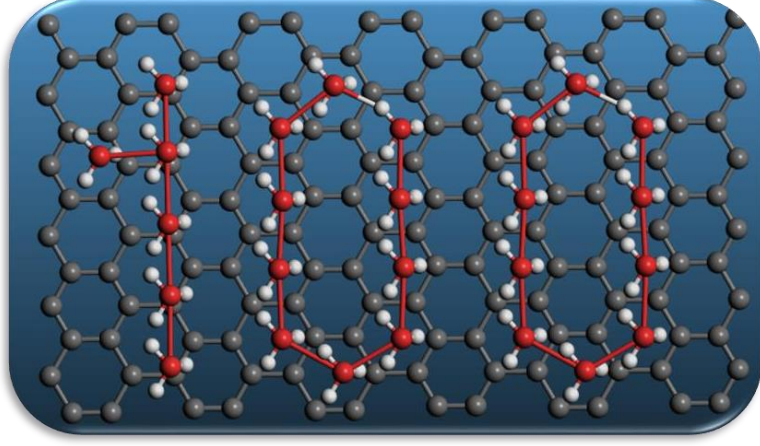


100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023

ÖZET KİTAPÇIĞI



100.YIL ANISINA
YOĐUN MADDE FİZİĐİ ÇALIŐTAYI
27.10.2023

BaŐ Editör : Prof. Dr. Sezgin AYDIN
Editor : Prof. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ
Düzenleyen : İrem Almina GEMİCİ

ISBN Kodu: 978-975-507-337-8
Gazi Üniversitesi Yayınları No: 24

Düzenleme Kurulu

Prof. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ

Prof. Dr. Bülent KUTLU

Prof. Dr. Sezgin AYDIN

Doç. Dr. Ceren TAYRAN

Doç. Dr. Aycan ÖZKAN

Doç. Dr. İlknur Kars DURUKAN

Araş. Gör. Merve Nurhan GÜNEY

İrem Almına GEMİCİ

Gülçin ÇORBACI

İsa BARUĞ

Ulusal davetli konuřmacılar

Prof. Dr. İskender GÖKALP (ODTÜ)

Prof. Dr. Ali GENCER (Ankara Üniversitesi)

Prof. Dr. Serap Őentürk DALGIÇ (Trakya Üniversitesi)

Prof. Dr. Serap SAFRAN (Ankara Üniversitesi)

Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK (Gazi Üniversitesi)

Prof. Dr. Őemsettin ALTINDAL (Gazi Üniversitesi)

Prof. Dr. Hilal YÜCEL (Gazi Üniversitesi)

Prof. Dr. Sezgin AYDIN (Gazi Üniversitesi)

Doç. Dr. Hande TOFFOLİ (ODTÜ)

Doç. Dr. Fatih ERSAN (Aydın Adnan Menderes Üniversitesi)

Doç. Dr. Yeřim MOĞULKOÇ (Ankara Üniversitesi)

Dr. Öğr. Üyesi Murat ÇAVUŐ (Bozok Üniversitesi)

Alev SAKARYA (Trakya Üniversitesi)

Sponsorlar



**T.C.
KEÇİÖREN
BELEDİYESİ**



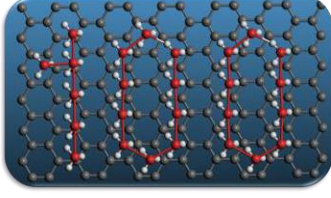
**T.C.
ANKARA
BÜYÜKŞEHİR
BELEDİYESİ**

Eduline

100. YIL ANISINA YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI PROGRAMI (27.10.2023)

Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü

9.00- 9.30	Kayıt		
9.30- 10.00	Açılış Konuşmaları		
10:00-11:00	1. Oturum Oturum Başkanı Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Bülent KUTLU	10:00- 10:30	Prof. Dr. Ali GENCER (Ankara Ü.) “ Süperiletkenlerin Kuantum Dünyası Üzerine”
		10:30- 11:00	Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK (Gazi Ü.) “21. Yüzyılın Öncül Teknolojisi: Fotonik”
11:00-11:20	ARA	Çay-kahve-poster	
11:20-12:20	2. Oturum Oturum Başkanı Prof. Dr. Sezgin AYDIN	11:20-11:50	Prof. Dr. Şemsettin ALTINDAL (Gazi Ü.) “Ara-yüzey tabakalı metal-yarıiletken (MIS) benzeri yarıiletken aygıtlarda muhtemel akım iletim mekanizmaları ve performansı sınırlayan faktörler”
		11:50- 12:20 Zoom (online)	Prof. Dr. Serap Şentürk DALGIÇ (Trakya Ü.) “Sensör ve ilaç dağıtım uygulamaları için karbon bazlı nanotüpler”
12:20-13:00	ARA	Öğle yemeği- çay-kahve-poster-tartışma	
13:00- 13:15	Ara Oturum	EDULINE Sunum	
13:30-15:00	3. Oturum Oturum Başkanı Prof. Dr. Şenay YURDAKUL	13:30-14:00	Prof. Dr. H. Hilal YÜCEL (Gazi Ü.) “Plazmanın Endüstriyel, Teknolojik ve Optoelektronik Uygulamaları”
		14:00- 14.30	Doç. Dr. Hande Toffoli (ODTU) “Düzensiz Ortamlarda Reaksiyon Dinamiği Teorisi: BiNiX Üçlü Metal Alaşımları Kullanılarak CH ₄ gazından H ₂ eldesi”
		14:30-15:00	Doç. Dr. Fatih ERSAN (Adnan Menderes Ü.) “İki Boyutlu MXene’lerin Elektronik ve Manyetik Özelliklerinin Ayarlanması”
15:00-15:20	ARA	Çay-kahve-poster	
15:20- 16:50	4. Oturum Oturum Başkanı Prof. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ	15:20-15:50	Doç. Dr. Yeşim MOĞULKOÇ (Ankara Ü.) “İki Boyutlu Manyetik Malzemeler”
		15:50-16.20	Dr. Öğr. Ü. Murat ÇAVUŞ (Yozgat Bozok Ü.) “Gramicidin A Kanalının Enerji Hesaplaması İçin Yeni Yöntemler: Crooks ve SMD2US”
		16:20- 16:50	Alev Sakarya (Trakya Ü.) “Altın nanoyüzeylerinde Mn katılanmasının Benzen Molekülünün Adsorbsiyonuna Etkisinin İncelenmesi”
16:50-17.10	ARA	Çay-kahve-poster	
17:10-18:10	5. Oturum Oturum Başkanı Doç. Dr. Aycan ÖZKAN	17:10- 17:40	Prof. Dr. Sezgin AYDIN (Gazi Ü.) “Bor ve Nanoteknoloji Uygulamaları”
		17:40- 18:10 Zoom (Online)	Prof. Dr. İskender GÖKALP (Tübitak MAM) “Müvellidülma Teknolojileri ve Türkiye”
18:10-18:45	KAPANIŞ	Poster Ödüllerinin Verilmesi (Yemek: Akşam kumanyası)	



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

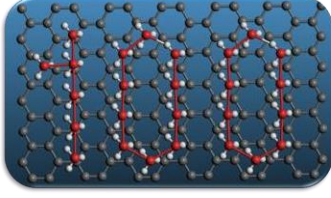
Süperiletkenlerin Kuantum Dünyası

Ali Gencer^{1,2}

¹Ankara University, Science Faculty, Phys. Dept., 06100-Tandogan- Ankara, TURKEY

²Ankara University, Center of Excellence for Superconductivity Research, (CESUR), 06830- Golbasi-Ankara, TURKEY

Özet. Sürdürülebilir Kalkınma, toplumsal kalkınma hedeflerini karşılamakla birlikte, doğal sistemlerin ekonomi ve toplumun dayandığı doğal kaynakları ve ekosistem hizmetlerini sürdürme yeteneğini sürdürmeyi aynı anda hedefler. Bilim Eğitimi ve Teknoloji geliştirme çabaları, sürdürülebilir kalkınma hedefleriyle ilişkilendirilmelidir. Bu sunumda, Türkiye'nin çabalarına ve süperiletken uygulamalara dayalı kuantum teknolojilerinde önde gelen ülkelere kısa bir özet sunulacaktır. Düşük sıcaklık fiziğinin tarihsel ilerlemesi, Kuantum Bilim ve Teknoloji ile kriyojenik mühendislik gibi etkileştirici teknolojilerle birlikte sunulacaktır. Teknoloji uzun bir endüstri devrimleri döneminden sonra son zamanlarda birçok karmaşık işlevsellikle daha gelişmiş hale gelmiştir. Süperiletkenliğin küresel dünyadaki teknolojik gelişme üzerindeki etkisi, enerji, çevre ve kuantum malzemeleri açısından potansiyel olarak bozucu Teknolojilerin olası vurgularını belirterek tartışılacaktır. "Gerçek Kuantum Bilgisayarı, bilim ve teknoloji eksikliği yaşayan bölgeleri de içerecek şekilde dünya genelinde kullanım için geliyor mu?" sorusunun cevabını bulmak için keşfe çıkacağız.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

21. Yüzyılın Öncül Teknolojisi: Fotonik

Süleyman Özçelik

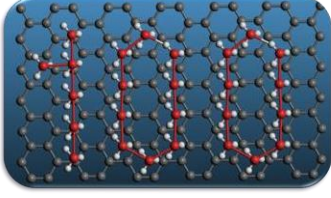
*Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Gazi Üniversitesi, 06500 Ankara
Fotonik Bölümü, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Gazi Üniversitesi, 06500 Ankara*

Özet. Fotonik, ışığın bilimi ve teknolojisidir; ışığın üretilmesini, yönlendirilmesini, işlenmesini, yükseltilmesini ve algılanmasını kapsar. Son yıllarda yaşam biçimimizi değiştiren birçok yeniliğin arkasında fotonik var. Bu, son on beş yılda Nobel ödüllerinin on üçünde fotonik temelli teknolojilerin varlığıyla örtüşmektedir. Yeni bir fotonik çağının eşliğindeyiz; toplumun ve endüstrinin bu teknolojinin tüm avantajlarından yararlanmasını sağlamak için çaba göstermeliyiz.

Günümüzde küresel fotonik pazarının yıllık 500 milyar dolara ulaştığı ve önümüzdeki beş yıl boyunca değeri iki katına çıkacağı öngörülmüyor. Fotonik, Avrupa'nın önde gelen uzmanları tarafından 21. yüzyılda inovasyonun ana itici gücü olarak kabul ediliyor.

Fotonik uzmanlığı, doğası gereği fizik, kimya, malzeme bilimi, elektronik ve bilgisayar mühendisliği temel ve uygulamalı eğitimlerinin bir arada verilmesini gerektirmektedir. Çok-disiplinli eğitimle desteklenecek inovatif yaklaşımlar ile yeni fotonik ürün ve hizmetlerin üretilmesi mümkün olmaktadır. Fotonik malzemelerin, aygıt bileşenlerinin, aygıtların ve donanımların üretimi, sistemler yaklaşımını gerektirdiğinden çok-disiplinli yeni bir programın kurgulanmasının önemi ortaya çıkmaktadır. Temel bilimlerin veya mühendislik alanlarının belirli bir alana odaklanmış olan eğitim programlarının çok- disiplinli teknolojik alanlardaki gelişmeyi yakalayabilmesi ve endüstriyel ihtiyaçlara tek başına cevap verebilmesi günümüzde giderek zorlaşmaktadır. Tek disiplinli alanlar yerine artık, fotonik, moleküler elektronik, nanoteknoloji, mekatronik, biyomühendislik ve nano elektronik gibi çok-disiplinli programlara duyulan ihtiyaç fark edilmiş olup, uluslararası üniversite ve teknoloji enstitülerinde sözü edilen programlar kurulmaya başlanmıştır.

