de geometrileri sunulan 2B Sb₃N₅ formları incelendiğinde, boyutsal indirgemenin özellikle SL-HPP formunda tersinme simetrisini (inversion symmetry) kırarak çizgili antiferromanyetik (s-AFM) bir taban durumu oluşturduğu görülmektedir.

Şekil 2'deki elektronik bant yapıları, sistemin altermanyetik doğasını ve gerilime karşı duyarlılığını detaylandırmaktadır. Net bir makroskopik mıknatıslanma olmamasına

Kaynakça

1. M. Ceppatelli, M. Serrano-Ruiz, M. Morana, et al., "High-pressure and high-temperature synthesis of crystalline Sb₃N₅", *Angewandte Chemie* 136, e202319278 (2024).
2. L. Šmejkal, J. Sinova, T. Jungwirth, "Beyond conventional ferromagnetism and antiferromagnetism: A phase with nonrelativistic spin and crystal rotation symmetry", *Physical Review X* 12, 031042 (2022).



Şekil 2: İki eksenli gerilim altında (a) DL-APP ve (b) SL-APP yapılarının elektronik bant yapılarındaki evrim ile (c) SL-HPP fazına ait spin yarılmalarının gerilime bağlı değişimi.

rağmen, SL-HPP formunda spin-yörünge etkileşiminden (SOC) bağımsız olarak ortaya çıkan momentum bağımlı spin yarılmaları, altermanyetizmanın doğrudan kanıtıdır. Ek olarak Şekil 2, uygulanan iki eksenli gerilimin DL-APP ve SL-APP formlarında elektronik bant yapılarını modüle ettiğini (Şekil 2a-b); SL-HPP formunda ise altermanyetik spin yarılmalarının büyüklük ve işaretinin sistematik olarak kontrol edilmesine olanak tanıdığını kanıtlamaktadır.

Trimodal Ising Modeli: Manyetik Durulması ve AC Alınganlığı

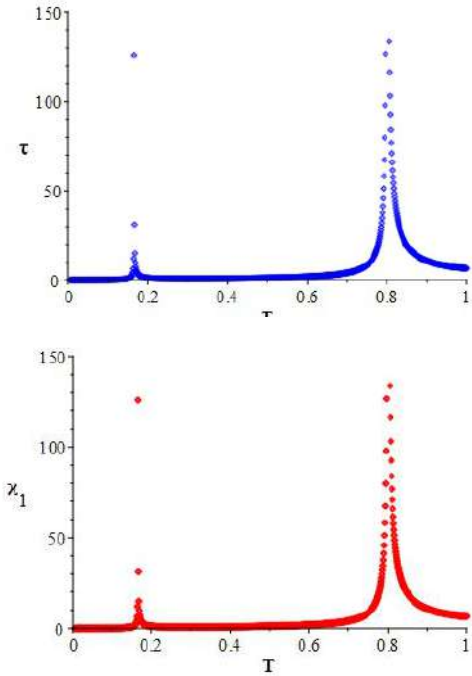
Beyza KILIÇ, Gül GÜLPINAR

Dokuz Eylül Üniversitesi, Fizik Bölümü, 35390 İzmir

Trimodal Rastgele Alan Ising Modeli; seyreltilmiş manyetik malzemelerden sinir ağlarına ve sosyal dinamiklere kadar geniş bir yelpazede, safsızlıkların yarattığı faz geçişlerini açıklayan temel bir araçtır. Rastgele alanın $P(h) = \frac{p}{2}[\delta(h - h_0)\delta(h + h_0)] + (1 - p)\delta(h)$ olasılık dağılımı uyarınca örneklendiği bu modelde sistemdeki kararlı eğilimler ile nötr durumlar arasındaki rekabetin makroskobik düzen üzerindeki etkilerini açıklamaktadır [1]. Bu çalışma, "söndürülmüş düzensizlik" içeren yapıların dinamik manyetik özelliklerini anlamak amacıyla model kapsamlı bir şekilde incelemekte; denge istatistik mekaniği ile doğrusal cevap teorisini birleştirerek durulma zamanları ve karmaşık manyetik alınganlık ($\chi_c = \chi_1(\omega) - i\chi_2(\omega)$) analizlerine odaklanmaktadır.

Metodolojik olarak Landau Teorisi ve Model A dinamikleri üzerine kurgulanan bu yaklaşımda, ilk olarak sistemin denge faz eğrileri Landau teorisiyle elde edilmiştir. Trimodal rastgele alan Ising modelinde $p = 0$ "saf" ve $p = 1$ "bimodal" limitleri temsil ederken; $p \in [0,1]$ aralığı düzensizliğin baskın olduğu trimodal yapıyı karakterize etmektedir [1,2]. Araştırma bulguları, $p < 1$ durumunda yeni düzenli fazların ortaya çıktığını göstermiştir [3]. Sistemin faz diyagramı incelendiğinde; $p = 0.33, 0.67, 0.80$ gibi spesifik değerlerde üçlü kritik noktalar ile kritik son noktaların oluştuğu saptanmıştır. Ayrıca, $p < 0.73$ değerlerinde düzen-düzensizlik faz sınırının bir λ -hattına dönüştüğü ve $p < 0.76$ sınırının altında ise sistemdeki üçlü kritik noktanın tamamen ortadan kalktığı belirlenmiştir.

Denge faz geçişlerinin belirlenmesine takiben, sistemin dinamik karakterini incelemek amacıyla korunmayan düzen parametresi için kinetik denklem kurgulanarak durulma zamanını veren analitik ifadeler türetilmiştir Söz konusu kinetik denklemin salınımlı bir dış alanın varlığı halinde çözümlenerek, karmaşık AC alınganlığın frekans ve durulma zamanına bağlı olan Debye formu elde edilmiştir. Bu bağlamda, alınganlığın dispersiyon katsayısı χ_1 manyetik enerjinin depolanmasını, absorpsiyon faktörü χ_2 ise sistemdeki fiziksel kayıpları temsil etmektedir. Bu form uyarınca χ_1 ve χ_2 değerlerinin sıcaklık ile değişimleri iki ayrı rejimde ele alınabilir: ($\omega\tau \ll 1$) düşük frekansta χ_1 değerinin arttığı, ($\omega\tau \gg 1$) yüksek frekansta ise χ_2 değerinin sifira yaklaştığı ve yerel maksimumlar sergilediği belirlenmiştir. Dinamik analizler ve manyetik durulma süresi τ incelemeleri sonucunda, tüm sürekli geçiş noktalarında reel kısmın "kritik yavaşlama" olgusuyla uyumlu olarak iraksadığı, birinci dereceden geçişlerde ise durulma süresinde sonlu sıçramaların meydana geldiği saptanmıştır.



Şekil 1: Trimodal Rastgele Alan Ising Model'inde $h_0 = 0.835$ ve $p = 0.330$ için gözlemlenen ardışık faz geçişleri civarında durulma zamanı (τ) ve manyetik dispersiyon (χ_1) faktörünün, sıcaklık (T) ile değişimleri.

Elde edilen sonuçlar, kritik yavaşlamanın gözlemlendiği sürekli faz geçişi çerçevesinde durulma zamanının ve $\omega = 0$ limitinde dispersiyon faktörünün iraksama sergilediğini ortaya koymuştur; bu durum literatürdeki kritik yavaşlama fenomeniyle tam bir uyum içindedir. Düşük frekans rejiminde χ_1 faktörü frekansla artan pikler sergilerken, yüksek frekans rejiminde ise χ_2 faktörü frekansla azalan pikler, yerel maksimum, sergilemiştir. Bunun yanı sıra, yüksek frekans rejiminde manyetik sistem sürücü kuvveti takip edememiş ve χ_1 faktörü sürekli geçişler yakınında sıfır değerini almıştır.

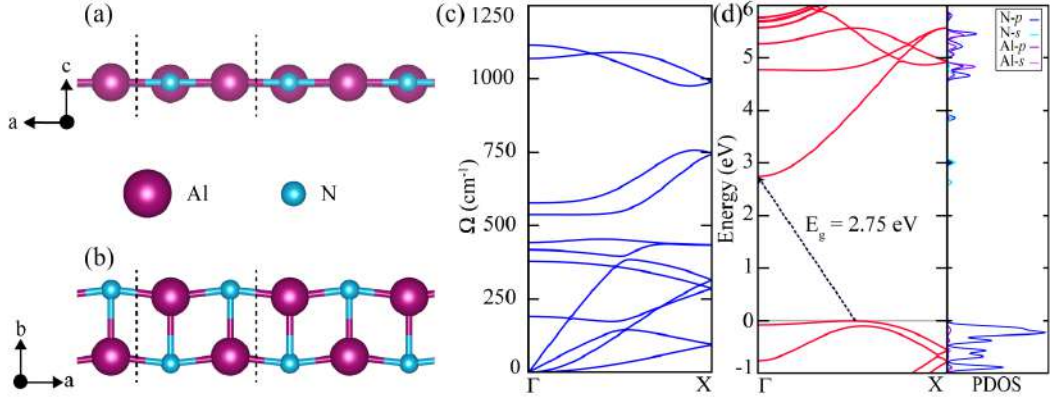
Kaynakça

1. M. Kaufman, P. E. Klunzinger, and A. Khurana. "Multicritical points in an Ising random-field model", Physical Review B, 34(7):1986, pp.4766–4770.
2. Amnon Aharony. "Tricritical points in systems with random fields". Physical Review B, 18(7):1978, pp.3318–3327.
3. Serge Galam and Joseph L. Birman. "Random-field distributions and tricritical points", Physical Review B, 28(9):1983, pp.5322.

AlN Nanoşeritlerin Elektronik ve Titreşimsel Özellikleri: Birincil Prensipler Çalışması

Beyza Pırl Özçelik^{*1}, Yağmur Bozkurt², Mehmet Yağmurcukardeş²¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye²Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

İki boyutlu (2B) Alüminyum nitrid (AlN), geniş bant aralığı, yüksek termal kararlılığı ve optoelektronik uygulamalardaki potansiyeli nedeniyle önemli bir III-V yarı iletken malzemedir[1]. Düşük boyutlu sistemlerde boyut indirgemesi, malzemelerin elektronik ve titreşimsel özelliklerinde belirgin değişimlere yol açabilmektedir. Bu çalışmada, çift katmanlı (bilayer) 2B AlN yapısından türetilen bir boyutlu (1B) AlN nanoşerit yapısının elektronik ve titreşimsel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) kapsamında incelenmiştir[2].



Şekil 1: Bir boyutlu AlN nanoşeritlerinin a) üstten ve b) yandan görünümü, c) Fonon bant dağılımı, d) Elektronik bant yapısı ve ona karşılık gelen atomik gösterimli kısmi durum yoğunluğu (PDOS)

Bu bulgular, boyut indirgemesinin AlN tabanlı Hesaplamalar Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) kullanılarak gerçekleştirilmiş olup, değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) ile tanımlanmıştır[3,4]. Elektronik özellikler bant yapısı hesaplamaları ile analiz edilirken, titreşimsel özellikler fonon bant dağılımı üzerinden değerlendirilmiştir.

Elde edilen sonuçlar, fonon bant dağılımı incelendiğinde, tüm Brillouin bölgesi boyunca hayali frekansların bulunmaması, yapının dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Ayrıca, fonon spektrumunda akustik ve optik modlar arasında belirgin bir ayırım gözlenmiş olup, yüksek frekanslı optik modların varlığı güçlü atomik bağ etkileşimlerine işaret etmektedir.

AlN nanoşerit yapısının yaklaşık 2.75 eV bant aralığına sahip olduğunu ve bu bant aralığının dolaylı (indirect) karakter gösterdiğini ortaya koymaktadır. Bant yapısı analizi, malzemenin yarı iletken doğasını doğrulamaktadır. Kısmi durum yoğunluğu (PDOS) incelemeleri, bant kenarlarının ağırlıklı olarak N ve Al atomlarının p-orbitalleri tarafından belirlendiğini göstermektedir. Bu durum, elektronik yapıdaki bağ karakteri ve bant oluşumu hakkında önemli bilgiler sunmaktadır.

Bu bulgular, boyut indirgemesinin AlN tabanlı sistemlerin elektronik ve titreşimsel özellikleri üzerindeki etkisini ortaya koymakta ve bu tür düşük boyutlu yapıların nanoelektronik uygulamalar için potansiyel adaylar olduğunu göstermektedir.

Kaynakça

1. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys", *Journal of Applied Physics* 89, 5815–5875 (2001).
2. W. Kohn, L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Physical Review* 140, A1133–A1138 (1965).
3. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", *Physical Review Letters* 77, 3865–3868 (1996).
4. G. Kresse, J. Furthmüller, "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set", *Physical Review B* 54, 11169–11186 (1996).

ZnO İnce Filmlerin Büyütülmesi ve Fotokatalitik Aktiviteye Kalınlık Etkisi

Buse Selenay BASARAN¹, Fatih ERSAN², Erkan FIRINCI³

¹*Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü - Fizik ABD, 09010*

²*Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Fakültesi - Fizik Bölümü, 09010*

³*Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Fakültesi - Kimya Bölümü, 09010*

ZnO ince filmleri, oda sıcaklığında geniş bant aralığına (3.37 eV) ve yüksek eksiton bağlanma enerjisine sahip n-tipi bir metal oksit yarıiletkenidir [1]. Yüksek elektriksel iletkenlikleri ve optik geçirgenlikleri sayesinde, bu filmler başta güneş pili aygıtları olmak üzere optoelektronik elektrotlar, ışık yayan diyotlar, lazer diyotlar ve gaz sensörleri gibi pek çok teknolojik uygulamada yaygın olarak kullanılmaktadır. ZnO ince filmler farklı yöntemlerle üretilmekle birlikte, sol-jel yöntemi geniş yüzeylere düşük maliyetle uygulanabilmesi ve film kompozisyonunun kolay kontrol edilebilmesi nedeniyle öne çıkmaktadır. Bu çalışmada, ZnO ince filmler cam altlıklar üzerine döndürerek kaplama yöntemiyle büyütülmüş olup, 2-metoksietanol içerisinde hazırlanan 0.5 M Zn(OAc)₂·2H₂O çözeltisi kullanılmıştır. Filmler, önceden temizlenmiş cam yüzeyler üzerine 2000, 3000, 4000 ve 5000 rpm döndürme hızlarında kaplanmış ve ardından 500 °C’de tavlannmıştır. Elde edilen filmlerin optik ve elektronik özellikleri UV-Vis spektrofotometre ve fotoluminesans (PL) ölçümleri ile, yapısal özellikleri ise X-ışını kırınımı (XRD) ve Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) analizleri ile incelenmiştir. XRD sonuçları, ZnO filmlerinin cam yüzey üzerinde kristal yapı oluşturduğunu ve (002) düzleminde, $2\theta \approx 34.95^\circ$ ’de baskın bir pik sergilediğini göstermiştir. AFM kesit analizlerine göre, film kalınlıklarının 2000, 3000, 4000 ve 5000 rpm döndürme hızları için sırasıyla ortalama 49, 26, 24 ve 19 nm olduğu belirlenmiştir. Bu sonuçlar, döndürme hızının artmasıyla film kalınlığının azaldığını açıkça ortaya koymaktadır. UV-Vis ölçümlerinden elde edilen soğurma, geçirgenlik ve yansıtma verileri ile Tauc yaklaşımı kullanılarak farklı kalınlıklardaki ZnO filmlerin optik bant aralıkları hesaplanmıştır. Sonuçlar, döndürme hızının artmasıyla enerji bant aralığının da arttığını göstermektedir. Büyütülen filmlerin yüzey özelliklerini değerlendirmek amacıyla su temas açısı ölçümleri, her bir numune için 10 gün boyunca günlük aralıklarla tekrarlanmış ve zamanla meydana gelen değişimler incelenmiştir. Ayrıca, farklı döndürme hızlarında üretilen ZnO ince filmlerin metilen mavisinin (MM) fotokatalitik bozunmasındaki etkileri araştırılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda, 50 mg/L MM derişiminde 24 saat sonunda en yüksek fotokatalitik aktivitenin 5000 rpm’de büyütülen ZnO ince filmde elde edildiği belirlenmiştir. Bu bulgular literatür ile uyum göstermektedir [2,3]. Hazırlanan filmler desikatör ortamında muhafaza edilmiş ve olası bozunmalar belirli aralıklarla gerçekleştirilen spektroskopik ölçümlerle izlenmiştir. Sonuçlar, filmlerin desikatör altında saklanması durumunda kararlılıklarını koruduklarını göstermektedir.

Teşekkür: Bu çalışma, 125F056 numaralı proje kapsamında TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça

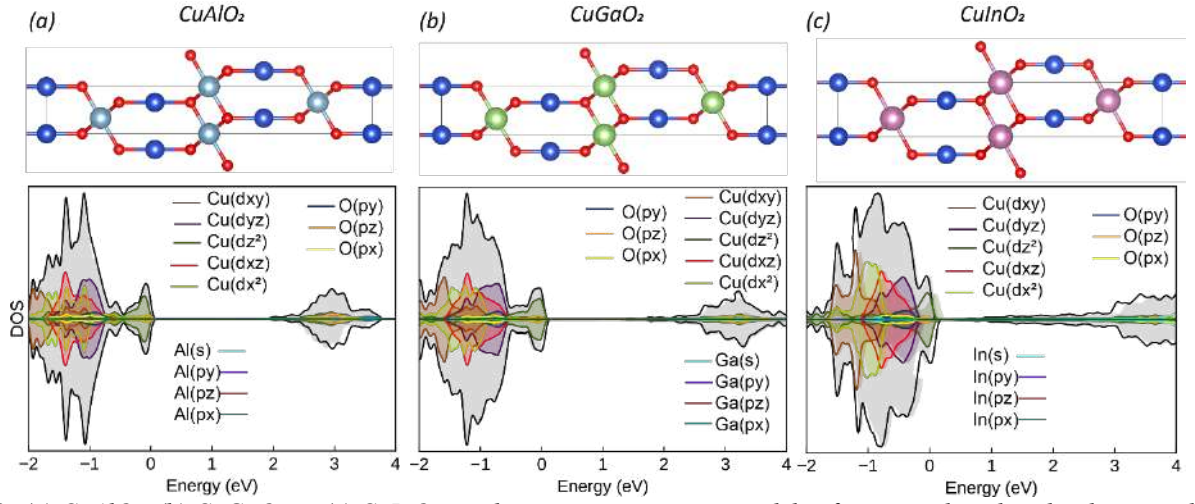
1. Smirnov, M., Baban, C., & Rusu, G. I. (2010). Structural and optical characteristics of spin-coated ZnO thin films. *Applied surface science*, 256(8), 2405-2408.
2. Poongodi, G., Anandan, P., Kumar, R. M., & Jayavel, R. (2015). Studies on visible light photocatalytic and antibacterial activities of nanostructured cobalt doped ZnO thin films prepared by sol-gel spin coating method. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 148, 237-243.
3. Vijayabalan, A., Sivakumar, A., Babu, N. S., & Amalorpavadoss, A. (2019). Photocatalytic activity of Zr doped ZnO and its morphology. *Int J Bioorganic Chem*, 4(1), 14-18.

CuXO₂ (X = Al, Ga, In) Delafossite Bileşiklerinde Elastik ve Optik Anizotropinin Bileşime Bağlı Evrimi

Doğukan Tutar¹, Mehmet Yağmurdokardeş¹, Oktay Aktaş¹

¹ Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Turkey

CuXO₂ (X : Al, Ga, In) delafossite bileşikleri, yön bağımlı fiziksel özellikleriyle dikkat çeken malzemelerdir[1]. Özellikle bu sistemlerin optik anizotropisi literatürde daha önce raporlanmış[2] ve optoelektronik açıdan önemli bulunmuştur. Aynı kristal yapıyı korurken X atomunun değişmesi, yapıda ve bağ karakterinde sistematik farklılıklar oluşturmaktadır. Bu da bileşime bağlı yapısal değişimlerin elastik, optik ve elektronik özelliklere nasıl yansıtıldığını incelemek için bu malzeme ailesini uygun bir model sistem haline getirmektedir.



Şekil 2: (a) CuAlO₂, (b) CuGaO₂ ve (c) CuInO₂ yapılarının yan görünüş atomik konfigürasyonları ile orbital ayrıştırılmış kısmi durum yoğunluğu sonuçları.

Bileşik	A ^U	Δn(532nm)	Kafes Sabiti(Å)	Cu-O(Å)	X-O(Å)
CuAlO ₂	2.29	0.88	2.86	1.83	1,91
CuGaO ₂	2.32	0.73	3.01	1.86	2,01
CuInO ₂	2.74	0.43	3.35	1.88	2,21

Tablo 1: CuAlO₂, CuGaO₂ ve CuInO₂ bileşikleri için hesaplanan evrensel elastik anizotropi indeksi (A^U), 532 nm'deki kırılma indisi farkı (Δn), kafes sabiti ile Cu-O ve X-O bağ uzunlukları.

Bu çalışmada, delafossite yapılu CuXO₂ (X = Al, Ga, In) bileşiklerinin bileşime bağlı yapısal, elastik, optik ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisine (YFT) dayalı hesaplamalarla incelenmiştir. Sonuçlar, Al'dan In'a gidildikçe örgü parametrelerinin arttığını, Cu-O bağ uzunluğunun hafifçe artarken X-O bağ uzunluğunun belirgin biçimde arttığını göstermektedir. Elastik analizler, özellikle C₃₃ değerindeki güçlü azalma ve C₁₁ bileşenindeki daha sınırlı değişim nedeniyle elastik anizotropinin arttığını ortaya koymaktadır. Buna karşılık optik sonuçlar, dielektrik tensör bileşenleri arasındaki farkın azalmasıyla optik anizotropinin zayıfladığını göstermektedir. Elektronik yapı analizleri ise Al'dan In'a gidildikçe X atomundan gelen, özellikle s orbitallerine ait katkıların band kenarlarında daha belirgin hale geldiğini göstermektedir. Elde edilen bulgular, CuXO₂ ailesinde gözlenen elastik ve optik anizotropi eğilimlerinin bileşime bağlı elektronik yapı değişimleriyle yakından ilişkili olduğunu ortaya koymaktadır.

Kaynakça

1. R. Gillen, J. Robertson, "Band structure calculations of CuAlO₂, CuGaO₂, CuInO₂, and CuCrO₂ by screened exchange", Phys. Rev. B 84, 035125 (2011).
2. B. Kang, J. Shin, M. Kang, U. Choi, U. Seo, K. Chung, J. M. Ok, H. Jin, "Colossal optical anisotropy in wide-bandgap semiconductor CuAlO₂", (2024).

h-BN Üzerinde Au Atom Ağları Kullanarak Atomik Ölçekte Programlanabilir Mantık Kapılarının Tasarımı

¹E. Binbuğa, ¹B. Şaşmaz, ^{1,2}R. T. Senger

¹İzmirEkonomi Üniversitesi, Fizik Bölümü

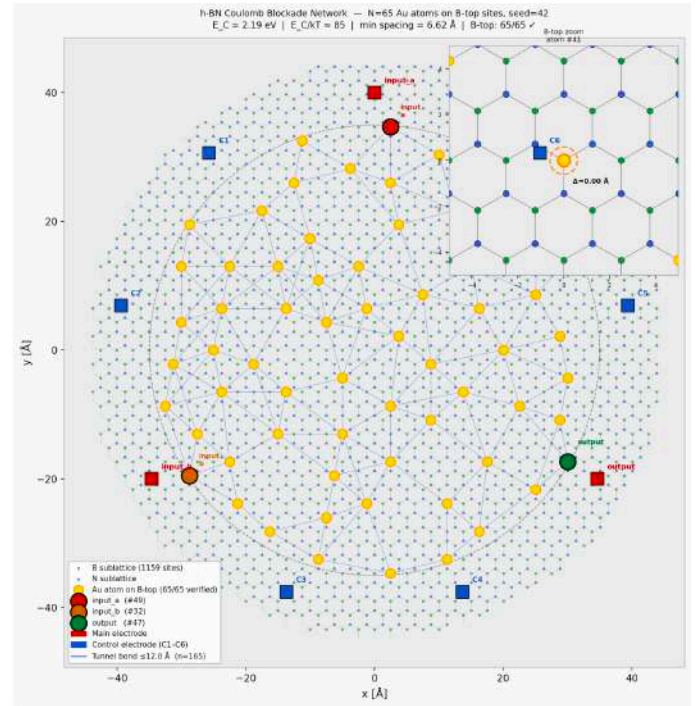
²Karmaşık Sistemler Araştırma ve Uygulama Merkezi (EkoKarSiM), İzmir Ekonomi Üniversitesi

Bu çalışmada, altıgen bor nitrid (h-BN) yüzeyi üzerinde yer alan 65 altın (Au) atomundan oluşan bir ağın, oda sıcaklığında (300 K) yeniden yapılandırılabilir Boole mantık kapıları (AND ve OR) olarak işlev görmesi modellenmiştir. Çalışmanın temel motivasyonu, Bose ve ark. (2015) tarafından ~20 nm çapında altın nanoparçacıklarının oluşturduğu bir ağda, 0.3 K gibi çok düşük sıcaklıklarda gösterilen mantık davranışını, çok daha küçük atomik ölçeğe ve oda sıcaklığına taşımaktır.