Bu sunumda, fotonik teknolojilerin hayatımızdaki rolü, küresel pazar büyüklüğü ve gelecek öngörülerini değerlendirecektir. Ayrıca, çok eklemlili güneş hücresi geliştirme teknolojisi kapsamında grubumuz tarafından yapılan çalışmalar sunulacak; geliştirdiğimiz ve halihazırda KILIÇSAT uydusu üzerinde yörüngede tarihe kazanmakta olan Türkiye'nin ilk uzay kalifiye güneş hücresi (GZ-PV) üretim serüveni paylaşılacaktır.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

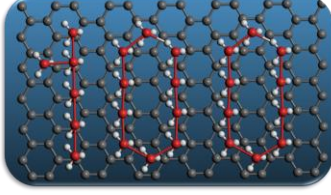
Ara-Yüzey Tabakalı Metal-Yarıiletken (MIS) Benzeri Yarıiletken Aygıtlarda Muhtemel Akım İletim Mekanizmaları ve Performansı Sınırlayan Faktörler

Prof. Dr. Şemsettin Altındal

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

Özet. Elektronik endüstrisinin temelini; diyot, foto-diyot, güneş pilli, LEDs, sensör ve transistör gibi aygıtlar oluşturmaktadır. Ancak, günümüzde başlıca temel bilimsel ve teknik problem bu aygıtlarının performansının artırılması ve üretim maliyetlerinin düşürülmesidir. Üstelik gelişmişliği en önemli ölçütlerinden birisi bu teknolojilerin üretimi ve kullanımınıdır. Diğer önemli bir sorun, bu aygıtlarda, yük iletim mekanizmalarının henüz net olarak açığa kavuşturulmaması ve performans kayıplarının belirlenip minimize edilmemesidir. Çünkü bu aygıtlarda iletim; termiyonik/alan-emisyon (TE, TFE, FE), üretim- birleşme (GR), çok adımlı veya tuzak yoluyla tünelleme (MT), Gauss dağılımı (GD) gibi birçok mekanizma ile tek başına veya birkaçı ile belirli bir sıcaklık, frekans, voltaj, radyasyon aralığında baskın olabilir. Özellikle yarıiletkendeki yasak enerji aralığı, yarıiletkene katılan alıcı/verici katkı atomlarının yoğunluğu, arayüzey tuzakları, seri/kısa devre dirençleri, engelin biçimi ve sıcaklık bu iletim mekanizmaları üzerinde oldukça belirleyicidir. Diğer taraftan, sadece tek veya dar bir frekans, voltaj, sıcaklık veya radyasyon aralığında yapılan ölçümler, temel elektronik parametreler, iletim mekanizmaları ve metal ile yarıiletken arasında oluşan engelin biçimi hakkında yeterli ve güvenilir sonuçlar sağlayamaz. Bu nedenle bu yapılarda verimi/performansı artırmak, maliyeti düşürmek ancak ve ancak yeni nesil malzemelerin geliştirilmesi, iletim mekanizmalarının (CTMs) detaylıca araştırılması ve tekrarlı bilirliliklerinin artırılmasıyla mümkün olabilir. Bu problemlerin çözüme kavuşturulması, ancak çok sayıda yeni genç araştırmacıların bu alandaki çalışmalara gönül vermeleriyle mümkün olabilir. Kısacası, bu alanlarda halen çözüme kavuşturulmasını bekleyen çok sayıda sorun mevcuttur.

Anahtar Kelimeler: Akım iletim mekanizmaları; Yeni malzeme geliştirilmesi, Engel homojensizliği; Performansı sınırlayan faktörler, Elektriksel parametrelerin sıcaklıkla değişimi



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



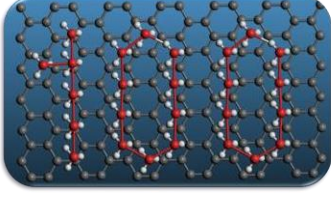
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Karbon Esaslı Nanotüplerin Sensör ve İlaç Taşıma Uygulamaları için Kullanımı

S. Şentürk DALGIÇ¹

¹ *Department of Physics, Faculty of Science, Trakya University, 22030 Edirne, Turkey*

Özet. Çeşitli nano-taşıma sistemleri arasında, karbon esaslı nanotüpler, eşsiz ve olağanüstü fizikokimyasal özellikleri nedeniyle biyomedikal ve doku mühendisliğinde biosensörler veya ilaç taşıma sistemleri olarak giderek artan ilgi görmektedir. Karbon nanotüplerin (CNT'ler) amperometrik ve elektrokimyasal biosensör uygulamaları nedeniyle, ilaç molekülleri ile saf/dopeli CNT'ler arasındaki etkileşimler burada ele alınmaktadır. Silikon karbür (SiC) nanotüpler de CNT'lerle karşılaştırıldığında ilaç taşıyıcı rolü için büyük önem kazanmıştır. Karbon esaslı nanotüplerin ilaç-kompleks sistemlerinin temel özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile incelenmektedir. Karbon esaslı nanotüplerin boyutu ve yüzey değişiklikleriyle doping etkisi, ilaçları tespit etmek, tanımak ve tıbbi uygulamalarında taşımak için pratik uygulamalarda umut vadeden sensörler olarak tanımlamak amacıyla incelenmektedir."



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



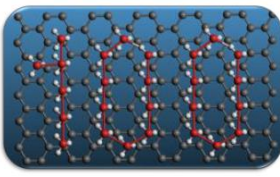
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Plazmanın Endüstriyel, Teknolojik ve Optoelektronik Uygulamaları

Prof. Dr. Hatice Hilal YÜCEL

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

Özet. Plazma; kızılötesi görüntü çevirici tasarımı, optik çalışmalar, biyoloji ve biyomedikalde, uzay sanayisinde, materyal aşındırma veya sertleştirme teknolojisinde, tekstil, kağıt, otomobil, uçak endüstrisinde, elmas yapımında, yarıiletken teknolojisinde, iletişim teknolojisinde, kaplama ve dekorasyon teknolojisinde, sterilizasyon ve su arıtma sistemlerinde, tehlikeli ve zararlı atık arıtmada, güneş enerjisi ve optik sanayisinde, yeni teknolojik inşaatlarda, kristal büyütmede, füzyon araştırmalarında, sağlıkta (dezenfektasyon, sterilizasyon ve kanser tedavisi vb.), teknolojide (çip ve entegre imalatında), askeri saldırı ve savunma sistemlerinde (kızılötesi dürbün, güdümlü füze, gece görüş sistemleri vb.), tarım amaçlı kullanılabilecek zirai maddeler ve günlük yaşantımızda kullandığımız birçok eşya (TV, floresan lamba vb.), gıda endüstrisinde ve daha birçok alanda plazma sistemleri kullanılmaktadır. Biz teorik ve deneysel olarak laboratuvar ve simülasyon ortamında DC plazma sistemleri, Dielektrik bariyer boşalması, frekans tetiklemeli plazma sistemleri, optik plazma, 3 boyutlu plazma sistemlerini simülasyon olarak incelemekteyiz. Bu alan yeni, spesifik ve gelişmekte olduğundan literatüre katkı sağlamayı hedefliyoruz. Çalışmamızda, Argon, Hidrojen, Xe, ve Neon gazları kullandık.



Düzensiz Ortamlarda Reaksiyon Dinamiği Teorisi: BiNiX Üçlü Metal Alaşımları Kullanılarak CH₄ gazından H₂ eldesi

H. Toffoli¹, A. Erbasan¹, U. Sökmen², E. Eroğlu³, R. N. Mutlu³, G. Kardaş⁴, İ. Gökalp³, G. Çelik²

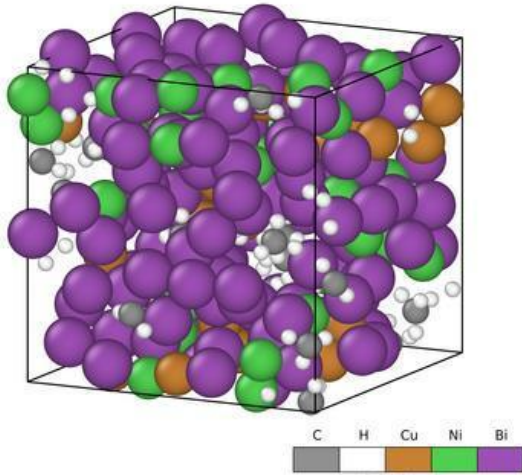
¹Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

²Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

³Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Makina Mühendisliği Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

⁴Çukurova Üniversitesi, Kimya Bölümü, 01330, Sarıçam, Adana

Hidrojen ekonomisinin enerji politikaları yönünden giderek önem kazandığı günümüzde verimli, geri dönüştürülebilir, çevre dostu ve düşük maliyetli katalizörlerin geliştirilmesi bilim dünyasının önceliklerinden biri haline gelmiştir [1]. Endüstriyel olarak önemli olan kimyasal reaksiyonlarda katalizör olarak eriyik metallere kullanılması fikri bir süre önce literatüre sunulmuştur [2]. CH₄ özelinde amaç CO ve CO₂ gazlarının açığa çıkmasına engel olarak, sadece karbon yan ürünlerinin elde edildiği çevre dostu bir katalizör geliştirmektir. Metalin erime sıcaklığı, H₂ dönüşümünün verimi, karbon materyalin metale bağlanma enerjisi gibi çok geniş bir parametre listesi ortaya çıkmaktadır. Tüm bu parametrelerin deneysel metodlarla optimizasyonu olanaksızdır. Bu sunumda aktarılacak olan çalışmanın dayandığı projemizde, ekibimiz hem deneysel hem de teorik modelleme (Ab Initio Molecular Dynamics, AIMD) metodları kullanarak her açıdan en verimli ve az masraflı olan katalizöre ulaşmayı hedeflemektedir.



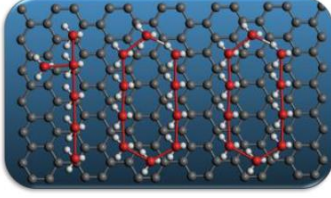
Şekil 1: AIMD için kullanılan ve 200 metal atomu ve 20 CH₄ molekülü içeren simülasyon hücresi

Kaynakça

1. J. O. Abe, A. P. I. Poopola, E. Ajenifuja, O. Poopola, "Hydrogen Energy, Economy and Storage: Review and Recommendation", International Journal of Hydrogen Energy, **44**, 15072-15086 (2019).
2. D. C. Upham *et al.* "Catalytic molten metals for the direct conversion of methane to hydrogen and separable carbon", Science, **358**, 917-921 (2017).

Metaller arasında en reaktif olanlardan biri nikel (Ni). Birçok kataliz uygulamasında halihazırda kullanımda olan Ni, yüksek erime sıcaklığı ve getirdiği ekonomik yük nedeniyle ekibimizin hedeflediği reaktörler için tek başına uygun değildir. Erime sıcaklığı düşük olan Bizmut (Bi) ile alaşımları benzer sistemlerde kullanılmıştır. Projemizde NiBi alaşımlarının üçüncü bir metal ile katkılı olduğu üçlü alaşımların incelenmesi hedeflenmiştir. Yük yoğunluğu fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory, DFT) kullanılarak taranması sonucunda Al, Cu, Ga, In başta olmak üzere üçüncü metal adayları bulunmuştur. Öncelikli olarak, değişik kompozisyonlarda NiBiCu ve NiBiAl üçlü alaşımları teorik ve deneysel olarak ele alınmıştır. Teorik modelleme literatüründe reaksiyon dinamiği denildiğinde ilk akla gelen Elastik Bant metodudur (Nudged Elastic Bands, NEB). Ancak çalışmalarımızın daha ilk aşamalarında basit NEB hesaplarının bu yüksek entropi ve yüksek sıcaklık ortamında sağlıklı sonuçlar vermediği görülmüştür. Böyle ortamlarda reaktif metal atomunun komşuluğu, molekülün titreşim modu, H atomu kopması sonrası izlenen yol gibi birçok ilave faktör mevcuttur. Tüm bunların sağlıklı bir analizinin yapılması için yüksek sayıda AIMD hesapları yapılmış ve istatistiksel bir inceleme gerçekleştirilmiştir. Sunumda öncelikle ekibimizin geliştirdiği bu yenilikçi metodlardan söz edilecektir. Bu bölümü takiben hangi alaşımların daha verimli olduğu kompozisyon açısından ele alınacaktır. Deneylerle son derece uyumlu olduğu görülen teorik sonuçlarımız karşılaştırmalı olarak incelenecek ve daha sonraki aşamada yapılması planlanan çalışmalardan bahsedilecektir.