Her bir Au atomu, Coulomb blokajı etkisiyle atomik ölçekte bir tek-elektron transistörü (SET) gibi modellenmiştir; öz-kapasitansın son derece küçük olması ($\sim 10^{-20}$ F), şarj enerjisini $E_C \approx 2.2$ eV seviyesine taşır ve $E_C/k_B T \approx 85$ oranı sayesinde kriyojenik soğutmaya gerek kalmadan sağlam bir blokaj rejimi sağlar. Bu özellik, Bose ve ark. [1] tarafından ~20 nm altın nanoparçacık ağında 0.3 K sıcaklıkta gösterilen yeniden yapılandırılabilir mantık kapısı davranışını çok daha küçük ölçekte ve oda sıcaklığında yeniden üretme imkânı tanımaktadır.

Modelde, iki giriş elektrodu ve bir çıkış elektrodundan oluşan üç-üçlü bir mimari benimsenmiştir. Ayrıca, altı kontrol elektrotu (C1–C6) ve bir arka kapıdan oluşan yedi-bileşenli gerilim vektörü, ± 4 V aralığında bir genetik algoritma (GA) ile optimize edilmiştir.

Optimizasyon sonucunda hem AND hem de OR kapıları %100 doğrulukla elde edilmiştir. Tersleyici davranış gerektiren NAND, NOR ve XOR kapıları, çalışmanın sonraki aşamasında tasarlanacaktır.



Şekil 1: Au/h-BN Coulomb ağının düzlem-içi yerleşimi ($N = 65$, B-üstü konumlar). İki giriş, bir çıkış elektrotu ve altı kontrol elektrotu (C1–C6) gösterilmiştir

Kaynakça

1. S. K. Bose et.al., “Evolution of a designless nanoparticle network into reconfigurable Boolean logic”, *Nature Nanotechnology* **10**, 1048–1052 (2015).

NiPtTe₂ ve İlişkili 2B Tellüridlerin Elektronik, Yapısal ve Titreşimsel Özellikleri

E. Bulut KUL¹, Mehmet Yağmurcukardeş²

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

²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir, Türkiye

İki boyutlu NiPtTe₂'nin topotaktik yüzey reaksiyonu ile yakın zamanda deneysel olarak elde edilmesinden yola çıkılarak, Ni₂Te₂, Pt₂Te₂ yapıları, ara katkılı fazlar ve NiPtTe₂ gibi hibrit bileşikler kapsayan daha geniş bir malzeme sınıfı yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı hesaplamalar ile sistematik olarak incelenmiştir. Amaç, bu farklı yapısal konfigürasyonların elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikler üzerindeki etkisini bütüncül bir çerçevede ortaya koymaktır.

İki boyutlu geçiş metali dikalkojenitleri (TMD'ler), güçlü elektron korelasyonları, topolojik durumlar ve düşük boyutluluk etkileri nedeniyle zengin fiziksel özellikler sergileyen ayarlanabilir kuantum malzemeler sınıfını oluşturmaktadır [1,2]. Özellikle PtTe₂ ve NiTe₂ gibi grup-10 tellüridler, metalik doğaları ve topolojik bant yapıları sayesinde önemli bir araştırma alanı haline gelmiştir [3]. Bu sistemlerde kompozisyon kontrolü ve atomik modifikasyonlar, yeni fazların elde edilmesini ve elektronik özelliklerin ayarlanmasını mümkün kılmaktadır [4].

Bu çalışmada, NiPtTe₂ ve ilişkili tellürid fazlarının elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikleri birinci-prensip hesaplamaları ile sistematik olarak incelenmiştir. Hesaplamalar, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Değişim-korelasyon etkileri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kapsamında ele alınmış, geçiş metali d-orbitallerindeki güçlü korelasyonları doğru tanımlayabilmek amacıyla GGA+U yöntemi

uygulanmıştır. Elektronik yapı analizleri için düzlem dalga baz seti ve projector augmented-wave (PAW) potansiyelleri kullanılmıştır. Brillouin bölgesi örnekleme uygun Monkhorst-Pack k-nokta örgüsü ile sağlanmış ve tüm yapılar enerji minimizasyonu ile gevşetilmiştir.

Elde edilen sonuçlar, Ni ve Pt katkısının sistemlerde belirgin bir yük yeniden dağılımına yol açtığını ve yarı iletken karakterden metalik davranışa geçişi tetiklediğini göstermektedir. Ayrıca fonon hesaplamaları, incelenen yapıların dinamik kararlılığını doğrulamakta ve kafes titreşimlerinin elektronik özelliklerle güçlü bir şekilde bağlantılı olduğunu ortaya koymaktadır.

Bu bulgular, modifikasyonların ve yapısal çeşitliliğin iki boyutlu tellürid sistemlerinde elektronik ve fiziksel özelliklerin kontrol edilmesinde etkili bir araç olduğunu ortaya koymakta ve bu malzemelerin yeni nesil fonksiyonel ve topolojik uygulamalar için güçlü adaylar olduğunu göstermektedir [5].

Kaynakça

1. Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, M. S. Strano, *Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides*, Nature Nanotechnology 7, 699–712 (2012).
2. K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T. F. Heinz, *Atomically thin MoS₂: A new direct-gap semiconductor*, Physical Review Letters 105, 136805 (2010).
3. Z. Wang, Q. Li, Z. Besenbacher, M. Dong, *Type-II Dirac fermions in PtTe₂*, Physical Review B 98, 121112 (2018).
4. M. Lasek et al., *Controlling stoichiometry in ultrathin van der Waals films: PtTe₂ and related phases*, ACS Nano 16, 12345–12353 (2022).
5. Mukherjee et al., *Topological properties of NiTe₂ and related systems*, Scientific Reports 10, 1234 (2020).

İki tabakalı IrX_3 ve RhX_3 Metal Halojenlerin Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile İncelenmesi

Fethi Mehmet Akış¹, M. Sadra Najaji², Zeynep DEMİR Vatansever³, Erol Vatansever³, Fatih Ersan⁴

¹Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü - Fizik Bölümü, 09010, Aydın

²Dokuz Eylül Üniversitesi Mühendislik Fakültesi - Elektrik-Elektronik Mühendisliği, 35160, İzmir

³Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Fakültesi - Fizik Bölümü, 35160, İzmir

⁴Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Fakültesi - Fizik Bölümü, 09010, Aydın

Son yıllarda yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) kullanılarak iki boyutlu (2D) metal halojen malzemelerin elektronik ve manyetik özellikleri incelenmekte ve deneysel veriler ile uyumlu sonuçlar elde edilmektedir. MX_3 yapıları içerisinde bulunan geçiş metallere d orbitalleri kısmen ya da tamamen doludur ve standart YFT hesaplamaları bu malzemelerin özellikle elektronik bant hesaplamalarında yanıltıcı sonuçlar verebilmektedir. Deneysel sonuçlarla uyumlu teorik hesaplamaların yapılabilmesi için elektron-elektron itme kuvvetinin (d elektronlarının kendi içindeki Coulomb itme kuvvetinin) hesaba katılması gerekmektedir. Bu çalışmada 2D MX_3 ($M=\text{Ir, Rh}$ ve $X=\text{Cl, Br, I}$) metal halojen yapılarının sahip olduğu yapısal ve elektronik özellikler sistemin taban durumu manyetizasyonu dikkate alınarak incelenmiştir.

Literatürde YFT hesaplamalarına uygun Hubbard-U parametresinin eklenmesi ile deneysel sonuçlara yaklaşıldığını gösteren çalışmalar mevcuttur. Örneğin, tek tabakalı RuBr_3 ve RuI_3 malzemeleri için yapılmış çalışmalarda, standart PBE yaklaşım altında optimize edildiklerinde malzemelerin ferromanyetik özellik gösterdikleri, Hubbard-U teriminin eklenmesi ile taban durumu manyetik yöneliminin zigzag antiferromanyetik yönetime sahip olduğu bulunmuştur^[1,2]. Bu ve benzeri çalışmalar kısmen dolu d orbitaline sahip metal atomu içeren yapılarda uygun Hubbard-U parametresinin belirlenmesinin gerektiğini göstermektedir. Bu çalışmada, Coccoccioni ve Gironcoli'nin Hubbard-U

parametresini belirlemek için geliştirdiği yoğunluk fonksiyoneli pertürbasyon teorisine dayalı doğrusal yanıt yaklaşımı kullanılmıştır^[3]. Elde edilen sonuçlar incelenen tüm 2D MX_3 yapılarının yarı iletken özellik sergilediğini ve her bir yapıya özel belirlenen Hubbard-U değeri sonrasında örgü parametrelerinin arttığını ve elektronik yasak bant aralığı değerlerinin de Ir metali içeren MX_3 lerde ~ 0.20 eV mertebesinde Rh metali içeren MX_3 lerde ise ~ 0.50 eV kadar arttığını göstermiştir. Bu sonuçlar $d(f)$ orbitali içeren malzemelerde Hubbard-U parametresi eklenmesinin elektronik bant aralığı hesaplamasında etkin olduğunu göstermektedir.

Teşekkür: Bu çalışma, 124F107 numaralı proje kapsamında TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Kaynakça

1. Ersan, F., Vatansever, E., Sarikurt, S., Yüksel, Y., Kadioglu, Y., Ozaydin, H. D., & Aktürk, E. (2019). Exploring the electronic and magnetic properties of new metal halides from bulk to two-dimensional monolayer: RuX_3 ($X=\text{Br, I}$). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 476, 111-119.
2. Sarikurt, S., Kadioglu, Y., Ersan, F., Vatansever, E., Aktürk, O., Ü., Yüksel, Y. & Aktürk, E. (2018). Electronic and magnetic properties of monolayer $\alpha\text{-RuCl}_3$: a first-principles and Monte Carlo study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(2), 997-1004.
3. Coccoccioni, M., & De Gironcoli, S. (2005). Linear response approach to the calculation of the effective interaction in the LDA+U method. *Physical Review B-Condensed Matter and Materials Physics*, 71(3), 035105.

Janus MoSeN'in Yapısal, Titreşimsel ve Elektronik Özellikleri: Atomik Ölçekli Kusurlar ve STM İmzaları

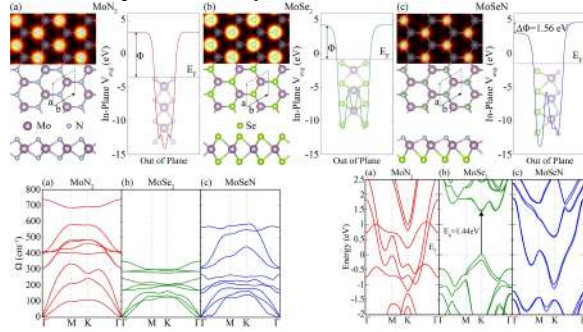
Hüseyin Yaylalı,¹ Kadir Can Doğan,¹ Mehmet Yağmurekardes²

¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fizik Bölümü, 35430 İzmir

²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü - Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

Bu çalışmada, iki boyutlu (2B) tek katmanlı MoN₂, MoSe₂ ve Janus MoSeN yapılarının yapısal, titreşimsel ve elektronik özellikleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) kullanılarak karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Yapısal optimizasyonlar, Janus MoSeN'in MoN₂ ve MoSe₂'ye kıyasla ara örgü parametrelerine sahip olduğunu ve Se-Mo-N dizilimine bağlı düzlem dışı simetri kırılması nedeniyle asimetric bir yapı sergilediğini göstermektedir. Fonon hesaplamaları, tüm yapıların dinamik olarak kararlı olduğunu ortaya koyarken, Janus MoSeN'de simetri kırılmasına bağlı titreşim modu ayrışmaları gözlenmiştir. Raman analizleri, MoSeN'de dört Raman aktif modun ortaya çıktığını ve bunların yapısal asimetri için karakteristik bir imza sunduğunu göstermektedir. Elektronik bant yapısı hesaplamaları, MoSe₂'nin doğrudan bant aralıklı bir yarıiletken, MoN₂'nin ferromanyetik metal ve Janus MoSeN'in metalik karakterde olduğunu ortaya koymaktadır. Bader analizleri, yük transferi asimetrisine bağlı içsel dipol oluşumunu doğrulamaktadır. Noktasal kusurların bazı durumlarda metal-yarıiletken faz geçişini tetiklediği ve simüle edilen STM görüntülerinin bu kusurları ayırt edebilen karakteristik kontrast imzaları sunduğu görülmüştür. Elde edilen sonuçlar, Janus MoSeN'in simetri kırılması ve kusur mühendisliği ile ayarlanabilir özellikler sergilediğini ve nanoelektronik ile optoelektronik uygulamalar için umut verici bir aday olduğunu göstermektedir.

Son yıllarda Janus yapılar, düzlem dışı simetri kırılmasıyla ortaya çıkan özgün fiziksel özellikleri nedeniyle 2B malzemeler arasında yoğun ilgi görmektedir. Bu yapılar, içsel dipol momenti ve ayarlanabilir elektronik özellikler gibi simetrik yapılarda bulunmayan davranışlar sergilemektedir. Yakın zamanda, 2B Janus MoSeN yapısının plazma destekli moleküler demet epitaksisi yöntemiyle başarıyla sentezlenmesi,[1] bu sistemin temel fiziksel özelliklerinin ayrıntılı olarak incelenmesi için güçlü bir motivasyon sunmuştur.

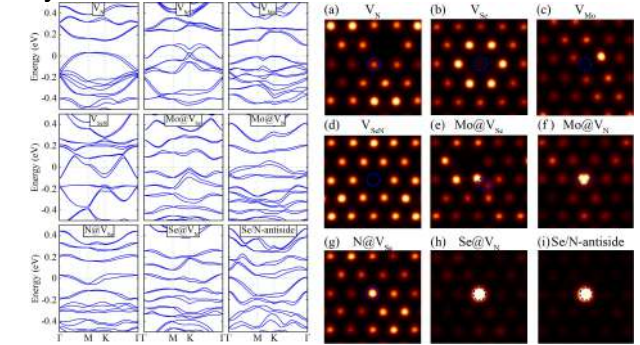


Şekil 1: Tek katmanlı (a) MoN₂, (b) MoSe₂ ve (c) Janus MoSeN yapılarının atomik yapıları, düzlem ortalamalı elektrostatik potansiyel profilleri, fonon dispersiyonları ve elektronik bant yapıları.

Çalışmamızda, 2B Janus MoSeN ve karşılaştırma amacıyla MoX₂ (X:Se, N) yapılarının yapısal, titreşimsel ve elektronik özellikleri YFT kullanılarak incelenmiştir. Hesaplamalar Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) paketi ile gerçekleştirilmiş, değişim-korelasyon etkileşimleri

GGA-PBE fonksiyoneli ile tanımlanmış ve spin-yörünge etkileşimleri dahil edilmiştir.

Yapısal optimizasyonlar, MoSeN'in MoN₂ ve MoSe₂ arasında ara örgü parametrelerine sahip olduğunu göstermektedir. Kalkojen tabakasının azot ile yer değiştirmesi, düzlem dışı simetriyi kırarak içsel dipol momenti oluşturmuştur. Fonon dispersiyonları, yapının dinamik olarak kararlı olduğunu ortaya koymaktadır.



Şekil 2: Janus MoSeN yapısında farklı noktasal kusurlar için hesaplanan elektronik bant yapıları ve karşılık gelen simüle edilmiş STM görüntüleri.

2B malzemelerde noktasal kusurlar elektronik yapıyı önemli ölçüde değiştirebilmekte ve faz geçişlerini tetikleyebilmektedir. Bu doğrultuda Janus MoSeN yapısında nokta kusurlar incelenmiş ve bazı kusur türlerinde metal-yarıiletken geçişi gözlemlenmiştir. Ayrıca, simüle edilen STM görüntüleri, farklı kusur türlerinin yüzeyde karakteristik kontrast imzaları oluşturduğunu göstermektedir.

Kaynakça

1. Yue, X., Xia, Y., Ding, D., Fu, W., He, D., He, C., Wang, Y., Xue, H., Jin, Y., Yuan, M., Zhang, J., Ho, W., Xu, H., Ki, D.-K., Hao, J., & Xie, M. Single-layer MoSeN - a synthetic Janus two-dimensional transition-metal compound grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *2D Materials* 2025

Sodyum Bizmut Molibdat ($\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$) Kristalinde Yapısal ve Nanoindentasyon Tabanlı Mekanik Özelliklerin İncelenmesi

Mehmet Işık¹, Cansu Çorapçı¹, Gözde Altuntaş²

¹*İzmir Bakırçay Üniversitesi, Biyomedikal Mühendisliği Bölümü, 35665, İzmir*

²*Gazi Üniversitesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Bölümü, 06560, Ankara*

$\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ kristalleri, optoelektronik ve fotonik uygulamalarda sunduğu etkili optik özellikler ve kimyasal kararlılık nedeniyle dikkat çeken molibdat bazlı malzemeler arasında yer almaktadır. Bu tür kristallerin cihaz performansını doğrudan etkileyen mekanik dayanım ve deformasyon davranışlarının doğru bir şekilde belirlenmesi, özellikle uzun ömürlü ve güvenilir uygulamalar açısından kritik öneme sahiptir. Bu çalışmada, Czochralski yöntemi ile büyütülen $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ kristallerinin yapısal ve mekanik özellikleri incelenmiştir. XRD analizleri, yüksek faz saflığı ve tetragonal kristal yapıyı doğrulamış, Williamson–Hall yöntemi ile mikrogerinim davranışı değerlendirilmiştir. Yük-bağımlı nanoindentasyon ölçümleri Oliver–Pharr analizi ile incelenmiş, PSR ve Meyer yaklaşımları kullanılarak indentasyon boyut etkisi analiz edilmiştir. Sonuçlar, artan yük ile birlikte sertlik ve elastik modülde azalma olduğunu ve deformasyon davranışının elastikten plastiğe kaydığını göstermektedir. Elde edilen bulgular, $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ kristallerinin mekanik performansına dair önemli bilgiler sunmakta ve optoelektronik uygulamalar açısından potansiyelini ortaya koymaktadır.

$\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$, molibdat tabanlı kompleks oksitler arasında sahip olduğu yapısal esneklik, kimyasal kararlılık ve çok yönlü fiziksel özellikleri nedeniyle önemli bir fonksiyonel malzeme adayı olarak öne çıkmaktadır. Özellikle optoelektronik ve fotonik uygulamalarda kullanılabilirliği, yalnızca optik özelliklerine değil, aynı zamanda mekanik dayanımına ve yük altındaki davranışına da bağlıdır. Bu nedenle, malzemenin küçük ölçekli mekanik özelliklerinin belirlenmesi, cihaz entegrasyonu açısından kritik öneme sahiptir.

Bu çalışmada, Czochralski yöntemi ile büyütülen $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ tek kristallerinin yapısal ve mekanik özellikleri incelenmiştir. XRD analizleri kristalin tetragonal yapıda olduğunu doğrulamış ve kafes parametreleri $a = 5.25 \text{ \AA}$ ve $c = 11.40 \text{ \AA}$ olarak belirlenmiştir.

Nanoindentasyon ölçümleri 5–250 mN aralığında farklı yükler uygulanarak gerçekleştirilmiştir. Sertlik değerlerinin 5.4 GPa'dan 3.3 GPa'a düştüğü, elastik modülün ise 111 GPa'dan 79 GPa'a gerilediği gözlenmiştir. Bu değişim, belirgin bir indentasyon boyut etkisinin (ISE) varlığına işaret etmektedir [1]. Meyer analizi sonucu elde edilen $n = 1.72$ değeri (yük ile girinti boyutu arasındaki ilişkiyi tanımlayan Meyer üssü),

bu davranışı doğrulamaktadır. Orantılı numune direnci modeli (PSR) analizi ile elde edilen yükten bağımsız gerçek sertlik değeri yaklaşık 2.7 GPa olarak bulunmuştur [2]. Bu durum, düşük yüklerde ölçülen yüksek sertlik değerlerinin yüzey etkileri ile ilişkili olduğunu göstermektedir. Ayrıca, artan yüklerle birlikte elastik modüldeki azalma, yüksek yüklerde oluşan mikro hasar ve çatlak oluşumu ile ilişkilendirilmiştir. Enerji analizi sonuçları, elastik ve plastik deformasyon bileşenleri arasındaki değişimi ortaya koymaktadır. Düşük yüklerde elastik katkı daha baskın iken, yük arttıkça plastik deformasyonun payı artmakta ve geri dönüşümsüz deformasyon mekanizmaları ön plana çıkmaktadır.

Sonuç olarak, $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ kristalleri belirgin bir yük bağımlı mekanik davranış sergilemekte olup, özellikle yük artışıyla birlikte mekanik parametrelerin stabilize olduğu ve belirli bir yük aralığında yükten bağımsız bir plato bölgesine ulaştığı belirlenmiştir. Bu çalışma, malzemenin gerçek mekanik özelliklerinin doğru değerlendirilmesi açısından önemli olup, optoelektronik uygulamalarda kullanım potansiyelini desteklemektedir.

Teşekkür

Bu çalışma, TÜBİTAK 1002 Destek Programı kapsamında 125F317 proje numarası ile desteklenmektedir.

Kaynakça

1. Yu. V. Milman, A.A. Golubenko, S.N. Dub, "Indentation size effect in nanohardness", *Acta Materilia* **59**, 7480-7487 (2011).
2. H. Li, R.C. Bradt, "The microhardness indentation load/size effect in rutile and cassiterite single crystals", *Journal of Materials Science*, **28**, 917-926 (1993).

Üç Boyutlu Klasik Heisenberg Modelinde Düzensizlik Etkileri ve Evrensellik Sınıfı: Geniş Ölçekli Monte Carlo Simülasyonu

Mehmet A. İkbāl, Zeynep Demir Vatansever, Erol Vatansever

Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 35160, İzmir

Donmuş düzensizlik içeren çok parçacıklı spin sistemleri, istatistiksel fizikte kritik davranışın ve evrensellik sınıflarının nasıl değiştiğini anlamak açısından temel ve halen tam olarak çözülememiş problemlerden biridir. Üç boyutlu klasik Heisenberg modelinin saf durumuna ait termodinamik özellikler ve kritik davranış uzun yıllardır iyi bilinmesine rağmen [1-3], bağ rastgeleliği (random-bond disorder) içeren durumlarda faz geçişinin doğası ve evrensellik sınıfı üzerindeki etkiler hâlâ ayrıntılı olarak açıklığa kavuşturulmayı beklemektedir.