Bu araştırma TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir (Proje No: 121M443). hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

İki-Boyutlu MXene'lerin Elektronik ve Manyetik Özelliklerinin Ayarlanması

Fatih Ersan

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

Özet. Günümüz yüksek teknolojisi spintronik (magnetoelektronik) aygıtlar, mantık devreleri ve bellek işlemcileri gibi yük taşıyıcılarının dönme serbestlik derecesinin değiştirilmesine dayanan elektronik devre cihazları, malzemelerin manyetik özelliklerinin anlaşılmasını kaçınılmaz kılmaktadır. Bu nedenle manyetik özellik göstermeyen malzemelere dahi yapı içerisinde boşluk kusuru oluşturma, yabancı atom katkılama, çekme/sıkıştırma gerilimi uygulama gibi pek çok değişik dış etkiler altında manyetik özellik kazandırılmaya çalışılmaktadır. Özellikle iki boyutta büyütülen malzemeler hacimli hallerine göre çok farklı özelliklere sahip olmakta ve dış etkiler ile kolaylıkla yeni özellikler gösterebilmektedirler. Son yıllarda iki boyutlu malzeme ailesine MXene ismi ile bilinen yeni bir üye katılmıştır. Yeni nesil iki boyutlu malzeme sınıfının bu yeni üyesi olan MXene'ler dışarıdan hiçbir müdahaleye gerek kalmadan yüksek manyetik özellik (manyetik moment değeri, faz geçiş sıcaklığı vb.) sergilemektedirler. MXene'ler, sahip oldukları bu manyetik özelliklerinden dolayı pek çok araştırma grubu tarafından çalışılmakta ve ayrıntılı incelemeleri yapılmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, MXene, Manyetik malzemeler

Geçiş metali dikalkojenitler, geçiş metali borürler (MBene) ve geçiş metali karbürler/nitrürler (MXenes) dahil olmak üzere oda sıcaklığında Curie/Neel (TC/TN) sıcaklığını elde edebilmek için çok sayıda 2D manyetik malzeme teorik ve deneysel olarak incelenmiştir. Bunların arasında MXene'ler, yapısal çeşitlilikleri, kullanılabilirlikleri ve iyi mekanik, kimyasal ve elektronik özellikleri nedeniyle düşük maliyetli ve verimli spintronik cihazlarda kullanılabilirliğine dair umut vaat etmektedirler. Mxene yapısı, tek[1] ve çift katmanlı[2] MXene'ler de dahil olmak üzere çeşitli formlarda bulunabilmektedir. Son yıllarda yapılan pek çok teorik çalışmada ferromanyetik ve antiferromanyetik spintronik cihazlar için birçok çift katmanlı MXene (DTM) yapısının varlığı öngörülmüştür. Ancak genel olarak DTM'nin bildirilen manyetik özelliklerine ilişkin iddialar belirsizliğini korumaktadır. Bunun başlıca nedeni Mxene içerisindeki metal atomuna ait Coulombic etkilerin hesaplamalarda doğru bir şekilde tanımlanmamasıdır. Her 2D Mxene yapısının içerisindeki metal atomunun farklı olması ve hatta aynı metal atomu dahi olsa çevresindeki atomların farklılığı veya metal atomunun koordinasyon sayısı hesaplamalara dahil edilmesi gereken Hubbard+U parametresinin değişmesine sebep olmaktadır. Değişen Hubbard+U parametresi aynı malzeme için yapılan teorik hesaplamalar farklı elektronik ve manyetik özellikler gösterebilmektedir. Bu motivasyonla, bu çalışmada deneysel olarak sentezlenmiş iki boyutlu M_3C_2 ve $M_2M'C_2$ MXene yapıları ve bunlar ile oluşturulacak olan hetero-MXene'lerin elektronik ve manyetik özellikleri kuantum mekaniğine dayalı yoğunluk fonksiyoneli teorisi ve Monte Carlo simülasyonları ile incelenmiştir.

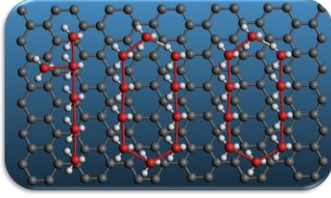
Literatürdeki pek çok MXene çalışmasından farklı olarak, bu çalışma kapsamında incelenen MXene'lerin Hubbard+U parametresi rastgele değil, güvenilirliği kanıtlanmış lineer yanıt yaklaşımı metodu ile belirlenmiştir. Böylece, MXene'ler içerisindeki metal atomlarının kısmen dolu olan d orbitallerinin enerji seviyeleri doğru olarak tanımlanmış ve elektronik ve manyetik özellikleri hassas bir şekilde hesaplanmıştır.

Teşekkür

Bu çalışma Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu(TÜBİTAK) tarafından 121F270 Araştırma Projesi kapsamında desteklenmiştir.

Kaynaklar

1. B. Akgeç, E. Vatansever, F. Ersan, "Tuning of electronic structure, magnetic phase, and transition temperature in two-dimensional Cr-based Janus MXenes", Phys. Rev. Materials 5, 083403 (2021).
2. F. Bilican, S. Ozdemir Kart, E. Vatansever, F. Ersan, Z. Demir Vatansever, "Strain effects on the electronic and magnetic properties of Cr_2TaC_2 and $Cr_2TaC_2O_2$ monolayers", Appl. Phys. Lett. 122, 151901 (2023).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

İki Boyutlu Manyetik Malzemeler

Yeşim Moğulkoç

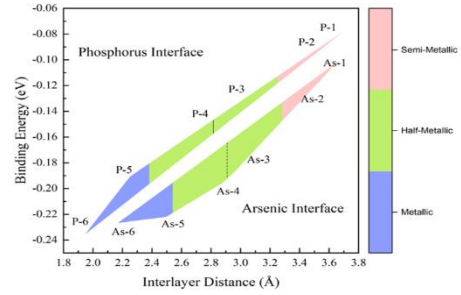
Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği, Ankara, 06100

Özet. İki boyutlu (2D) manyetik malzemeler, farklı malzemelerin bir araya getirilmesiyle yüksek performanslı ve enerji verimli cihazların üretimine olanak sağlar. Manyetik heteroyapılarda ise, arayüz yapısı, tek katmanların manyetik özellikleri ve katmanlar arasındaki etkileşimler gibi faktörlere dayanmaktadır ve manyetik özelliklerinin ayarlanabilir olması ile manyetik sensörler, spin valfleri ve manyetik bellek cihazları gibi uygulama alanları için öne çıkmaktadır.

Anahtar Kelimeler: 2D Manyetik Malzemeler, Manyetik Heteroyapılar, Manyetik Özellikler, Spin Polarizasyonu, Fonksiyonelleştirme

2D manyetik heteroyapılar, atomik ölçekte farklı manyetik ve/veya manyetik olmayan malzemelerin bir araya getirilmesiyle oluşturulan malzemelerdir. Bu tür manyetik heteroyapılar, yüksek hassasiyet ve performans sunarak manyetik cihazların geliştirilmesine imkan tanır ve potansiyel spintronik uygulamalar için de önemli bir malzeme sınıfını temsil eder [1]. Bu tür heteroyapılar manyetik hafızalı cihazlar, manyetik sensörler ve manyetik veri depolama gibi farklı uygulamalarda kullanılabilir. NM/FM/NM türündeki heteroyapıların elektronik ve manyetik özellikleri ve tek tabaka CrN'nin F ve Cl atomları ile fonksiyonelleştirmenin manyetik anizotropi üzerine etkisi anlatılacaktır. NM/FM/NM sisteminin katmanlar arası mesafelerinin istif (stack) bağımlı olduğu gösterilmiştir (Şekil 1). Bu yapının elektronik ve manyetik özelliklerinin bu istiflere bağımlılığından etkilendiği gösterilmiştir. Son olarak flor ve klor atomları ile yüzeyi fonksiyonelleştirilen tek tabaka CrN'de ise orbital momentlerin

bastırılması (supress) sonucunda manyetik kolay eksenin düzlem dışından düzlem içine kaydığı gösterilmiştir [2].



Şekil 1. İki tabakalı MnS_2 -PAs manyetik heteroyapıların bağlanma enerjisi ile katmanlar arası mesafe değişimi

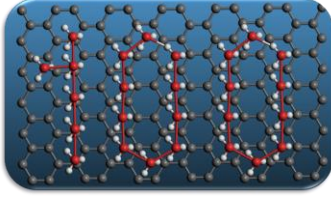
Çalışmalarda ele alınan tüm yapılar için, güçlü elektron korelasyonlarının etkisi de Hubbard terimi ile dikkate alınmıştır.

Kaynaklar

1. L. Jiao, Z. Zhang, X. Wang, X. Duan, and E. Wang, "Two-dimensional van der Waals magnetic heterostructures," Nature Communications, 9(1), 1-12 (2018).
2. R. Caglayan, Y. Mogulkoc, A. Mogulkoc, M. Modarresi, and A. N. Rudenko, "Easy-axis rotation in ferromagnetic monolayer CrN induced by fluorine and chlorine functionalization," Physical Chemistry Chemical Physics, 24(41), 25426-25433 (2022).

Teşekkür

Bu çalışma TÜBİTAK tarafından TÜBİTAK-1001 (No.119F361) ve FLAG-ERA JTC-2021 (No.221N400) projeleri kapsamında desteklenmiştir. Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu (hymp.ankara.edu.tr) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Gramicidin A Kanalının Enerji Hesaplaması için Yeni Yöntemler: Crooks ve SMD2US

¹Murat Çavuş, ²Berkay Arslan, ³Turgut Baştuğ

¹Yozgat Bozok Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Fen Eğitimi ABD, Yozgat, Türkiye

²Hacettepe Üniversitesi, Nanoteknoloji ve Nanotıp ABD, Ankara, Türkiye

³Hacettepe Üniversitesi, Tıp Fakültesi, Biyofizik ABD, Ankara, Türkiye

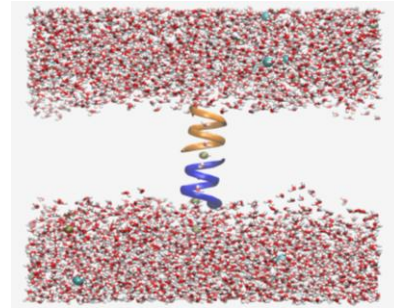
Özet. Gramicidin A kanalı, biyofiziksel araştırmalar, ilaç geliştirme çalışmaları ve iyon kanalı işleyişinin anlaşılması için önemli bir model olarak hizmet etmektedir. Bu kanalın özellikleri, iyon kanalları ve membran biyokimyasının temel prensiplerini anlamak için kullanışlıdır. Bu çalışmada, Gramicidin A kanalı için literatürde var olan enerji hesaplamalarının yanında geliştirilen yeni yöntemlerle iyon geçişinin enerji değerleri hesaplanmıştır. Crooks ve SMD2US yöntemleri ile elde edilen enerji değerleri, literatürdeki bilgilere uyumlu ve tutarlıdır.

Anahtar Kelimeler: Gramicidin A Kanalı, Crooks Dalgalanma Teoremi, SMD2US Yöntemi, Denge Dışı Sistemler

Kısa giriş ve metotlar. Serbest enerji, dinamik süreçlerin anlaşılmasında rol oynayan en önemli veridir. Moleküler dinamik simülasyonları atom düzeyinde sistemin dinamik davranışlarının anlaşılmasında önemli bilgiler verir. Simülasyon trajektörü veri analizleri; bağ, açı ve torsiyon açılarının yanı sıra atomlar arasındaki hidrojen bağları gibi birçok yapısal özellikleri açıklayabilir. Sistemin tam olarak anlaşılması için kimyasal süreçlerin serbest enerji davranışlarının incelenmesi gerekir. Denge dışı sistemler için literatürde geliştirilmiş pek çok yöntemler bulunmasına rağmen (Jarzynski, 1997; Kawai vd., 2007; Parrondo vd., 2009; Crooks, 1999) bu çalışmada ağırlıklı olarak denge dışı yola bağlı serbest enerji hesabı için Faz uzayı yöntemi ve yoldan bağımsız serbest enerji hesabı için Crooks dalgalanma teoremi üzerinde durulacaktır.

Kısaca sonuçlar. Yoldan bağımsız serbest enerji hesabı için Crooks yönteminin karmaşık biyolojik sistemler için uygulaması yapılmıştır. Çalışma

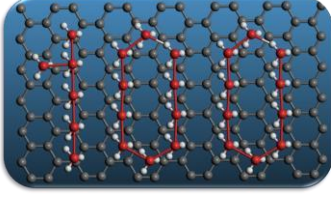
kapsamında başlangıç ve son durumların dengede olmasını sağlayan bir algoritma geliştirilmiştir ve algoritmanın hızlıca çalıştığı ve serbest enerji dağılımının 4 iterasyonda yakınsadığı gösterilmiştir. Denge durumu gerektirmeyen yola bağlı serbest enerji hesabı için faz uzayı yöntemi kullanılmıştır. Faz uzayı yöntemini uygulamak için SMD2US olarak adlandırdığımız yöntem geliştirip GA kanalına uygulanmıştır. Kompleks sistemlerde düşük hızlarda PMF eğrisi faz uzayı yöntemi ile elde edilmiş ve yöntemin çalıştığı gösterilmiştir.



Şekil 1. GA sistemi, orta bağlanma cebinde K⁺ iyonu bulunmaktadır.

Kaynaklar

1. Crooks, G. E. 1999. "The entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences" Phys. Rev. E, 60, 2721-2726.
2. Jarzynski, C. 1997. "Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences", Physical Review Letters, 78(14):2690-2693.
3. Kawai, R., Parrondo, J. M., & Van den Broeck, C. 2007. "Dissipation: The phase-space perspective", Physical review letters, 98(8), 080602.
4. Parrondo, J. M. R., Van der Broeck C. and Kawai, R. 2009. "Entropy production and the arrow of time" New Journal of Physics 11, 073008.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

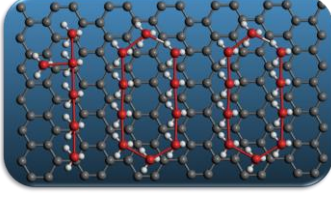
Altın Nano Yüzeylerine Mn Katkılmasının Bu Yüzeylerde Benzen Molekülünün Adsorpsiyonuna Etkisinin İncelenmesi

Alev SAKARYA¹, S. Şentürk DALGIÇ¹, O. Gülseren²

¹Trakya Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 22030 Edirne, Türkiye

²Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü Ankara, Türkiye

Özet. Altın ve gümüş nanoparçacıkların büyüklük ve boyutuyla değişen özelliklerinden dolayı ilaç taşıyıcı sistemlerde, kesin tanı-tedavi gibi biyomedikal uygulamalarda ve çeşitli reaksiyonlarda katalizör olarak kullanılması bu metallere olan ilgiyi gün geçtikçe arttırmaktadır. Bu çalışmada, katkısız ve Mn atomu katkılı iki farklı altın nano yüzeyleri (Au₂H ve Au₉) ile gümüş (Ag₂H) nano yüzeylerin yapısal kararlılıkları, elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) kullanan Quantum Espresso programı yardımıyla hesaplanmıştır. Ayrıca Benzen molekülünün katkılı ve katkısız 9 atoma sahip hcp-Au₂H yüzeyi ile ve Au₉ altın nanocluster ile etkileşimi incelenmiş, bağlanma durumları ve bazı parametreleri (fizikokimyasal, iletkenlik, manyetiklik gibi) hesaplanmıştır. Mn atomunun katkılanması altın yüzeyinin manyetik değerinin arttığı, adsorpsiyon enerjisinin katkılı atomun özelliğine ve molekülün etkileştiği atomun konumuna bağlı olduğu gözlenmiştir.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Bor ve nanoteknoloji uygulamaları

Sezgin AYDIN

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

Ülkemiz büyük bir yeraltı zenginliği olarak Dünya Bor rezervinin ~%73'üne sahiptir. Bor mineralleri ve kullanım alanları ile ilgili bazı temel bilgiler bor.en.tenmak.gov.tr adresinde bulunabilir. Araştırmacılar olarak, deneysel veya teorik yöntemleri kullanarak çeşitli alanlarda ve güncel konularda elementer bor fazları ve bor bileşikleriyle ilişkili, kritik bulgular taşıyan kapsamlı çalışmalar yapılması ülkemiz açısından oldukça önemlidir. Tinkal, kolemanite ve ülexite ülkemizde çıkarılan başlıca bor mineralleridir.