Bu çalışmada, üç boyutlu klasik Heisenberg modelinde bağ düzensizliğinin termodinamik özellikler ve kritik davranış üzerindeki etkilerini incelemek amacıyla geniş ölçekli Monte Carlo simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Kritik bölge yakınında yüksek doğruluk ve verimli örnekleme sağlamak için küme (cluster) algoritmaları ile Metropolis güncellemesini birleştiren hibrit bir simülasyon yöntemi kullanılmıştır. Bu yaklaşım, kritik yavaşlamayı önemli ölçüde azaltarak büyük sistem boyutlarında güvenilir sonuçlar elde edilmesini sağlamıştır.

Manyetizasyon, manyetik duygunluk, Binder parametresi ve ikinci moment korelasyon uzunluğu gibi temel termodinamik nicelikler ayrıntılı olarak analiz edilmiştir. Sonlu boyut ölçekleme yöntemleri kullanılarak kritik sıcaklık belirlenmiş ve kritik üsteller yüksek hassasiyetle hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar, bağ düzensizliğine rağmen sistemin saf Heisenberg modeli ile aynı evrensellik sınıfında kaldığını ve kritik davranışın bu tür düzensizliklere karşı oldukça dayanıklı olduğunu göstermektedir.

Kaynakça

- 1 R. G. Brown, M. Ciftan, “High-Precision Evaluation of the Static Exponents of Classical Heisenberg Ferromagnet”, *Physical Review Letters* **76**, 1352 (1996).
- 2 C. Holm, W. Janke, “Critical Exponents of the Classical Heisenberg Ferromagnet”, *Physical Review Letters*, **78**, 2265 (1997).
- 3 M. Hasenbusch, “Monte Carlo study of a generalized icosahedral model on the simple cubic lattice”, *Physical Review B*, **102**, 024406 (2020).

vdW İstifleme Mühendisliği ile İki Tabakalı CrX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) Sistemlerinde Manyetik Özelliklerin Kontrolü

M. Sadra Najafi^a, Fethi Mehmet Akış^b, Zeynep Demir Vatansever^c, Fatih Ersan^b, Erol Vatansever^c

^a*Dokuz Eylül Üniversitesi, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü, 35160, İzmir*

^b*Aydın Adnan Menderes Üniversitesi, Fizik Bölümü, 09010, Aydın*

^c*Dokuz Eylül Üniversitesi, Fizik Bölümü, 35160, İzmir*

İki boyutlu van der Waals (vdW) manyetik malzemeler, düşük boyutlu manyetizma, spintronik uygulamalar ve ayarlanabilir manyetik faz davranışları açısından son yıllarda büyük ilgi görmektedir. Özellikle iki tabakalı CrX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) sistemleri, tabakalar arası etkileşimlerin istifleme düzenine ve görelî tabaka kaymalarına duyarlı olması nedeniyle, manyetik özelliklerin kontrollü biçimde düzenlenebildiği önemli model sistemler arasında yer almaktadır. Bu çalışmada, iki tabakalı CrX_3 yapılarında üst tabakanın alt tabaka üzerinde farklı oranlarda kontrollü olarak kaydırılmasıyla ortaya çıkan manyetik davranışlar Monte Carlo simülasyonları kullanılarak incelenmiştir.

Çalışmada, vdW istifleme mühendisliği yaklaşımı kapsamında farklı kayma konfigürasyonlarının tabakalar arası değiş-tokuş etkileşimleri üzerindeki etkisi dikkate alınarak sistemin termodinamik özellikleri analiz edilmiştir. Mıknatıslanma, manyetik duygunluk, iç enerji ve özgül ısı gibi temel termodinamik büyüklüklerin sıcaklığa bağlı değişimleri incelenmiş; kritik sıcaklıkların kayma miktarına bağlı evrimi ortaya konulmuştur. Ayrıca dış manyetik alan altında elde edilen histeresis eğrileri yardımıyla koersivite ve remanans değerleri hesaplanarak sistemlerin manyetik karakterleri değerlendirilmiştir.

Elde edilen sonuçlar, tabakalar arası görelî kaymanın yalnızca denge faz geçişlerini değil, aynı zamanda histeresis davranışları da önemli ölçüde değiştirdiğini göstermektedir. Özellikle bazı kayma oranlarında ferromanyetik–antiferromanyetik geçişlerin tetiklendiği, koersivite ve remanans değerlerinde belirgin değişimlerin ortaya çıktığı belirlenmiştir. Bu bulgular, iki boyutlu manyetik malzemelerde istifleme kontrollü manyetik faz mühendisliği açısından önemli sonuçlar sunmakta ve deneysel çalışmalar için yol gösterici bir çerçeve sağlamaktadır.

Teşekkür: Bu çalışma, 124F107 numaralı proje kapsamında TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Ti/Pt/Co/Pt Çok Katmanlı Ultra İnce Filmlerde Kalınlığa Bağlı Manyetik Davranış

Nesrin Yakar¹, İlker Öztoprak¹, Dr. Melek Türksoy Öcal¹, Prof. Dr. Osman Öztürk¹

Gebze Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü, 41400, Gebze, Kocaeli

Dik manyetik anizotropi (PMA) gösteren manyetik filmler, manyetik bellek aygıtları gibi manyetik uygulamalar için dikkat çekmektedir. PMA, manyetik filmlerin katman kalınlığının değiştirilmesiyle kontrol edilebilmektedir [1]. Mıknatıssal saçırma yöntemiyle büyütülen çok ince Ti/Pt/Co/Pt filmlerinde her bir katmanın kalınlığının PMA üzerindeki etkisi incelenmiştir. Sonuçlar, katman kalınlıklarının hassas bir şekilde kontrol edilmesiyle PMA'nın etkili bir şekilde ayarlanabileceğini göstermektedir.

Ferromanyetik/ağır metal ince film sistemleri, manyetik anizotropi gibi manyetik özellikleri nedeniyle nanospintronik için önemlidir [2]. Bu sistemler için, güçlü manyetik anizotropi ve arayüzey manyetik polarizasyonu gösteren Pt/Co/Pt tercih edilmektedir. Co veya Pt katman kalınlığını değiştirerek manyetik anizotropiyi değiştirmek mümkündür [3]. Ayrıca, alt katman olarak Ti katmanının biriktirilmesi arayüzey pürüzlülüğünü iyileştirdiği için PMA'yı artırır [4].

Bu çalışmada, oda sıcaklığında mıknatıssal saçırma yöntemiyle Si(111) alttaş üzerine değişen kalınlıklarda Ti (5-20 Å), Pt (15-25 Å) ve Co (3-50 Å) katmanlarına sahip ultra ince Ti/Pt/Co/Pt filmleri biriktirilmiştir. Büyütme işleminden önce, hedeflerin yüzeyindeki olası kirlilikleri kontrol etmek için her bir hedefe kazıma işlemi yapılmış ve X-ışını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS) ile analiz edilmiştir. Kaplama öncesinde sistemin taban basıncı 10^{-9} mbar iken kaplamalar yaklaşık 10^{-3} mbar argon ortamında yapılmıştır. Alttaş ile hedef arasındaki mesafe 100 mm'de tutulmuştur. Kalınlıkları izlemek için periyodik olarak XPS ile kalibre

edilen QCM (Quartz Crystal Microbalance) kalınlık sensörü kullanılmıştır.

Numunelerin manyetik karakterizasyonu, oda sıcaklığında Manyeto Optik Kerr Etkisi (MOKE) ile gerçekleştirilmiştir. Histerisis eğrileri polar (P-MOKE) ve boyuna (L-MOKE) geometrilerde elde edilmiştir. Sonuçlar, Ti katmanının PMA'yı desteklemesi için kritik bir kalınlık değeri olduğunu göstermektedir. Kalınlığın bu kritik değer altına düşmesi koersiviteyi (zorlayıcı alanı) azaltırken, bu değer aşılması PMA'yı neredeyse yok etmektedir. Pt katman kalınlığının numunenin koersivitesine katkıda bulunduğu gözlemlenmiştir. Pt katmanı kalınlığının artırılması daha yüksek koersiviteye yol açmaktadır. PMA büyük ölçüde Co katmanı kalınlığına bağlıdır. Aynı zamanda Co katmanı için de PMA'yı yok eden kritik bir kalınlık mevcuttur. Daha kalın bir Co katmanı ile numune düzlem içi anizotropi sergilemektedir. Sonuç olarak, Ti/Pt/Co/Pt çok katmanlı ince filmlerde her bir katmanın kalınlığının hassas bir şekilde kontrol edilmesi, dik manyetik anizotropi ve koersiviteyi ayarlamak için etkili bir yaklaşım sunmaktadır.

Kaynakça

- 1 O. Yıldırım et al., "Tuning the perpendicular magnetic anisotropy in Co/Pt multilayers grown by facing target sputtering and conventional sputtering", *Scripta Materialia* **207**, 114285 (2022).
- 2 M. V. Dorokhin et al., "Adjustment of Magnetic Characteristics for [Co/Pt] Multilayer Thin Films", *Coatings*, **15**, 186 (2025).
- 3 I. Jacyna et al., "Study of ultrathin Pt/Co/Pt trilayers modified by nanosecond XUV pulses from laser-driven plasma source", *Journal of Alloys and Compounds* **763**, 899-908 (2018).
- 4 M. T. Ocal et al., "Structural and Morphological Effect of Ti underlayer on Pt/Co/Pt Magnetic Ultra-Thin Film", *Japanese Journal of Applied Physics* **60**, 105505 (2021).

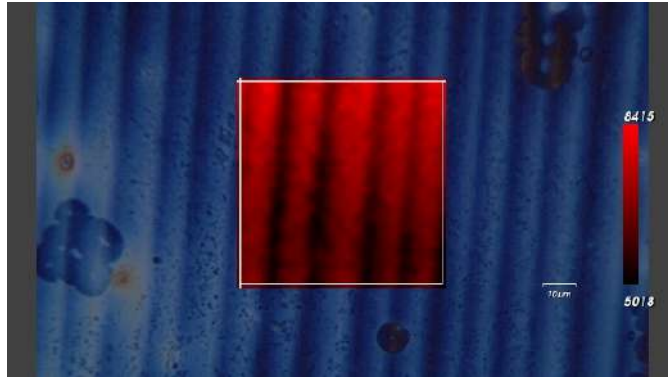
Ferroelektrik Domain Yapılarının Kuantum Nokta Filmlerindeki Fotolüminesansın Uzaysal Modülasyonu

Salih Kenan Liman¹, Çetin Meriç Güvenç², Oktay Aktaş¹

¹İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir

²İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü, 35430 İzmir

Kuantum nokta (QD) filmlerinde fotolüminesansın (PL) uzaysal kontrolü, akıllı optoelektronik ve fotonik aygıtlar açısından önemlidir. Ferroelektrik kristaller, yüzey kutuplanması, elektrostatik çevre ve yerel gerinim alanları sayesinde hibrit yapıların optik özelliklerini modüle edebilen işlevsel platformlar sunmaktadır [1,2]. Ancak, ferroelektrik domain yapılarının QD filmlerinin emisyon davranışları üzerindeki etkisi henüz tam olarak anlaşılamamıştır.



Şekil 1: CdSe/CdS/ZnS kuantum nokta filmi kaplı BaTiO₃ (111) tek kristalinin Fotolüminesans Haritası

Bu çalışmada, (111) yönelimli BaTiO₃ tek kristali üzerine kaplanan CdSe/CdS/ZnS kuantum nokta filmlerinin PL davranışı incelenmiştir. PL haritalarında gözlenen parlak-karanlık desenlerin, altlığın domain örüntüsüyle güçlü bir korelasyon gösterdiği belirlenmiştir. Numune rotasyonu sonrasında Raman kontrastının kaybolmasına karşın PL kontrastının korunması, gözlenen modülasyonun optik artefaktlardan ziyade domainlere bağlı fiziksel bir etkileşimden kaynaklandığını göstermektedir.

Spektral analizlerde gözlenen küçük fakat sistematik tepe kaymaları, ferroelastik domain duvarlarında lokalize gerinim ve arayüzey etkilerine işaret etmektedir. Bununla birlikte, PL yoğunluğundaki değişimlerin domain duvarlarında ortaya çıkan yerel etkilerle ilişkili olabileceği düşünülmektedir. Ayrıca, emisyon kontrastının QD film kalınlığına bağlı olduğu gözlenmiştir. Bu sonuçlar, ferroelektrik domain mühendisliği kullanılarak QD emisyonunun pasif bir yöntemle desenlenebileceğini göstermekte ve yeni nesil akıllı fotonik aygıtlar için özgün bir yaklaşım sunmaktadır.

Kaynakça

- 1 Y. Zhang et al., “Ferroelectric and Piezoelectric Effects on the Optical Process in Advanced Materials and Devices”, *Advanced Materials* 30, 1707007 (2018).
- 2 C. H. Li, K. M. McCreary, B. T. Jonker, “Spatial Control of Photoluminescence at Room Temperature by Ferroelectric Domains in Monolayer WS₂/PZT Hybrid Structures”, *ACS Omega* 1, 963–970 (2016).

PdTe₂'nin Farklı Yapısal Fazları: Kararlılık, Titreşimsel İmzalar ve Gerilim Odaklı Faz Geçişleri

Şule Bektaş¹, Hasan Şahin², Mehmet Yağmurdokar¹

¹İzmir Teknoloji Enstitüsü, Fotonik Bölümü, 35430 İzmir, Türkiye

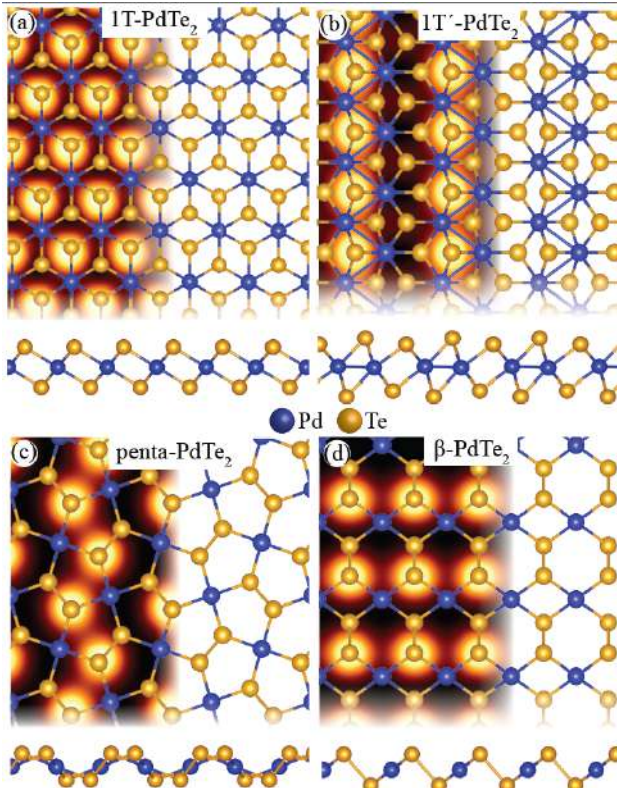
²Şarjah Amerikan Üniversitesi, Sanat ve Bilim Fakültesi, Fizik Bölümü, Şarjah, Birleşik Arap Emirlikleri

Bu çalışmada, PdTe₂'nin dört farklı fazı, heksagonal (1T), bozulmuş heksagonal (1T'), pentagonal (penta) ve β fazları, yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) tabanlı ilk prensip hesaplamaları ile yapısal, titreşimsel, elektronik ve elastik özellikleri açısından incelenmiştir. Fonon bant dağılımları tüm fazların dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Raman spektrumları, her faza özgü titreşimsel imzalar ortaya koymaktadır. Elektronik bant yapıları, 1T' fazının metalik, diğer fazların ise dolaylı bant aralıklı yarı iletken olduğunu göstermektedir. Yarı iletken fazlar arasında β fazı en yüksek elektron hareketliliğine, penta fazı ise en yüksek boşluk hareketliliğine sahiptir. Elastik analizler, basınç altında penta fazından β fazına faz geçişi gerçekleştiğini ve bunun ayarlanabilir malzeme özellikleri sunduğunu ortaya koymaktadır. Ayrıca 1T fazı izotropik davranış sergilerken, penta fazı belirgin anizotropi ile uyumlu şekilde auxetic özellik göstermektedir. Genel olarak, sonuçlar PdTe₂'nin farklı fazlarının ayırt edici özelliklerini ve gerilimle kontrol edilebilir faz geçişlerini ortaya koymaktadır.

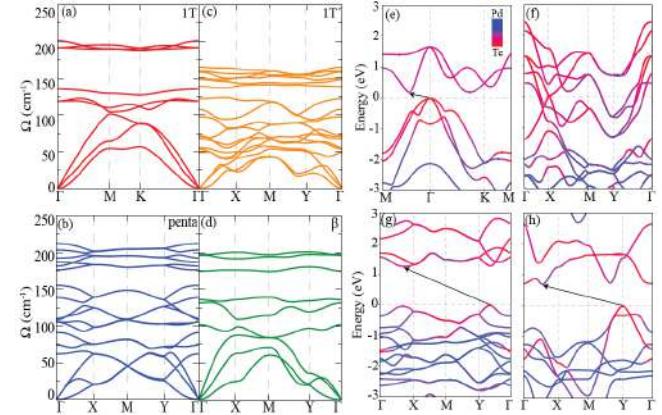
Dört PdTe₂ tek katmanlı fazı (1T, 1T', penta ve β) üzerinde yapılan DFT hesaplamaları, belirgin yapısal simetrisel ve koordinasyon ortamları göstermektedir; 1T en simetrik ve termodinamik olarak en kararlı fazdır. 1T' fazı, Peierls bozulması nedeniyle metaliktir, penta ve β fazları ise anizotropik kafeslere ve biraz daha düşük kararlılığa sahip düşük simetrik yarı iletkenlerdir.

Fonon spektrumları, tüm fazların dinamik olarak kararlı olduğunu ve daha karmaşık penta ve β yapılarında daha zengin titreşimsel özellikler bulunduğunu doğrulamaktadır [1].

Tüm PdTe₂ fazları farklı elektronik özellikler sergiler; altıgen, beşgen ve β fazları değişen bant aralığı boyutlarına sahip dolaylı bant aralıklı yarı iletkenlerdir, 1T' fazı ise metalik davranış gösterir. Tüm yapılarda, bant kenarlarına yakın elektronik durumlar ağırlıklı olarak Te orbitalleri tarafından yönetilir; bant aralığı değerlerindeki ve VBM-CBM konumlarındaki farklılıklar yapısal simetri ve orbital hibritleşmesindeki değişimlerden kaynaklanır.



Şekil 1: (a/e) 1T, (b/f) 1T', (c/g) penta ve (d/h) β-PdTe₂'nin üst ve yan görünüm yapıları / fonon bant yapıları.



Şekil 2: (a/e) 1T, (b/f) 1T', (c/g) penta ve (d/h) β-PdTe₂'nin fonon/elektronik bant yapıları.

Gerilim mühendisliği, penta'dan β'ya bir faz geçişini daha da mümkün kılarak, PdTe₂'yi ayarlanabilir 2B malzeme işlevselliği için umut vadeden bir platform olarak öne çıkarmaktadır. Son olarak, gerilim penta'dan β'ya bir faz geçişini tetikleyebilir ve bu da PdTe₂ fazları arasında güçlü yapı-özellik ayarlanabilirliğini vurgular.

Kaynakça

- 1 L. Liu, Y. Ji, M. Bianchi, S. M. Hus, Z. Li, R. Balog, J. A. Miwa, P. Hofmann, A.-P. Li, D. Y. Zemlyanov, et al., "A metastable pentagonal 2d material synthesized by symmetry-driven epitaxy," Nature Materials, vol. 23, no.10, pp.1339–1346, 2024.

6H-SiC(000 $\bar{1}$) Yüzeyindeki Epitaksiyel Grafen Sırt Yapılarının AKM Tabanlı Bilgi-Güdümlü ve Drift-Farkındalıklı Analitik Çerçeve ile Karakterizasyonu

Derya Gemici Deveci¹, Tuana Karakoyun Barandır^{2,*}, Özhan Ünverdi³, Cem Çelebi¹

¹ Altınbaş Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, 34217 İstanbul

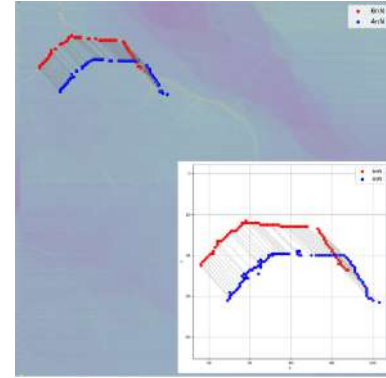
² İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35430 İzmir

³ Yaşar Üniversitesi, Elektrik ve Elektronik Mühendisliği Bölümü, 35100 İzmir

Tek katmanlı epitaksiyel grafen (EG/6H-SiC) yüzeyinde oluşan sırt benzeri (ridge) yapılar, malzemenin lokal gerinim dağılımını ve nanomekanik özelliklerini doğrudan modüle eden temel morfolojik özelliklerdir. Bu çalışmada, SiC üzerinde büyütülen epitaksiyel grafenin Atomik Kuvvet Mikroskobu (AKM) topografi verilerini, ham veri bütünlüğünü bozmadan değerlendiren bilgisayarlı görsel (CV) ve makine öğrenmesi (ML) destekli bir analitik çerçeve sunulmaktadır. Önerilen yaklaşım, farklı normal yükler altında elde edilen AKM topografilerini blok tabanlı ve piksel düzeyinde analiz ederek sırt yapılarının morfolojik sürekliliğini ve kuvvete bağlı yer değiştirme profillerini karşılaştırmalı olarak incelemeye olanak sağlamaktadır. Bu kapsamda, drift-farkındalıklı ve bilgi-güdümlü eşleşme stratejisi ile sırt yapıları boyunca koordinat uyumu sağlanmış; dikey yer değiştirme (ΔV_z) profilleri ve yerel efektif rijitlik dağılımları görece, kuvvete bağlı göstergeler olarak değerlendirilmiştir.

Tek katmanlı epitaksiyel grafenin 6H-SiC(000 $\bar{1}$) yüzeyinde, soğuma aşamasında SiC ve grafen arasındaki termal genleşme farkları nedeniyle oluşan sırt benzeri (ridge) yapılar, malzemenin lokal gerinim (local strain) dağılımını modüle etmektedir [1]. Bu morfolojik yapıların uygulanan kuvvet altındaki mekanik tepkilerini nano ölçekte belirlemek, grafen tabanlı nano-aygıtların yapısal kararlılığını anlamak açısından kritiktir. Ancak, AKM ölçümlerinde karşılaşılan yanal kayma etkileri (drift), aynı nanometrik bölgenin farklı yükler altında takibini ve hassas nanomekanik karakterizasyonunu zorlaştırmaktadır. Bu çalışmada, 4-16 nN normal kuvvet aralığında gerçekleştirilen AKM ölçümlerinden elde edilen ham veriler, CV ve ML destekli, drift-farkındalıklı ve bilgi-güdümlü bir analitik çerçeve ile değerlendirilmiştir. Geliştirilen ML modeli, kayma yönünü %97 doğrulukla sınıflandırmış, kayma hızını $RMSE \approx 3.2 \times 10^{-5}$ $\mu\text{m/s}$ ve $R^2=0.976$ katsayısı ile yüksek hassasiyette tahmin etmiştir. Analitik çerçeve kapsamında sağlanan piksel düzeyinde koordinat uyumu, 4-6 nN normal kuvvet ile elde edilen AKM topografilerinde %99,8 yön ve %95,8 büyüklük uyumu sağlanarak, sırt yapılarının ΔV_z profilleri çıkarılmış ve kuvvete bağlı yüzey yanıtı sistematik olarak analiz edilmiştir. Yapılan analizlerde, 4-6 nN yük rejiminde yüksek kuvvet hassasiyeti sergilediği kantitatif olarak gözlemlenmiştir. Uygulanan analitik çerçeve ile sırt yapılarının efektif yay sabitleri (k_{eff}) ve sırt boyunca

dağılımları, geleneksel analizlerin ötesinde bir çözünürlükle haritalandırılmıştır. Elde edilen değerler mutlak mekanik sabitler olarak değil, sırt bölgelerinin görece ve kuvvete bağlı efektif rijitlik göstergeleri olarak değerlendirilmiştir [2].