Bor ile ilişkili çalışmalar 0-, 1-, 2- ve 3-boyutlu sistemleri içermek üzere, çok-disiplinli kimya ve malzeme fiziği, uygulamalı fizik, fiziko-kimya, yoğun madde fiziği, nanoteknoloji, metalürji mühendisliği, inorganik kimya, elektrik-elektronik mühendisliği gibi geniş bir araştırma yelpazesine yayılırlar. Bor'un elemental fazları [1, 2], makine öğrenmesi metotları yardımıyla yeni rapor edilen kübik B₂₄ [3], hafif element bileşikleri (C ve N ile yaptığı bileşikler) ve geçiş metalleri ile yaptığı bileşikler (W-B, Re-B ve Os-B faz diyagramları) yüksek sertlik ve iyileştirilmiş mekanik özelliklere sahiptir.

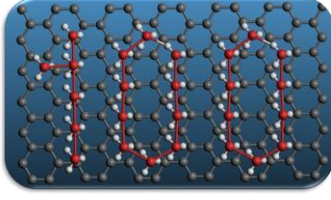
MgB₂ başta olmak üzere, MgB₂-tipi tabakalı sistemlerde ve çok sayıda bor içerikli yapıda süperiletkenlik gözlenir. Yüksek basınç-yüksek sıcaklık uygulamalarında termal kararlılıkları, ısı dayanımları ve görece sert doğalarından dolayı bor fazları ve bileşikleri tercih edilir. Farklı kategorilerde manyetik özellikler sergileyen bor bileşikleri mevcuttur (Fe-B, Cr-B, Mn-B, Nb-B faz diyagramları).

Bütün bunların ötesinde, bor 2- veya 3-boyutlu katıhal hidrojen depolama sistemlerinde, gravimetrik H₂ oranını artırma ve çekirdeklenmeyi önleme gibi çeşitli avantajlara sahiptir. Ayrıca batarya teknolojileri ve enerji uygulamalarında kullanılan bor bileşikleri de mevcuttur.

Anahtar Kelimeler: Bor, bor karbür, faz diyagramı

Kaynaklar

- [1] A.R. Oganov, J. Chen, C. Gatti, Y. Ma, Y. Ma, C.W. Glass, Z. Liu, T. Yu, O.O. Kurakevych, V.L. Solozhenko, Ionic high-pressure form of elemental boron, *Nature*, 457 (2009) 863-867.
- [2] U. Häussermann, A.S. Mikhaylushkin, Structure and Bonding of γ -B28: Is the High Pressure Form of Elemental Boron Ionic?, *Inorganic Chemistry*, 49 (2010) 11270-11275.
- [3] Q. Yang, J. Lv, Q. Tong, X. Du, Y. Wang, S. Zhang, G. Yang, A. Bergara, Y. Ma, Hard and superconducting cubic boron phase via swarm-intelligence structural prediction driven by a machine-learning potential, *Physical Review B*, 103 (2021) 024505.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



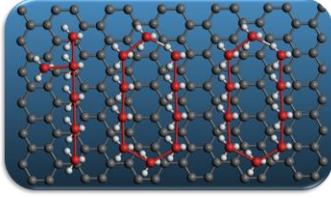
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Müvellidülma (hidrojen) Teknolojileri ve Türkiye

Prof. Dr. İskender Gökalp

TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezi, Gebze, Kocaeli

Özet. Hidrojen eko-sistemi konusu bugün küresel olarak tartışılmakta, ulusal ve uluslararası stratejiler oluşturulmakta ve dünyanın sürdürülebilir geleceğindeki yeri tartışılmaktadır. Hidrojenin bir enerji taşıyıcısı ve de yakıt olarak karbonsuzlaşma çabalarına katkı vereceği düşünülmektedir. Bu sunumda hidrojenin var olan enerji sistemlerini nasıl etkileyebileceği, Türkiye bağlamında nasıl ele alınabileceği, hidrojen eko-sisteminin geliştirilmesinin Türkiye'ye teknolojik ve enerji bağımsızlığı açılarından nasıl katkı verebileceği kısaca tartışılacaktır.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Basınç Altında Alumina(Al_2O_3)'nın Yapısal, Elektronik ve Optik Özellikleri

Ali Haydar ÖZTÜRK¹, Sezgin AYDIN²

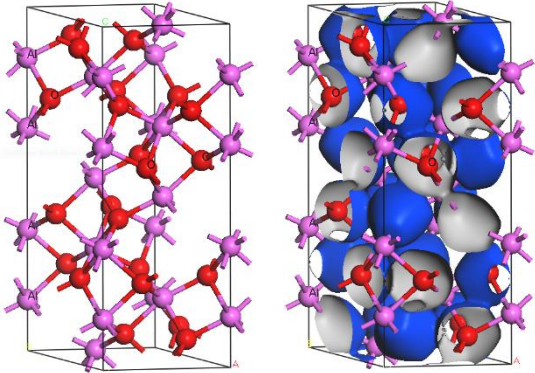
¹Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik, Ankara, 06500

²Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet: Şeffaf ve sert bir malzeme olan Alumina(Al_2O_3)'nın, (0-220) Gpa basınç altında yapısal özellikleri, elektronik ve optik özellikleri, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi'ne dayanan ilk prensip hesaplamaları ile araştırıldı. Elde edilen sonuçların, literatürdeki deneysel sonuçlar ile uyumlu olduğu görüldü. Basınç altında faz geçişleri incelendi, özellikle faz geçiş bölgelerinde fiziksel parametrelerin değişimleri araştırıldı. Artan basınç altında değişen fazlar ile birlikte örgü parametrelerinin, yasak enerji aralığının, optik özelliklerin ve sertliğin değişimleri tartışıldı.

Anahtar Kelimeler: Alumina, basınç, faz geçişleri, sertlik, optik özellikler

Tek kristal Alumina saydam ve sert bir malzemedir. Bu nedenle gündelik yaşam ve savunma sanayiinde yaygın kullanım alanına sahiptir. Tek kristal Alumina'nın (0 – 220) GPa aralığındaki basınçlar altında, üç fazı (corundum, Rh_2O_3 (II), Pbnm) bulunduğu, deneysel olarak bilinmektedir [1,2]. Bu çalışmada ilk prensip hesaplamaları ile, bu fazlar arasındaki geçiş basınçları ve fiziksel parametrelerin basınç altında değişimleri incelendi. Corundum fazı Şekil 1'de gösterildi.

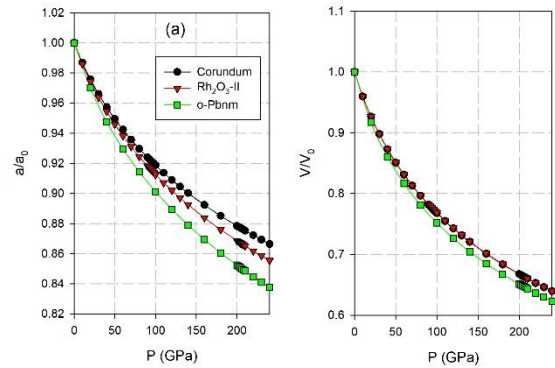


Şekil 1. Tek kristal Alumina'nın 0 GPa'daki yapısı (corundum)

Tek kristal Alumina 94 GPa basınç altında hegzagonal corundum fazından, ortorombik Rh_2O_3 -II fazına, 202

GPa basınçta da ortorombik Rh_2O_3 fazından, ortorombik Pbnm fazına geçtiği tespit edildi.

a -örgü parametresinin ve birim hücre hacminin basınçla değişimi Şekil 2'de gösterildi.

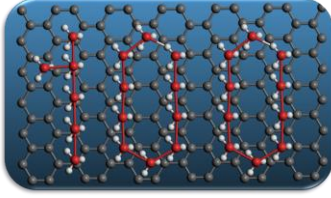


Şekil 2. a -örgü parametresinin ve hacmin basınçla değişimi.

Yasak enerji aralığının basınçla birlikte önce arttığı, 200 GPa ve üzerinde hemen hemen sabitlendiği gözlemlendi. Sertliğin 20 GPa'dan başlayıp, basınçla birlikte düzgün bir şekilde arttığı tespit edildi.

Kaynaklar

1. W. Duan, R. M. Wentzcovitch, K. T. Thomson, Phys. Rev. B 57, 10363 (1998).
2. B. Xu, H. Stokes, J. Dong, J. Phys: Condens. Matter 22, 315403 (2010).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile Yakıt Hücreleri için İki Boyutlu Malzemelerin Katalitik Aktivite Hesaplamaları

Alpaslan Gürbüz

Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet. Bu çalışmada, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi kullanılarak Proton Exchange Membrane (PEM) Yakıt Hücreleri'nde gerçekleşen Hidrojen oksidasyonu ve Oksijen indirgenmesi reaksiyonlarına yönelik iki boyutlu destek malzeme üzerine tutunan geçiş metallerinin katalitik aktivite hesaplamalarının gerçekleştirilmesi amaçlanmaktadır. Grafen benzeri hekzagonal yapıya sahip BC_3 yüzeyine tutunan Ti atomu ile yapılan hesaplamalarda, Ti atomunun yüzeye bağlanma enerjisinin ($E_{ads} = 5,33$ eV) bulk kohesif ($E_{coh} = 4,85$ eV) enerjisinden yüksek olduğu görülmüştür. Bu değerler, BC_3 yüzeyi üzerine tutunan Ti atomunun uygun katalizör adayı olabileceğini düşündürmektedir. Hidrojen molekülünün Ti atomu katkılı yüzeye bağlanma enerjisi ise $E_{adH_2} = 0,45$ eV olarak hesaplanmıştır.

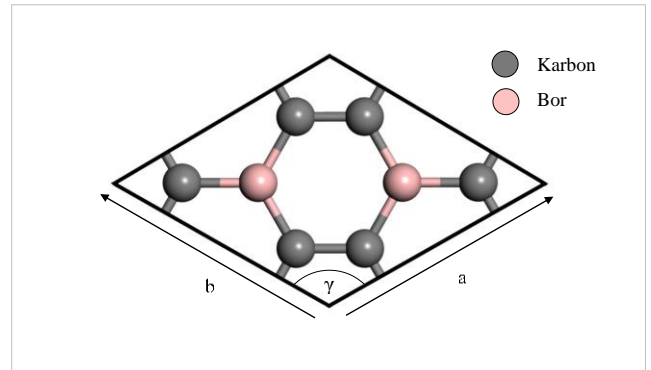
Anahtar Kelimeler: PEM Yakıt Hücresi, Katalizör, Hidrojen Ayrışımı

PEM yakıt hücrelerinde halihazırda Grafen veya Karbon/Grafit üzerine katkılı Pt katalizörler kullanılmaktadır. Yakıt hücresinde gerçekleşen reaksiyonlar için en etkin katalizör seçimi olmalarına rağmen, Pt atomlarının Grafen yüzeye tutunma enerjilerinin kohesif enerjilerinden düşük olmaları ve bu nedenle yüzeyden kopmaları veya topaklar oluşturmaları, söz konusu atomların katalitik aktiviteleri ile birlikte yakıt hücrelerinin verimliliğini düşürmektedir. Yüksek maliyeti ve sınırlı üretimi, Platin'in PEM yakıt hücrelerinde yaygın kullanımını engelleyen nedenler arasındadır. Söz konusu sınırlılıklar, yakıt hücresindeki reaksiyonlara yönelik yüksek aktiviteye sahip alternatif katalizör ve destek malzeme arayışını gerekli kılmaktadır.