Şekil 1: Grafen sırt yapılarının 4-6 nN normal kuvvetler altında dikey yer değiştirme profilleri. Koordinat uyumu sağlanmış yükseklik profilleri, sırt yapılarının dikey yer değiştirme miktarını piksel düzeyinde ortaya koymaktadır. İskelet eşleşmeleri, efektif yay sabiti (k_{eff}) hesaplamaları için temel teşkil eden noktasal deformasyon analizini doğrulamaktadır.

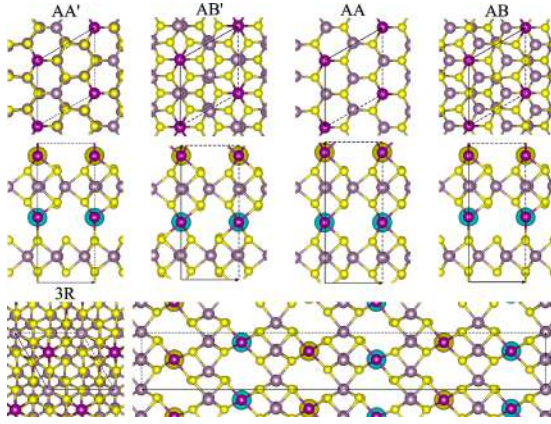
Analiz sürecindeki gözlemci bağımlılığını minimize eden bu sistem, ölçeklenebilir ve tekrarlanabilir bir analiz altyapısı sunmaktadır. CV ve ML tekniklerinin AKM analiz süreçlerine bu entegrasyonu, veriden elde edilen bilgi derinliğini maksimize ederek ileri mühendislik uygulamalarına doğrudan veri desteği sağlamaktadır.

Kaynakça

1. V. Singh, S. Sengupta, H.S. Solanki, R. Dhall, A. Allain, S. Dhara, P. Pant, M.M. Deshmukh, Probing thermal expansion of graphene and modal dispersion at low-temperature using graphene nanoelectromechanical systems resonators, *Nanotechnology* 21, 165204 (2010).
2. D. Gemici Deveci, T. Karakoyun Barandır, Ö. Ünverdi, C. Çelebi, A knowledge-driven computer vision framework for automated atomic force microscopy surface characterization, *Measurement* 262, 120006 (2026)

Geçiş Metali Katkılı Yığın MoS_2 'de İstiflenmeye Bağlı AltermanyetizmaUygar Berke Gür¹, Kadir Can Doğan¹, Mehmet Yağmircukardeş²¹Department of Physics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye²Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430, Izmir, Türkiye

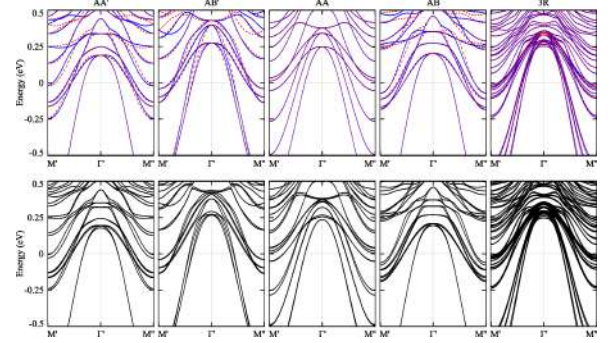
Geleneksel ferromanyetizma ve antiferromanyetizmanın ötesinde, makroskopik net mıknatıslanması sıfır olan ancak momentum uzayında güçlü spin bant yarılması sergileyen altermanyetizma, spintronik alanında yoğun ilgi görmektedir.[1], [2] Bu çalışmada, yalın yığın MoS_2 kristalinin farklı istiflenme (stacking) fazlarına (AA', AB', AA, AB, 3R) çeşitli 3d geçiş metalleri (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) eklenerek sistemin altermanyetik taban durumu incelenmiştir. Bu fazlar yapısal, manyetik ve elektronik özellikleri açısından Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) temelli hesaplamalarla analiz edilmiştir. Elde edilen bulgular, spin yoğunluğu dağılımının ve bantlardaki spin ayrışmasının rastgele olmadığını; doğrudan malzemenin spesifik yapısal simetrisine ve araya giren geçiş metalinin elektron dizilimine bağlı olduğunu göstermektedir. Bu sonuçlar, altermanyetik davranışın istiflenme geometrisiyle kontrol edilebilirliğini kanıtlamakta ve yeni nesil spintronik aygıt mimarileri için teorik bir temel sunmaktadır.



Şekil 3: Mn interkale edilmiş farklı MoS_2 fazlarının üstten ve yandan görünüşleri.

Hesaplamalar, Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) kullanılarak yapılmış olup elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) fonksiyoneli ile tanımlanmıştır.

Mn atomu interkale edilmiş farklı MoS_2 fazlarının optimize edilmiş yapıları ve manyetizasyon konfigürasyonları Şekil 1'de sunulmuştur. Mn atomlarının yerleşimi, malzemenin yerel kristal alanını bozarak belirli bir yapısal simetri kırılmasına yol açmaktadır. Mn atomları etrafındaki manyetik polarizasyonu görselleştirmek için eklenen spin yoğunluğu izoyüzeyleri, bu manyetik dağılımın doğrudan kristalin istiflenme geometrisi tarafından dikte edildiğini açıkça göstermektedir.



Şekil 2: Mn interkale edilmiş farklı MoS_2 fazlarının elektronik bant yapıları.

Şekil 2'de sunulan elektronik bant yapıları, fazlar arasında altermanyetizmanın varlığını kanıtlayan kritik fiziksel farklılıkları ortaya koymaktadır. Hesaplamalar hem spin-yörünge etkileşimli (SOC) hem de SOC'suz durumlar için gerçekleştirilmiştir. Mn interkale edilmiş sistemlerde net bir makroskopik mıknatıslanma olmamasına rağmen, belirli fazlarda momentum uzayında spin-yukarı ve spin-aşağı bant yarılmaları gözlemlenmiştir. Burada asıl vurgulanması gereken bulgu, bantlardaki bu spin ayrışmasının SOC etkisi olmadan dahi varlığını sürdürmesidir. Alışılmış rötativistik yarılmaların aksine, tamamen kristal simetrisi ve değiş-tokuş etkileşimlerinden kaynaklanan bu momentum bağımlı spin yarılması, sistemin altermanyetik doğasının en kesin ve doğrudan kanıtıdır.

Kaynakça

1. Šmejkal, Libor, et al. "Crystal time-reversal symmetry breaking and spontaneous Hall effect in collinear anti-ferromagnets." *Science advances* 6.23 (2020): eaaz8809.
2. Šmejkal, Libor, Jairo Sinova, and Tomas Jungwirth. "Beyond conventional ferromagnetism and antiferromagnetism: A phase with nonrelativistic spin and crystal rotation symmetry." *Physical Review X* 12.3 (2022): 031042.

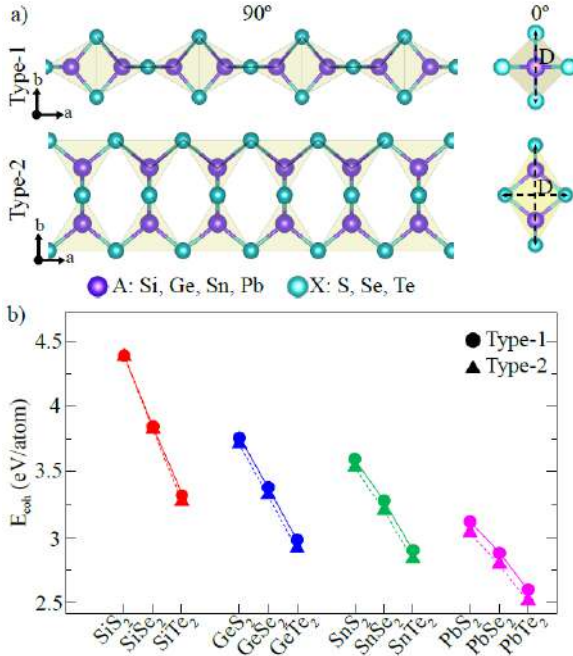
Tek Boyutlu IV-VI Grubu AX₂ Zincirlerinin Yapıya Bağlı Raman İmzaları ve Elektronik Özellikleri

Yağmur Bozkurt^{1*}, Hasan Şahin^{1,2}, Mehmet Yağmurlukardeş¹

¹Department of Photonics, Izmir Institute of Technology, 35430 Izmir, Turkey

²Department of Physics, College of Arts and Sciences, American University of Sharjah, Sharjah, United Arab Emirates

Tek boyutlu (1B) nanoyapılar, boyutsal indirgenme ve kuantum sınırlanma etkileri sonucu ortaya çıkan; geometrilerine bağlı olarak ayarlanabilir elektronik, optik ve manyetik özellikler sergileyen önemli malzeme sistemleridir. Son yıllarda karbon nanotüp kanalları içerisinde kararlı hale getirilen atomik zincir yapılar, normal koşullarda elde edilmesi zor kristal motiflerinin sentezlenmesine olanak sağlamıştır[1]. Özellikle kapsüllenmiş GeX₂ ve SiX₂ (X = S, Se) zincirlerinin[2] yarı iletken davranış gösterdiği ve bileşime bağlı ayarlanabilir bant aralıklarına sahip olduğu rapor edilmiştir. Bu bağlamda, Grup IV-VI bileşiklerine ait AX₂ (A = Si, Ge, Sn, Pb; X = S, Se, Te) 1B zincir yapılarının yapısal, elektronik, titreşimsel ve termal özellikleri birinci prensip hesaplamalarıyla sistematik olarak incelenmiştir.



Şekil 4. Type-1 ve Type-2 1B zincir için : (a) kristal yapılar (D: zincir çapı), (b) zincir konfigürasyonuna bağlı kohezyon enerjisi.

Hesaplamalar, Vienna ab-initio Simulation Package (VASP)[3] kullanılarak yapılmış olup elektronlar arasındaki değişim-korelasyon etkileşimleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA)[4] fonksiyoneli ile tanımlanmıştır. Zayıf van der Waals etkileşimlerini dikkate almak amacıyla Grimme

DFT-D2[5] düzeltmesi uygulanmıştır. Termal kararlılık, ab initio kuantum moleküler dinamik simülasyonları ile incelenmiş; fonon dispersiyonları ise sonlu yer değiştirme yöntemi kullanılarak Phonopy[6] paketi aracılığıyla hesaplanmıştır. Ayrıca Raman aktif titreşim modları, makroskopik dielektrik tensör türevlerine dayalı sonlu fark yöntemi ile belirlenmiştir.

Grup IV-VI ikili bileşiklerinin (AX₂; A = Si, Ge, Sn, Pb ve X = S, Se, Te) 1B zincir yapıları birinci prensip hesaplamaları kullanılarak incelenmiştir. İki farklı yapı belirlenmiştir: kenar paylaşan tetrahedralardan oluşan Type-1 ve kenar ile köşe paylaşımının birlikte bulunduğu bağlantılarla oluşan Type-2 zincir. Hesaplanan kohezyon enerjileri, her iki yapının da enerjetik olarak birbirine yakın ve rekabetçi olduğunu göstermektedir. Fonon dispersiyonu ve kuantum moleküler dinamik analizleri, tüm zincirlerin dinamik ve yüksek sıcaklıklarda termal olarak kararlı olduğunu doğrularken, Raman spektrumları iki zincir tipini açıkça ayırt edebilen farklı titreşimsel parmak izleri sunmuştur. Elektronik yapı hesaplamaları, Type-1 zincirlerin dolaylı bant aralığına sahip olduğunu, buna karşılık Type-2 zincirlerin doğrudan bant aralığı sergilediğini göstermiştir. Elde edilen sonuçlar, Grup IV-VI AX₂ zincirlerinin bağlantı geometrisine bağlı olarak ayarlanabilir elektronik özellikler sunduğunu ve özellikle Type-2 yapıların düşük boyutlu optoelektronik uygulamalar için umut verici adaylar olduğunu göstermektedir.