Bu çalışmada, iki boyutlu destek malzeme olarak Bor katkılı Grafen yapılar üzerinde durulmuştur. Farklı oranlarda Bor içeren Karbon tabanlı yapılar üzerinde sürdürülen teorik çalışmalar, iki boyutlu yapıya sahip kararlı yapıların olabileceğini göstermektedir.

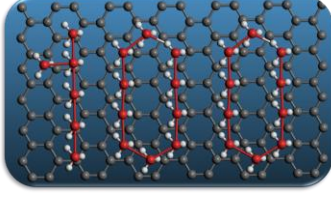
Nb ve B tabakalarının dönüşümlü olarak üst üste eklenmesi şeklinde bir yapıya sahip NbB_2 bileşiğinin Bor ile sonlanan (0001) yüzeyinde, bazı Bor atomlarının Karbon atomu ile değiştirilmesi sonucu BC_3 yüzeyi deneysel olarak sentezlenmiştir. Bu nedenle, kararlı bir yapıya sahip olan BC_3 yüzeyi bu çalışmada destek malzeme olarak tercih edilmiştir. Simülasyonlar için CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) paket programı kullanılmıştır. İki Bor ve altı Karbon atomundan oluşan yapının

optimize edilmesi sonucu elde edilen birim hücresi Şekil 1.'de gösterilmektedir. Örgü parametreleri $a=b= 5,165$ Å ve $\gamma=120^\circ$ olarak elde edilmiştir. C-C bağ uzunlukları $1,42$ Å, B-C bağ uzunlukları ise $1,56$ Å olup literatür değerleri ile uyumludur.



Şekil 1. BC_3 yüzeyi için birim hücre

Geçiş metali atomlarının üzerine tutunacağı yapı olarak 2×2 büyüklüğünde süper hücre seçilmiş ve düzlemler arası etkileşmeyi en aza indirmek için hücre yüksekliği $h=20$ Å olarak belirlenmiştir. Simülasyonda genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) çerçevesinde Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) fonksiyoneli ile birlikte Van der Waals etkileşimleri için D2 düzeltmesi kullanılmıştır. Yakınsama testleri sonucu hesaplamalarda kullanılacak uygun kesilim enerjisi değeri $E_{cut-off}=500$ eV, k-point seti olarak da $8 \times 8 \times 1$ değeri uygun görülmüştür. Yakınsama



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

kriterleri enerji için $2 \cdot 10^{-5}$ eV, kuvvet için $0,02$ eV/Å olarak belirlenmiştir. Ti atomunun yüzeydeki farklı noktalara bağlanma enerjileri araştırılarak tutunabileceği tercihli bölgenin Karbon halkanın merkezi olduğu belirlenmiştir. Ti atomu için bağlanma enerjisi (E_{ads})

$$E_{ads} = (E_{BC3} + E_{Ti}) - E_{BC3+Ti}$$

kullanılarak hesaplanmış ve $E_{ads} = 5,33$ eV olarak elde edilmiştir. Bağlanma enerjisinin Ti atomunun bulk kohesif enerjisi olan $E_{coh} = 4,85$ eV değerinden büyük

olması nedeniyle uygun katalizör adayı olabileceği değerlendirilmektedir.

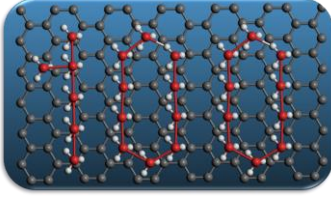
Hidrojen molekülü ayrışma tepkimesinin gerçekleşeceği Ti atomu yakınına konumlandırılarak elde edilen yapı optimize edilmiştir. Optimizasyon işlemi sonucunda H_2 molekülünün Ti atomuna mesafesi $2,14$ Å, bağlanma enerjisi ise

$$E_{ads H_2} = (E_{BC3+Ti} - E_{H_2}) - E_{BC3+Ti+H_2}$$

kullanılarak $E_{ads} = 0,45$ eV olarak belirlenmiştir.

Kaynaklar

1. A. Ueno, T. Fujita, M. Matsue, H. Yanagisawa, C. Oshima, F. Patthey, H. C. Ploigt, W. D. Schneider, S. Otani, "Scanning tunneling microscopy study on a BC₃ covered NbB₂(0001) surface", Surface Science 600, 3518–3521 (2006)
2. Hua-Bing Shu, Ji-Yuan Guo, "Structural, electronic, and optical properties of C₃B and C₃B_{0.5}N_{0.5} monolayers: A many-body study", Physica E 138, 115119 (2022)
3. Leibo Hu, Xianru Hu, Xuebin Wu, Chenlei Du, Yunchuan Dai, Jianbo Deng, "Density functional calculation of transition metal adatom adsorption on graphene", Physica B: Condensed Matter 405 (16), 3337-3341 (2010)



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

P-Tip Bi₂Te₃ Yarıiletkenlerin 291-373K Sıcaklık Aralığındaki Termoelektrik Parametrelerinin Araştırılması

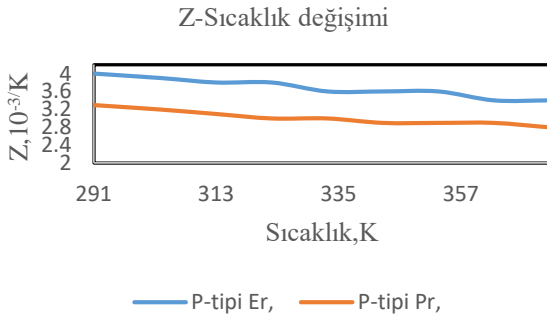
Ayfer Aydoğan

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

Özet. Günümüzde uzay teknolojileri, beyaz eşyalar, savunma sistemleri gibi birçok alanda kullanılan termoelektrik yarıiletkenlerin parametrelerinin araştırılması büyük önem göstermektedir. Bu araştırmalar sonucu elde edilen bilgiler diğer teknolojik verilere göre daha hızlı ve düşük maliyetli olması nedeniyle çalışmalar yoğunlaştırılmıştır. Buradan yola çıkarak P-tip Bi₂Te₃ yarıiletkenlerin 291-373K sıcaklık aralığındaki termoelektrik parametreleri incelenmiştir. Bu çalışmada iki farklı yöntemle elde edilmiş P tipi iki çeşit yarıiletkenin termoemk, elektrik iletkenliği, ısı iletkenliği, Z parametresinin yüksek sıcaklıklardaki davranışları araştırılmış ve teorik bulgularla kıyaslanmıştır. Ayrıca, elektrik iletkenliğinin sıcaklığa göre değişimini kullanarak yarıiletkenlerin enerji bantlarındaki yasak aralığı ayrı ayrı hesaplanmış ve teori ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen deneysel sonuçlar hata sınırları içinde literatürdeki teorik bilgilerle aynı olduğu tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: P-tip Bi₂Te₃ yarıiletkenlerin, termoelektrik parametreler

Bölge eritme ve presleme yöntemi ile elde edilen iki farklı numune oda sıcaklığından(18°C) 100°C'lik ortam sıcaklığına kadar her 10°C'de bir 10 kere ölçülerek ortalama değerleri alınmıştır. Numunelerin, elektrik iletkenliği, ısı iletkenliği, termoemk ve Z parametreleri hesaplanmıştır.



Şekil 1. Z-Sıcaklık Değişimi

Elde edilen sonuçları yarıiletkenlerin tipine göre değerlendirildiğinde P tipi eritilmiş yarıiletkenlerin P tipi preslenmiş yarıiletkenlere göre σ 'sı daha küçük α ve Z değerleri ise daha büyük olduğu saptanmıştır.

Kaynaklar

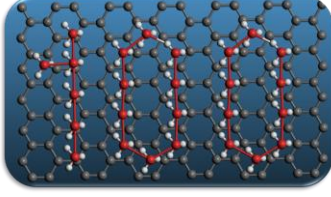
1. Ahiska R and et. 'Thermoelectric Characterization Of N-Type (Bi₂Te₃)Se₃ Semiconductors In A Temperature Range 11-373 K', G.U. Journal of Science 18(3):481-487 (2005)
2. Harman T. C., "Special Techniques for Measurement of Thermoelectric Properties", J.Appl. Phys.13: 440 (1962)
3. Ioffe A.F. "Poluprovodnikovie Termoelementi", edited by P.V.Gultaiev, Pres. Akademia Nauk SSSR, Moscow, (1960)

Yarıiletkenin termoelektrik kalitesini karakterize eden Z'nin 18°C -100°C sıcaklık aralığında P tipi eritilmiş yarıiletkenlerde %40 ile %20 civarında azaldığını, P preslenmiş yarıiletkenlerde ise %15 azaldığı tespit edilmiştir.

Tablo 1. Z-Sıcaklık Değişimi

Sıcaklık, K	P-tipi Er	P-tipi Pr
291	4	3,3
333	3,6	3
343	3,6	2,9
353	3,6	2,9
373	3,4	2,8

Makalede gerçekleştirilen çalışmanın hem teorik hem de deneysel sonuçları katihâl fiziği ve özellikle yarıiletkenlerin termoelektrik özelliklerinin araştırılması açısından büyük önem taşımaktadır. Geliştirilen $\alpha - \sigma$ ölçüm sistemi gerekirse her türlü yarıiletkenin hem yüksek hem de düşük sıcaklıklardaki parametrelerinin ölçülmesinde kullanılabileceği görülmüştür.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

MgO İnce Filmlerin Optik, Yapısal ve Morfolojik Özelliklerinin İncelenmesi

Başak Çağlayan Toprak^{1,2}, Halil İbrahim Efkeri², Adem Tataroğlu^{2,4}, Saime Şebnem Aydın^{2,3},
Süleyman Özçelik^{2,3}

¹Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fotonik Bilimi ve Mühendisliği Ana Bilim Dalı, Ankara, 06500

²Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Ankara, 06500

³Gazi Üniversitesi, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Fotonik Bölümü, Ankara, 06500

⁴Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet. MgO geniş bant aralığına sahip olan iyi bilinen oksit bir malzemedir. MgO tabakası düşük elektron ilgisi, optik şeffaflık, iyi ısı direnci, mekanik dayanıklılık ve verimli termal iletkenlerdir. Diyot ve dielektrik malzemelerde aktif katman olarak kullanılan MgO ince filmlerin optoelektronik özelliklerinin belirlenmesi önemlidir. Bu çalışmada, magnetron püskürtme tekniği ile farklı alttaşlar üzerine geliştirilen MgO ince filmin kristal yapısı, optik ve morfolojik özellikleri incelendi.

Anahtar Kelimeler: İnce film, MgO, Optik özellikler, magnetron püskürtme sistemi

Magnezyum oksit (MgO); doğada bulunan minerallerin toz haline gelmesiyle oluşan, yüksek sertliğe, yüksek erime noktasına ve düşük elektrik iletkenliğine sahip kübik kristal yapıdaki malzemedir.

MgO, yüksek çalışma sıcaklıklarına karşı dayanıklı bir malzeme olmasıyla beraber çevre dostu ve sürdürülebilir özelliklerinden dolayı ince film teknolojisinde önemli yere sahiptir [1].

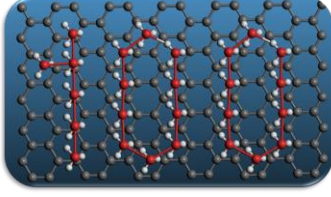
Bu çalışmada MgO ince film RF magnetron püskürtme sistemi ile n-Si ve cam alttaş üzerine, 5 mTorr çalışma basıncında 100 nm kalınlıkta oda sıcaklığında kaplandı. Üretilen MgO ince filmin yapısal, optik ve morfolojik özellikleri X-ışını kırınımı (XRD), UV-Vis Spektrometre ve Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) sistemleri kullanılarak incelendi.

Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ölçümlerinden MgO ince film yüzey morfolojisi incelendi. İnce filmlerin yüzey pürüzlülüğünün kök ortalama kare (RMS) değerleri 0.51 nm olduğu bulundu. MgO ince filmin XRD deseni incelendiğinde 36.29°'de (111) ve 43.55°'de (200) kırınım pikleri gözlemlendi ve bu piklerin kübik kristal yapıya sahip olduğu belirlendi. Literatürde ise bu kırınım pikleri 37.40° ve 43.55°'de görüldü [2]. UV-Vis ölçümünden elde edilen optik geçirgenlik spektrumundan faydalanılarak Tauc eğrisi elde edildi ve buradan ince filmin enerji bant aralığı yaklaşık olarak 4.08 eV olarak bulundu. Literatürde MgO ince film yapısının enerji bant aralığı yaklaşık olarak 4.07-4.14 eV aralığında olduğu rapor edilmiştir. Elde edilen sonuçların literatür ile uyumlu olduğu değerlendirildi [2].

Teşekkür: Bu çalışma 2019K12-149045 nolu proje ile Türkiye Cumhuriyeti Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

Kaynaklar

1. A.M.E. Raj, M. Jayachandran, C. Sanjeeviraja, "Fabrication Techniques and Material Properties of Dielectric MgO Thin Films", CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology, 2(2), 92-113 (2010).
2. F. Şenaslan, A. Çelik, M. Taşdemir, "Production of high-transparent MgO films by radio-frequency sputtering method" Gümüşhane Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 12(1), 320-326 (2022).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Termoelektrik Buz Makinesinin Özellikleri

Büşra SAYIN

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

Özet. Çevre kirliliği, temiz içme suyunun ve enerjinin yetersizliği günümüzün en önemli sorunlardır. Artan nüfus ile beraber enerji ve temiz içme suyu ihtiyacı da artmıştır. Bunun yanında artan endüstrileşme sonucu meydana gelen atıklarla çevre kirliliği de artmaktadır. Isıtma, soğutma ve enerji üretme alanlarına çözüm getirecek teknolojilerden biri termoelektrik (TE) teknolojisidir. Ayrıca çevre kirliliğine yol açmaması termoelektrik teknolojileri öne çıkarmaktadır. Termoelektrik soğutma sanayisini oluşturan buz makinelerinin parametrelerinin iyileştirilmesi konusundaki çalışmalar her geçen gün artmaktadır. Bu tip araştırmalar için buz makinelerinin özelliklerinin incelenmesi gerekmektedir. Bunun için elektrik ve su tasarruflu, çevre dostu ve ısı borulu termoelektrik buz makinesinin (TEBM) deneysel olarak bütün parametreleri incelenmiştir. Patentli olan bu buluş sadece çevre, enerji ve su sorunlarını çözmüştür. Aynı zamanda insanoğlunun buz tüketimi ve üretimi konusunda yeni bir kavram ve çözüm önerisi getirmiştir.

Anahtar Kelimeler: yeni buz makinesi, termoelektrik modül, TEPAS



Bu çalışmada dünyada ilk kez TES Termoelektrik Ltd. Şirketinde üretilen Türk patentli termoelektrik buz makinesinin parametrelerini iyileştirmek amacıyla araştırmalar yapılmıştır. Bunun için elektrik ve su tasarruflu, çevre dostu, ısı borulu termoelektrik buz makinesinin (TEBM) deneysel olarak bütün parametreleri ileri teknoloji ve inovatif ürün olan TEPAS (Termoelektrik Performans Analiz Sistemi) ile incelenmiştir.

Teşekkür

Bu çalışma Gazi Üniversitesi BAP projesi kapsamında desteklenmiştir.

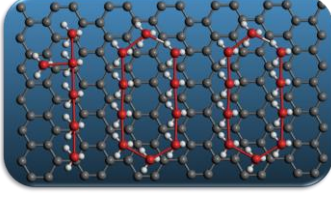
Proje No: FYL/2023-8540

Kaynaklar

1.R. Ahıska, Patent No: TR 2014-14588, (2014).

2.S. Dislitas, Bilgisayar Kontrollü Termoelektrik Performans Analiz Sistemi, Doktora Tezi, Ankara, 2009

3.Yavuz H., Omer G., Heat Pipe Thermoelectric Ice Machine Design: For Water and Energy Saving, Emerging Materials Research 2022;35 (4);3-15



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

AlPd Alaşımının Termodinamik Özellikleri

İrem Öner ALP¹, Yasemin Öztekin CİFTÇİ¹, Can AKKUŞ, Gülçin ÇORBACI

¹ Fizik Bölümü, Gazi Üniversitesi, Ankara 06500, Türkiye

Özet. AlPd alaşımları yarı iletken cihazlarda (organik ışık yayan diyotlar gibi) elektron verici yüzey malzemeleri olarak kullanılmaktadır. Böylece, ek bir ara refrakter-metalik katman gereksinimi, fabrikasyonda uygun bir yol sağlayan bu yöntemle ortadan kaldırılmıştır. Ayrıca, son yıllarda nanoteknolojinin hızla gelişmesi, çekirdek-kabuk nanoparçacıklara dayalı gelişmiş nanomalzemelerin sentezlenmesine yol açmıştır. Bimetalik Al-Pd söz konusu gruba aittir ve başta savunma sanayi olmak üzere birçok uygulama için umut verici bir adaydır.

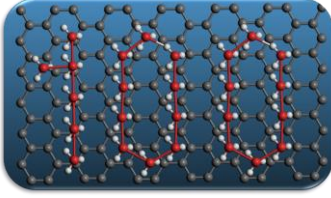
Bu makalede, AlPd'nin termodinamik özellikleri, Perdew, Burke ve Ernzerhof'un (GGA-PBE) geliştirilmiş gradyan yaklaşımı (Perdew vd., 1996) dahilinde Viyana Ab-initio Simülasyon Paketi (VASP) (Kresse ve Furthmüller, 1996) kullanılarak kristal, elektronik ve fonon karakterinin yanı sıra yoğunluk fonksiyonel teorisi ile sistematik olarak incelenmiştir. Örgü sabiti CsCl (B2) tipi AlPd bileşiği için $a=3.08 \text{ \AA}$ olarak bulunmuş ve hesaplanan AlPd kütle modülü (B) ve kütle modülünün birinci türevi (B') ile birlikte Tablo 1'de verilmiştir. AlPd'nin birim hücresi Şekil 1'de sunulmuştur. Buna ek olarak, elektronik analiz malzemenin metalikliğini ortaya koymaktadır.

Anahtar Kelimeler: Termodinamik, Alaşım, DFT

- Bu çalışma, bileşiğin diğer fiziksel özelliklerinin yanı sıra AlPd'nin termodinamik özelliklerinin basınç ve sıcaklıkla değişimine odaklanmaktadır.
- AlPd çekirdek-kabuk nanopartikülleri mikro-birleştirme ve mikro-kaynak teknolojilerinin geliştirilmesinde dikkat çekmektedir. [Hemeryck et al. 2010; Picard et al. 2008; Olia et al. 2012; Yang et al. 2012; Levchenko et al. 2010; Fiedler et al. 2012; Gillner et al. 2006; Howell et al. 2011 (within Wen et al.,2014)]
 - Ho ve arkadaşları, Pd ve Pt grubundan en az bir soy metal ile alaşımlandırılmış alüminyumdan elde edilen kontaklar hakkında bir buluş olan ve kontakın en az bir bölgesinin silikon ile daha fazla alaşımlandırıldığı 'Metal / silikon kontak ve bunların üretim yöntemleri' başlıklı bir ABD Patenti aldı.
 - Bu çalışmanın amacı, AlPd'nin teknolojik uygulamalarda kullanımına teorik katkı sağlamaktır.

HESAPLAMA METODU

- Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) [1, 2] temel durum özellikleri için ilk prensip hesaplamalarına başarıyla uygulanmıştır.
- Bu koşulları göz önünde bulundurarak, değişim-korelasyon fonksiyonu için GGA-PBE (Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı/Perdew-Burke-Ernzerhof) [3] yöntemini uyguladık.
- Hesaplamaların tüm özellikleri Vienna Ab-initio Simülasyon Paketi (VASP) kullanılarak incelenmiştir [4-7].
- Brillouin bölgesinde 600 eV cut-off enerjisine sahip düzlem dalgalar ve $15 \times 15 \times 15$ Monkhorst ve Pack [8] k-noktaları kullanılmıştır.
- Elastik özellikler stress-strain yöntemi ile tahmin edilmiştir [9].
- Fonon frekansları $2 \times 2 \times 2$ süper hücre için PHONOPY kodu kullanılarak hesaplanmıştır [10].



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023

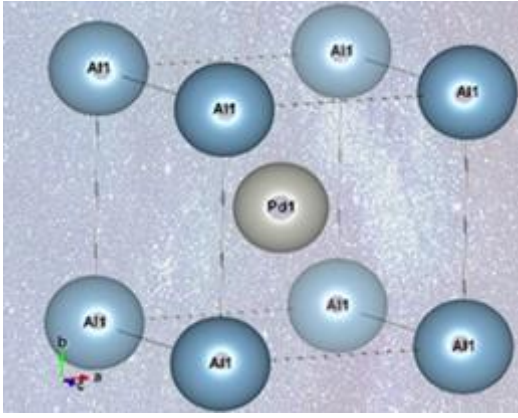


MİLLİ MÜCADELE'NİN YÜZÜNCÜ YILI

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Tablo 1. Hesaplanan örgü parametresi (a_0), hacim (V_0), kütle modülü (B_0) ve kütle modülünün basınç türevi (B_0') ve AlPd için minimum optimizasyon enerjisi.

Referanslar	a_0 (Å)	V_0 (Å ³)	B_0 (GPa)	B_0'	E_0 (eV)
Mevcut Çalışma	3.08	29.23	151.72	4.71	-10.66
Deneysel [11] Teorik [12]	3.036 3.053	---	---	---	---



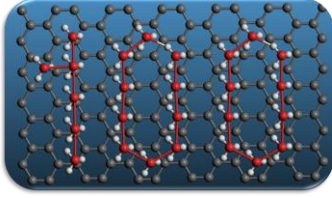
Şekil 1. AlPd'nin birim hücresi

Kısaca sonuçlar.

AlPd kübik kristal yapıya sahiptir [CsCl (B2), s.g.n: 221]. AlPd, bant yapısı nedeniyle metalik bir karakter sergiler. Hesaplanan elastik sabitler Born-Huang kriterlerini sağlar ve mekanik kararlılığı gösterir. $C_{11}-C_{12}>0$; $C_{11}+2C_{12}>0$; $C_{44}>0$ Çizilen fonon dağılım eğrileri, AlPd bileşiğinin dinamik olarak kararlı olduğunu ortaya koymaktadır. AlPd'nin termodinamik parametreleri farklı sıcaklık ve basınç değerlerinde hesaplanmış ve sunulmuştur.

Kaynaklar

- [1] P. Hohenberg, W. Khon, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- [2] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B 46, 6671 (1992).
- [3] W. Khon, L.J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
- [4] G. Kresse and J. Hafner. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B 47, 558 (1993).
- [5] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 49, 14251 (1994).
- [6] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mat. Sci. 6, 15 (1996).
- [7] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys.Rev. B 54, 11169 (1996).
- [8] H.J. Monkhorst and J.D. Pack, Phys.Rev. B 13, 5188 (1976).
- [9] L. Page and P. Saxe Phys. Rev. B 65 104104 (2002).
- [10] Atsushi Togo and Isao Tanaka, Scr. Mater., 108, 1-5 (2015)
- [11] Pavlyuchkov, D., Grushko, B., and Velikanova T. Y. , Journal of Alloys and Compounds, 469(1-2), 146 (2009).
- [12] Nguyen, N. H., Hu, A., Persic, J., and Wen, J. Z., Chemical Physics Letters, 503(1-3), 112 (2011).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

A Comparative Study on Some Electrical Parameters of Au/PVA/*n*-Si and Au/CdTe:PVA/*n*-Si Schottky Photodiodes in Dark and Under Illumination

Çiğdem Şükriye Güçlü

Gazi University, Faculty of Sciences, Department of Physics, Ankara, 06500, TÜRKİYE

e-mail: cigdemguclu@gazi.edu.tr

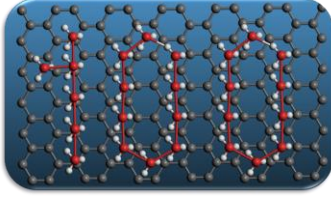
ABSTRACT

In this study, both the Au/PVA/*n*-Si and Au/CdTe:PVA/*n*-Si (MPS) type Schottky photodiodes were fabricated by utilized spin-coating technique. Some basic electrical parameters of these structures were obtained from the current-voltage (I-V) measurement and compared each other both in dark and under 100 mW.cm⁻² illumination at room temperature. The basic parameters of the them such as reverse saturation current (I_0), zero bias barrier height (Φ_{B0}), ideality factor (n), series resistance (R_s), shunt resistance (R_{sh}), rectification rate ($RR=I_{forward}/I_{reverse}$ at $\pm 4.5V$), were obtained I-V data based on Thermionic Emission (TE) theory. In addition, the energy dependent (N_{ss}) vs (E_c-E_{ss}) profile and voltage dependent resistance R_i vs V profile were extracted from the I-V data by using Card-Rhoderick and Ohm's law method. All these experimental results were found strong function of illumination and voltage. However, the Au/CdTe:PVA/*n*-Si (MPS) photodiode show a good performance and photosensitivity when compared the Au/PVA/*n*-Si photodiode.

Keywords: Metal/semiconductor (MS) photo diodes with PVA and (CdTe:PVA) interlayer; Photosensitivity or photo response; Electrical characteristics; Energy dependent of interface traps and voltage dependent resistance

Acknowledgments

This present study was supported by the Scientific-Technological Research Council of (TUBITAK) with 121C396 project-number.