Kaynakça

- 1 Y. Lee, Y. W. Choi, K. Lee, C. Song, P. Ercius, M. L. Cohen, K. Kim, and A. Zettl, ACS nano 17, 8734 (2023).
- 2 Y. Lee, Y. W. Choi, L. Li, W. Zhou, M. L. Cohen, K. Kim, and A. Zettl, ACS nano 18, 17882 (2024).
- 3 G. Kresse and J. Furthmüller, Physical review B 54, 11169 (1996).
- 2 J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Physical review letters 77, 3865 (1996).
- 3 S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, The Journal of chemical physics 132, 154104 (2010).
- 4 A. Togo, J. Phys. Soc. Jpn. 92, 012001 (2023).

Altıgen Bor Nitrür’de Bulunan Tek Foton Kaynaklarının Eşvre Özellikleri

Zeliha Sevgi Şirin¹, Furkan Ağlarıcı¹, Serkan Ateş²

¹ İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Fizik Bölümü, 35433 İzmir

² Sabancı Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, 34956, İstanbul

Tek foton kaynakları, günümüz kuantum teknolojilerinin en önemli bileşenleri arasında yer almaktadır. Literatürdeki çok sayıda potansiyel malzeme sistemi içinden iki boyutlu bir yapıya sahip olan altıgen bor nitrid (hBN), oda sıcaklığındaki kararlı ve yüksek parlaklığa sahip tek-foton ışınmasıyla öne çıkmaktadır. Ancak, bu tek foton kaynaklarının kuantum teknolojilerinde etkin bir şekilde kullanılabilmesi, yayılan fotonların yüksek derecede eşvreye sahip olmalarına bağlıdır. Bu çalışmada, hBN kusur merkezlerinden elde edilen tek-foton ışınmasının eşvre süresi üzerine yapılan deneysel sonuçlar paylaşılacaktır.

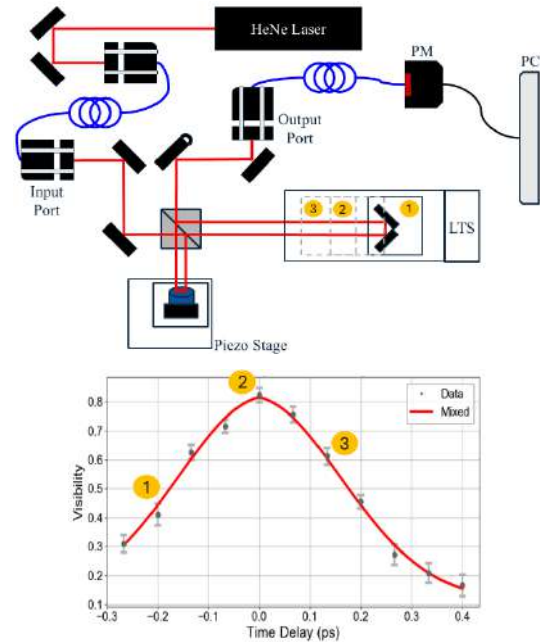
Literatüre çokça çalışılan altıgen bor nitrid (hBN) sahip olduğu geniş bant aralığı (yaklaşık 6 eV) sayesinde ultraviyolede yakın kızıl ötesine kadar uzanan geniş bir spektral aralıkta tek-foton mertebesinde ışınabilen farklı kusur merkezlerinin oluşumuna imkân tanır [1]. Ancak, bu tek foton kaynaklarının kuantum teknolojilerinde etkin bir şekilde kullanılabilmesi, yayılan fotonların yüksek eşvre süresine sahip olmalarına bağlıdır. Bu nedenle, hBN tabanlı tek foton kaynaklarının optik eşvre özelliklerinin hassas bir şekilde ölçülmesi ve bu özelliklerin dış etkenlerle olan ilişkisinin anlaşılması, malzemenin verimli bir platform olarak optimize edilmesi açısından büyük önem taşımaktadır. Bu çalışmada yüksek saflıktaki kütleli hBN kristallerinin silisyum alttaş üzerine damlatma (dropcast) yöntemiyle aktarılmasıyla hazırlanan numuneler kullanılmıştır. Seçilen kusur merkezlerinin tek foton kaynağı olduğu ikinci derece foton korelasyon ölçümleri ile doğrulanmıştır. Ardından, hBN üzerindeki tek foton kaynaklarının eşvre sürelerini ölçmek amacıyla yüksek hassasiyetli bir Michelson interferometresi kullanılmıştır (Şekil 1). Bu sistem kullanılarak hBN içerisinde bulunan çeşitli tek foton merkezlerinin zamansal eşvre limitleri başarıyla karakterize edilmiş ve güncel literatürle kıyaslanmıştır [2].

Tablo 1: Kaynakların Eşvre Süreleri

Kaynak	τ_c (ps)	τ_G (ps)
RTDef002	1.5	0.23
RTDef003	0.17	0.1
CTDef001	0.33	0.27
CTDef004	0.89	0.84
CTDef006-5K	2.51	1.17
CTDef006-20K	1.53	0.99
CTDef006-50K	0.36	0.3

Kaynakça

- 1 T. T. Tran, K. Bray, M. J. Ford, M. Toth, I. Aharanovich, "Quantum Emission From Hexagonal Boron Nitride Monolayers", *Nature Nanotechnology* **11**, 37–41 (2016).
- 2 J. V. Martinez-Ponz, S. K. Kim, M. Behrens, A. Izquierdo-Molina, A. M. Rua, S. Paçal, S. Ateş, L. Vina, C. Anton-Solanas. "Temporal Coherence of Single Photons Emitted by Hexagonal Boron Nitride Defects at Room Temperature", *ACS Photonics*, **13**, 282–289 (2026).



Şekil 1: Michelson interferometresi ve elde edilen görünürlük grafiği. Numaralandırılmış veri noktaları motorize sürücünün hangi konumuna geldiğini örnek olarak göstermektedir.

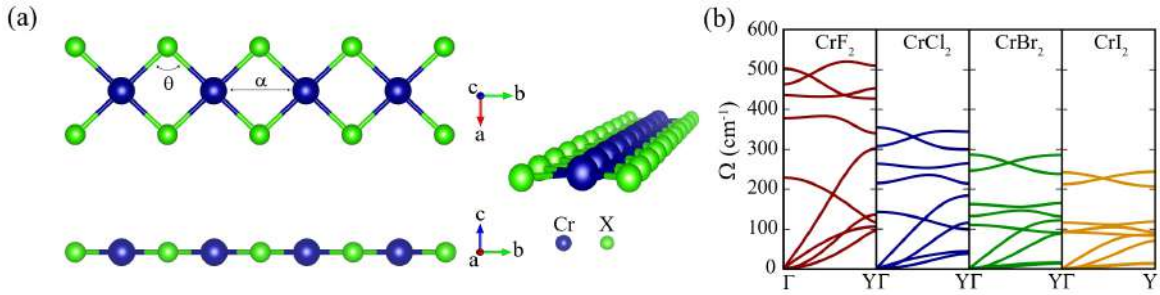
Elde edilen sonuçlar literatürdeki diğer tek foton kaynaklarıyla kıyaslandığında hBN yayıcıların pikosaniye uzunluğundaki eşvre sürelerinin henüz kuantum noktaları veya elmasdaki NV merkezleri seviyesine ulaşmadığı görülmüştür (Tablo 1). Bununla birlikte hBN’ın oda sıcaklığında sergilediği performans kriyojenik sistemlere ihtiyaç duyan diğer malzemelere kıyasla malzemenin ölçeklenebilir kuantum teknolojilerine entegrasyonu açısından büyük bir potansiyel taşımaktadır. Çalışmamız, bu potansiyelin fiziksel sınırlarını karakterize ederek, hBN tabanlı kuantum cihazların optimizasyonu yolunda önemli bir adım teşkil etmektedir.

Mekanik Gerilme ile 1B CrX₂ (X = F, Cl, Br, I) Zincirlerinde Ayarlanabilir Manyetik ve Elektronik Özellikler

Zeynep Akkaya¹, Şule Bektaş², Mehmet Yağmurcukardeş²

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

Bu çalışmada, düşük boyutlu sistemler arasında artan ilgi gören bir boyutlu (1B) malzemeler kapsamında, CrX₂ (X = F, Cl, Br, I) zincir yapılarının temel özellikleri incelenmiştir. İki boyutlu (2B) sistemlerden 1B'e geçişle birlikte kuantum sınırlama etkileri, artan elektron korelasyonları ve belirginleşen spin dalgalanmaları, bu yapıların özgün elektronik ve manyetik davranışlar sergilemesine neden olmaktadır. Ancak literatürde, özellikle serbest duran ve izole 1B manyetik sistemlere ilişkin çalışmalar oldukça sınırlıdır ve mevcut çalışmaların çoğu kapsüllenmiş yapılarla sınırlı kalmaktadır [1]. Bu motivasyonla, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) tabanlı hesaplamalar kullanılarak CrX₂ zincirlerinin yapısal, dinamik, elektronik ve manyetik özellikleri ile mekanik gerilimin etkileri sistematik olarak analiz edilmiştir. Elde edilen bulgular, bu yapıların hem dinamik olarak kararlı olduğunu hem de ayarlanabilir manyetik ve elektronik özellikleri sayesinde nanoelektronik ve spintronik uygulamalar için umut vadettiğini göstermektedir.



Şekil 1: (a) Bir Boyutlu CrX₂ zincirlerinin üstten, yandan ve perspektif görünümü, (b) fonon bant dağılımı

Hesaplamalar Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) paketi kullanılarak GGA+U ve HSE06 yaklaşımlarıyla gerçekleştirilmiş, fonon analizleri ise Phonopy ve HiPhive yöntemleri ile yapılmıştır. Ayrıca, zincir yönü boyunca $\pm 10\%$ aralığında tek eksenli gerilme uygulanarak sistemlerin manyetik ve elektronik tepkileri araştırılmıştır.

Optimize edilen yapılar deforme olmuş CrX₆ oktahedral geometrisi sergilemekte olup, Bader yük analizi Cr atomlarından halojen atomlarına doğru azalan yük transferini ortaya koymaktadır. Tüm sistemler fonon bant dağılımlarına göre dinamik olarak kararlı bulunmuş ve Raman analizleri üç belirgin titreşim modunun varlığını göstermiştir. Manyetik olarak CrF₂ antiferromanyetik (AFM) temel duruma sahipken, diğer bileşikler ferromanyetik (FM) karakter sergilemektedir. Elektronik bant yapısı analizleri, tüm yapıların geniş

bant aralıklı yarı iletken olduğunu; CrF₂'nin doğrudan, diğerlerinin ise dolaylı bant aralığına sahip olduğunu göstermektedir ve bant aralığının halojen atom yarıçapı ile azaldığı gözlenmiştir.

Gerilme uygulanmasıyla CrCl₂, CrBr₂ ve CrI₂ sistemlerinde FM-AFM manyetik faz geçişleri ortaya çıkmış olup, bu geçişlerin Cr-X-Cr bağ açıları ve süper-değişim etkileşimleri ile yakından ilişkili olduğu belirlenmiştir. Kritik gerilme değerlerinde bazı yapıların dinamik kararlılığını koruduğu ve bant yapılarının dolaylıdan doğrudan bant aralığına dönüştüğü bulunmuştur.

Genel olarak sonuçlar, mekanik gerilmenin 1B CrX₂ zincirlerinde manyetik düzeni ve elektronik özellikleri etkin bir şekilde ayarlayabildiğini ve bu sistemlerin spintronik ve optoelektronik uygulamalar için önemli bir potansiyel taşıdığını göstermektedir.

Kaynakça

- 1 Lee, Y., Li, L., Zhang, W., Choi, U., Lee, K., Kim, Y. M., ... & Zettl, A, Robust High-Spin State in One-Dimensional CrX₂ (X= Cl, Br, I) at the Single-Chain Limit, *Journal of the American Chemical Society*, 147(30), 26776-26785, (2025).
- 2 Kanamori, J., "Superexchange interaction and symmetry properties of electron orbitals," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 10(2-3), 87-98, (1959).