MOCVD Tekniği ile Büyütülen AlInN/GaN/AlN Hemt Yapısının Yapısal ve Morfolojik Özellikleri

E. Hekin¹, M. K. Öztürk^{1,3}, S. Özçelik^{3,4} Y. Özen^{1,3}

¹Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Ankara, Türkiye

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

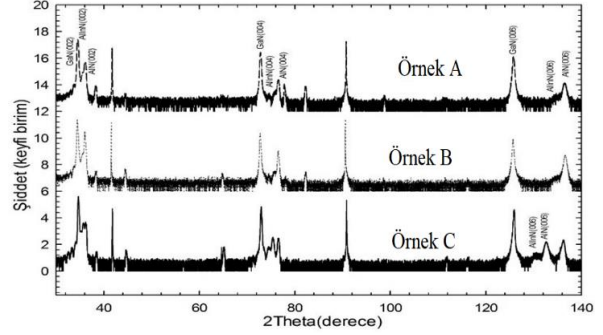
³Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Ankara, Türkiye

⁴Gazi Üniversitesi, Uygulama Bilimler Fakültesi, Fotonik Bilimi ve Mühendisliği, Ankara, Türkiye

Bu çalışmada, farklı In oranında AlInN/GaN/AlN/Al₂O₃ HEMT yapıları Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme (MOCVD) tekniği ile büyütülmüştür. Bu yapıların yapısal (yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı (HRXRD)) ve morfolojik özellikleri (atomik kuvvet mikroskobu (AFM)) incelenmiştir. Yapılan analizler sonucunda, iyi kristal kalitesine ve homojen bir yüzeye sahip HEMT yapıların üretildiği belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: GaN, AlInN, AlN, Safir, HEMT.

MOCVD tekniği ile büyütülen üç adet AlInN/GaN/AlN/Al₂O₃ HEMT yapıları, HR-XRD tekniği ile incelendi. Hesaplamalarda roking eğrilerinden elde edilen pik pozisyonları ve pik genişlemeleri kullanıldı. Yapısal kalite simetrik ve asimetrik pik düzlemlerinden faydalanılarak belirlendi. Tedirgin edici dislokasyonlar (TDs), eğim ve burkulma açıları, yanal ve dikey kristal uzunlukları gibi mozaik kusurlar Williamson Hall (WH) metodu kullanılarak saptandı. Bunlara ilave olarak, yüzey morfolojisi AFM yöntemiyle belirlendi.



Şekil 1. A, B ve C numunelerin (002), (004), (006) düzlemlerinin Bragg yansımaları ve simülasyon eğrileri.

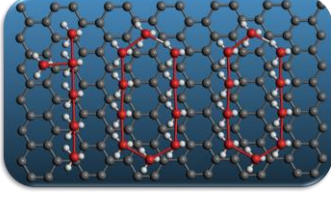
Tablo 1. A, B ve C numunelerin şematik yapısı

	Örnek A	Örnek B	Örnek C
GaN Kapak Tabaka	~4 nm	~2 nm	~4 nm
AlInN Ara Tabaka	14 nm	~8 nm	~14 nm
AlN Ara Tabaka	~1 nm	~1 nm	~1 nm
Ud-GaN Tabaka (5)	~90 nm	~90 nm	~90 nm
Ud-GaN Tabaka (4)	~180 nm	~180 nm	~180 nm
Ud-GaN Tabaka (3)	~90 nm	~90 nm	~90 nm
Ud-GaN Tabaka (2)	~600 nm	~600 nm	~600 nm
Ud-GaN Tabaka (1)	~200 nm	~200 nm	~200 nm
HT- AlN Tampon Tabaka	~320 nm	~320 nm	~320 nm
AlN Çekirdek Tabaka	~15-20 nm	~15-20 nm	~15-20 nm
Safir (Altaş)	330 µm	330 µm	330 µm

Bilgi: Bu çalışma, 2019K12-149045 proje numaralı Strateji ve Bütçe Başkanlığı (Türkiye) tarafından desteklenmiştir.

Kaynaklar

1. Williamson, G. K., Hall, W. H. (1953). X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. Acta metallurgica, 1(1), 22-31.
2. Yu, H., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E. (2006). A study of semi-insulating GaN grown on AlN buffer/sapphire substrate by metalorganic chemical vapor deposition. Journal of Crystal Growth, 293(2), 273-277.
3. Keleşçi, O., Taşlı, P., Çetin, S.Ş., Kasap, M., Özçelik, S., Özbay, E. "Investigation of AlInN HEMT structures with different AlGaIn buffer layers grown on sapphire substrates by MOCVD", Current Applied Physics, 12, 1600-1605, (2012).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

B2 Yapıdaki YCd intermetalik Bileşiğin Fiziksel Özelliklere Basıncın Etkisi

Fadime Demir, İlknur Kars Durukan, Yasemin Öztekin Çiftçi

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

Özet. Yüksek çekme mukavemetine, iyi süneklığe ve yüksek korozyon direncine sahip olan intermetalik bileşikler önemli mekanik özellikler gösterir. Son zamanlarda CsCl tipi (B2) yapıya sahip olan intermetalik bileşikler, yüksek oksidasyon direnci, yüksek sertlik ve yüksek mukavemet özelliklerinden dolayı yüksek sıcaklıktaki endüstriyel uygulamalar için oldukça ilgi çekici malzemelerdir. YCd, CsCl tipi (B2) bir yapıya sahiptir. Bu çalışmada yoğunluk fonksiyonel teorisine bağlı olarak ilk prensip hesaplamalarını kullanarak B2 yapısındaki YCd'nin basınç altındaki yapısal, elastik, anizotropi, elektronik özelliklerini elde ettik. Değişim-korelasyon potansiyelleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) dahilinde alınmıştır. YCd'nin elastik sabitleri stress-strain yöntemi kullanılarak elde edilir. Yapısal özelliklerinden örgü sabiti, bulk modülü, hacim, yoğunluk parametreleri elde edildi. Elastik parametrelerden young modülü, bulk modülü, shear modülü, G/B oranı, Cauchy basıncı ve poisson oranı belirlendi. ELATE programıyla bileşiğin mekanik özellikleri ayrıntılı olarak analiz edildi. Ayrıca elektronik bant yapıları, durum yoğunluğu, yük yoğunluğu dağılım haritaları da incelenmiştir. Elde edilen sonuçlar mevcut verilerle iyi bir uyum içerisindedir.

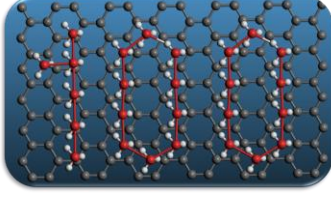
Anahtar Kelimeler: Elastik özellikler, anizotropi, elektronik özellikler

Hesaplama metodu. Çalışmada sunulan hesaplamalar CASTEP kodu kullanılarak DFT yaklaşımı ile gerçekleştirildi [1]. Yapısal gevşeme ve elektronik hesaplamaları gerçekleştirmek için PBE fonksiyoneli ile genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanıldı [2]. İyonik çekirdekler ve değerlik elektronları arasındaki etkileşim ultrasoft pseudopotansiyel kullanılarak gerçekleştirildi [3]. Brillouin bölgesinin örneklenmesi için 10x10x10 k noktalı Monkhorst Pack [4] ağı kullanılmış ve düzlem dalga kesme enerjisi 350 eV olarak seçilmiştir.

Kısaca sonuçlar. Elastik parametrelerle kübik B2 yapıdaki bileşiğin mekanik olarak kararlı olduğu belirlendi. Ayrıca Bulk, Shear ve Young modüllerinden bileşiğin yumuşak karakterde olduğu değerlendirildi. Son olarak Poisson oranına göre ise bileşik sünek karakterlidir. Bant yapısı ve durum yoğunluğu gibi elektronik özellikler, Fermi seviyesine yakın örtüşme nedeniyle YCd'nin metalik olduğunu göstermektedir.

Kaynaklar

1. S. J. C. and M. C. P. M D Segall, Philip J D Lindan, M J Probert, C J Pickard, P J Hasnip, "First-principles simulation : ideas , illustrations and the CASTEP code," J. Phys.: Condens. Matter, vol. 14, 2717–2744 (2002).
2. J. P. Perdew and Y. Wang, "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy," Physica Review B, vol. 45, no. 23, 244–249 (1992).
3. V. B. Oliveira et al., "Hydrogen absorption/desorption behavior of a cold-rolled tife intermetallic compound," Materials Research, vol. 24, no. 6, 232–242 (2021).
4. Hendrik J. Monkhorst and James D. Pack, "Special points for Brillouin-zone integrations," Physical Review B, vol. 13, no. 12, 5188 (1976).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



MİLLİ MÜCADELE'NİN YÜZÜNCÜ YILI

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Süperiletken CoZr₂ için Termodinamik Özelliklerin Teorik Olarak İncelenmesi

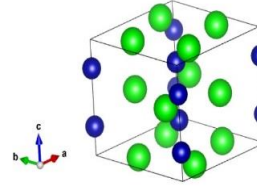
Yasemin Ö. ÇİFTÇİ, Gülçin ÇORBACI, İrem Almina GEMİCİ, Fatma Kübra ÖZTEKİN

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

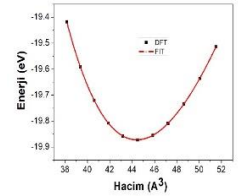
Özet Tetragonal CuAl₂ yapıda kristalleşen CoZr₂ bileşiği T_c= 4.3K geçiş sıcaklığına sahip olan süperiletken bir malzemedir. Malzemelerin yapı-özellik korelasyonlarının araştırılması, söz konusu malzeme ailesinin temel yönlerinin anlaşılmasına yardımcı olmaktadır. Sonuç olarak, süperiletkenlik mekanizmasını daha iyi anlamak için CoZr₂ süperiletken malzemesinin yapısal, mekanik, elektronik, ve termodinamik yönlerini analiz etmek için ilk- prensip hesaplamaları yapılmıştır. İlk olarak hesapladığımız örgü parametresi daha önceki verilerle uyum göstermektedir. Ayrıca, mekanik parametreler, bulk modülü, kayma modülü, Young modülü, Poisson oranı, anizotropi faktörü elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlara göre anizotrop ve kırılğan bir malzemedir. Elektronik band yapısı CoZr₂ nin metalik özelliğini göstermektedir. CoZr₂ ile ilgili bazı makroskopik özellikleri üzerindeki termal etkiler yarı-harmonik Debye modeli kullanılarak 0-1000K ve 0-20 GPa hidrostatik basınç aralığında tahmin edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: YFT, Süperiletken, Mekanik Özellikler, Elektronik Özellikler, Termodinamik Özellikler

Mükemmel termal dayanım direnci ve termal korozyon direncine sahip Co bazlı süper alaşımlar, havacılık jet motorları, endüstriyel gaz türbinleri, deniz gaz türbinleri için kılavuz kanatlar ve otomatik super şarj nozul halka kanatları alanlarında geniş uygulama olanaklarına sahiptir. Negatif termal genleşme veya sıfır termal genleşme sergileyen malzemeler, hassas aletler de dahil olmak üzere çeşitli uygulamalarda kullanılabilirler için çok çeşitli malzemeler için geliştirilmiştir[1-5]. Süperiletkenlerin negatif termal genleşme katsayısının (NTE) çoğu durumunda, nedeni süperiletken düzen parametresinin ortaya çıkmasıyla bağlantılıdır; bu nedenle, NTE tipik olarak geçiş sıcaklığının (T_c) altında gözlenir [3]. Deneysel olarak, CoZr₂, a eksenini boyunca sürekli pozitif termal genleşme (PTE) ve c eksenini boyunca NTE sergilemiştir. Zıt genleşmelerin bir sonucu olarak, örgü hacmi sıcaklıktaki bir düşüşle kayda değer bir şekilde azalmamıştır[6]. Bu yüzden tetragonal CuAl₂ yapıda (Şekil-1) CoZr₂ süperiletken malzemesinin termodinamik özelliklerinin ortaya çıkarılması önemlidir. Termodinamik özellikleri ile ilgili herhangi bir teoriksel çalışma mevcut değildir. Bu çalışmada, CoZr₂ bileşiği için Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi kullanarak yapısal, mekanik, elektronik ve termodinamik özellikleri incelenmiştir.



Şekil 1. CoZr₂ 'nin Birim Hücresi

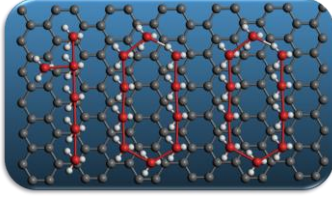


Şekil 2. CoZr₂ için Enerji-hacim eğrisi

Enerji- hacim eğrisi (Şekil-2) yardımı ile elde edilen yapısal parametreler ve elastik sabitleri literatürdeki deney ve teori sonuçları ile uyumludur. Hesaplanan elastik sabitleri değeri bu malzemenin mekanik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Elektronik band yapısı metalik özellik gösterdiğini doğrulamaktadır. Ayrıca yarı-harmonik Debye metoduna göre CoZr₂'nin farklı sıcaklık ve basınçla hacim, bulk modülü, termal genleşme ve ısı kapasitesi gibi termodinamik nicelikler incelenmiştir.

Kaynaklar

1. K. Takenaka, Sci. Technol. Adv. Mater. 13, 013001 (2012).
2. G. D. Barrera, J. A. O. Bruno, T. H. K. Barron, and N. L. Allan, J. Phys.: Condens. Matter 17, R217 (2005).
3. J. Chen, L. Hu, J. Deng, and X. Xing, Chem. Soc. Rev. 44, 3522 (2015).
4. T. A. Mary, J. S. O. Evans, T. Vogt, and A. W. Sleight, Science 272, 90 (1996).
5. K. Takenaka, Y. Okamoto, T. Shinoda, N. Katayama, and Y. Sakai, Nat. Commun. 8, 14102 (2016).
6. Yoshikazu Mizuguchi^{1*}, Md. Riad Kasem¹, and Yoichi Ikeda, Phil. Mag., 1478 (2020) .



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



MİLLİ MÜCADELE'NİN YÜZÜNCÜ YILI

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Hidrojen depolama kapasitesi, elastik ve elektronik özellikler için CoAl üzerine Ni ve Pd katkısının etkilerinin hesaplamalı incelenmesi

Yasemin Oztekin Çiftci, Gülçin Çorbacı

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

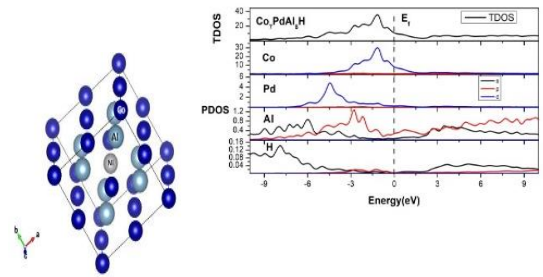
Özet. Metaller arası bileşikler, sertliği düşük yoğunluk, yüksek mukavemet, süneklik, kırılma ve gerekli dirençle birleştirme potansiyelleri nedeniyle farklı mühendislik uygulamalarında önemli uygulamalara sahiptir. Bu nedenle araştırmacılar, piller ve yeşil enerji teknolojileri gibi enerji depolama cihazlarında etkili verimliliği artırmak için yeni malzemeler araştırmışlardır. Geçiş metal-alüminit alaşımlarının araştırılması, çekici mekanik özellikleri nedeniyle artmıştır. Çoğu katı çözelti hidrojen depolama malzemesi gibi, ZrCo gibi B2 tipi hidrojen depolama alaşımları da atom aralıklarında hidrojen depolama mekanizmasını kullanır. Hidrojen atomları ara boşluklara girdiğinde, örgü bozulması nedeniyle örgü genişlemesi yapar. Basınç ve sıcaklıktaki değişimler nedeniyle hidrojen emilimi ve desorpsiyonu sırasında elastik ve plastik deformasyonlar malzemeyi etkiler. Literatüre göre, hidrojen depolama performansını artırmak için element katkısı etkilidir. Ni- ve Pd katkılı elementlerin Kobalt-Alüminyum alaşımında hidrojen depolama, elektronik ve mekanik özellikler üzerindeki etkileri ilk prensip yöntemi ile araştırılmıştır.

Anahtar Kelimeler: DFT, CoAl, element katkılama, hidrojen depolama, mekanik

Günümüz modern toplumunun enerji talebi, artan nüfusa bağlı olarak artmaktadır. Fosil yakıtların hızlı tüketimi, kaynakların hızla tükenmesine yol açacaktır. Bu endişeler sürdürülebilir, temiz, pratik ve çevresel açıdan uygun enerji kaynakları ve taşıyıcıları arayışını teşvik etmiştir. Metal veya kompleks hidritler gibi hidrojenin katı halde depolanması, hidrojenin yüksek gravimetrik ve hacimsel yoğunluklarla depolanmasını sağlar [1]. B2 intermetalik alaşımlarında hidrojen, küçük atom yarıçapı nedeniyle genellikle geçici bir alaşım elementi özelliği gösterir. İlk prensipler yöntemleri, B2 metaller arası alaşımların hidrojen depolama performansını incelemek için başarıyla kullanılabilir [2].

Tablo 1. Oluşum entalpisi de dahil olmak üzere sıfır basınç altında bileşiklerin yapısal verileri:

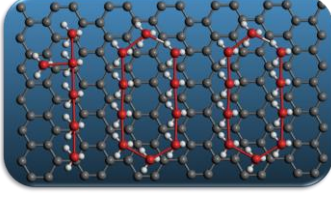
Sistem	a(Å)	b(Å)	c(Å)	$\alpha(^{\circ})$	$\beta(^{\circ})$	$\gamma(^{\circ})$	Hacimsel H kapasitesi gH ₂ /litre	H _{formal} (g/atom)	Ağırlıkça kapasite	V (Å ³)
Co ₇ NiAl ₈	5.718	5.718	5.718	90	90	90	-	-0.7056	-	189.40
Co ₇ NiAl ₈ H	5.721	5.721	5.819	90	90	90	8.776	-0.294	%0.15	190.49
Co ₇ PdAl ₈	5.770	5.770	5.770	90	90	90	-	-0.6465	-	192.18
Co ₇ PdAl ₈ H	5.510	5.510	6.595	90	90	90	8.339	-0.5557	%0.14	200.25
Co ₈ Al ₇ Ni	5.690	5.690	5.690	90	90	90	-	-0.613	-	184.23
Co ₈ Al ₇ Pd	5.748	5.748	5.748	90	90	90	-	-0.5896	-	190.0
Co ₈ Al ₈	5.706	5.706	5.706	90	90	90	-	-0.716	-	185.83
Co ₈ Al ₈ H	5.699	5.699	5.830	90	90	90	8.81	-0.665	%0.15	189.4
Co ₈ Al ₇ NiH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Co ₈ Al ₇ PdH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-



Şekil 1. CoAl alaşımı için birim hücre ve DOS

Elde edilen sonuçlar, Ni ve Pd atomlarının yeni alaşımlar oluşturmak için tercihen Co atomlarını işgal ettiğini göstermektedir.

Sonuçlar. Ni ve Pd ile ikame edilmiş katkıların bir (Co₈Al₈) alaşımındaki hidrojen depolama ve mekanik özellikler üzerindeki etkileri araştırıldı ve hidritleri



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



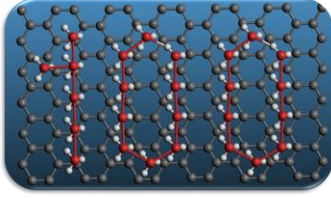
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

araştırıldı. Bunların oluşum entalpisi ile karşılaştırıldığında, Ni ya da Pd atomları tercihen $\text{Co}_8\text{Al}_7\text{Ni}$ ya da $\text{Co}_8\text{Al}_7\text{Pd}$ bileşiklerini oluşturmak için Al atomunu işgal eder. B / G oranı ve Poisson oranı, Ni ya da Pd katkısının alaşımın sünekliliğini artırabileceğini ve böylece alaşımın geri dönüşüm

performansını artırabileceğini göstermektedir. Yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen sonuçlar, hidrojen depolama malzemelerinin daha iyi tasarlanması ve optimizasyonu için etkili bir yol ve teorik kanıt sağlayabilir.

Kaynaklar

1. B. Sakintuna, F. Lamari-Darkrim, M. Hirscher, Metal hydride materials for solid hydrogen storage: A review, Int. Journal of Hydrogen Energy 32, (2007) pp. 1121.
2. L. Wang, J. Ding, X. Huang, K. Song, B. Liu, X. Zeng, Influence of Ti/Hf doping on hydrogen storage performance and mechanical properties of ZrCo compounds: A first principle study, Int. Journal of Hydrogen Energy 43, (2018) pp. 13328.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Bazı Borazin Oligomer ve Polimerlerinin Yapısal ve Elektronik Özelliklerinin B3LYP/6-311G(d,p) ile Hesaplanması

Mehmet Bahat* ve Hatice Kılınc**

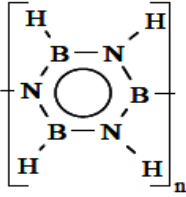
*Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

**Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet. Bu çalışmada $(\text{Borazin})_n$ ($n=1-11$) moleküllerinin yapısal, elektronik ve polarizabilite özellikleri hesaplanmıştır. Hesaplamalar B3LYP/6-311g(d,p) modeli ile yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Borazin polimeri, B3LYP/6-311++G(d,p), orbital enerjileri, polarizabilite, hiperpolarizabilite

Borazin ($\text{B}_3\text{N}_3\text{H}_6$) molekülü (şekil 1) yapısında 3 azot (N), 3 Bor (B) ve 6 Hidrojen (H) atomu bulunduran düzlemsel halka şeklinde inorganik bir bileşiktir ve ilk kez 1926 yılında A. Stock ve E. Pohland tarafından sentezlenmiştir.



Şekil 1. Borazin Molekülü

Borazin ve türevi moleküllerin yüksek sıcaklıklara dayanıklı seramik malzemeler ve fiber optik teknolojisi gibi endüstriyel alanlarda uygulamaları bulunmaktadır [1].

Bu çalışmada borazin moleküllerinin birbirlerine tekli B-N bağı ile bağlanmasıyla oluşturulan 10 adet oligomer/polimer yapı $[(\text{Borazin})_n, (n=2-11)]$ teorik olarak oluşturulmuş ve olası teknolojik kullanımlarını belirleyen yapısal ve elektronik fiziksel büyüklükleri hesaplanmıştır. Hesaplanan fiziksel büyüklükler; yapısal parametreler, elektriksel dipol moment, sınır orbitallerinin enerjileri, polarizabilite ve ilk hiperpolarizabilite değerleridir. Hesaplamalar yoğunluk fonksiyoneli teorisinin B3LYP varyantının

6-311g(d,p) temel seti ile kullanılması ile yani B3LYP/6-311g(d,p) modeli ile yapılmıştır. $(\text{Borazin})_n, (n=2-11)$ oligomerleri ve polimerlerinin B3LYP/6-311g(d,p) modeli ile hesaplanan fiziksel büyüklüklerinden sınır orbital enerjileri farkı (HOMO-LUMO, H-L), statik polarizabilite (α) ve ilk hiperpolarizabilite (β) değerleri Tablo 1'de verilmektedir.

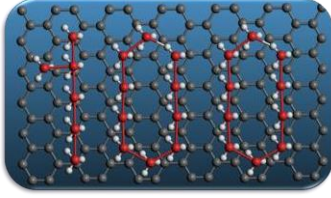
Tablo 1. Borazin moleküllerinin fiziksel büyüklükleri

n	α (au)	β (au)	H-L eV
2	113	155	6,94
3	173	581	6,51
4	235	1213	6,29
5	298	1971	6,17
6	361	2812	6,10
7	424	3718	6,05
8	488	4664	6,01
9	551	5526	6,01
10	615	6481	5,98
11	679	7450	5,96

Tablo 1' de görüldüğü gibi moleküler yapıdaki monomer sayısı arttıkça HOMO-LUMO (H-L) enerji aralığı daralmakta olup, polarizabilite ve ilk hiperpolarizabilite değerleri ise artmaktadır.

Kaynaklar

1. S. Bernard S, P. Miele, "Polymer-Derived Boron Nitride: A Review on the Chemistry, Shaping and Ceramic Conversion of Borazin", Materials 7, 7436-7459



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Antiperovskit PNSr_3 Bileşiğinin Yapısal, Elektronik, Mekanik Özelliklerinin Hesaplamalı Çalışması

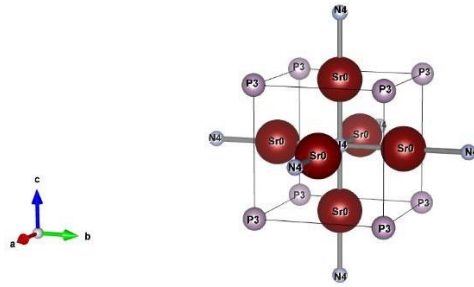
Yasemin Öztekin Çiftci¹, İrem Almina Gemici¹

¹Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

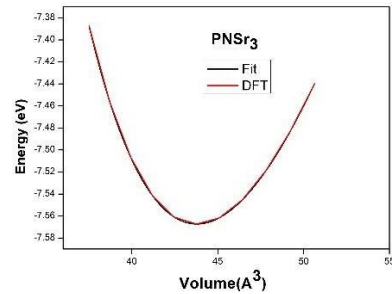
Özet. ABX_3 genel formülüne sahip üçlü kübik antiperovskit malzemeler ilginç fiziksel, kimyasal ve termodinamik özellikler sergiler. Bazı antiperovskit bileşiklerin düşük bant aralığına sahip olması, yüksek verimlilik ve iyi termoelektrik özelliklere işaret etmektedir. Dolayısıyla bu tür malzemeler, enerji depolama sistemleri, gaz algılama, manyetik bellek cihazları ve süper iletkenler dahil olmak üzere farklı uygulamalara sahiptir. Antiperovskitlerden PNSr_3 bileşiği, Pm-3m (221) uzay grubunda kübik simetri ile kristalleşir. Bu bileşik için Wyckoff pozisyonları şu şekildedir: A: 1a (0,0,0), B: 1b (0.5,0.5,0.5) ve X: 3c (0,0.5,0.5). Bu çalışmada, 0 ila 50 GPa basınç aralığında VASP program teorisini kullanarak birinci prensip yöntemleriyle antiperovskit malzeme PNSr_3 'ün özelliklerini araştırdık. Teknolojik önemi nedeniyle, PNSr_3 'ün yapısal, elektronik, elastik ve optik özelliklerini hem sıfır hem de yüksek basınç koşullarında inceledik. Hesaplanan yapısal parametrelerimiz diğer verilerle oldukça uyumludur. Elastik sabitimizden, PNSr_3 bileşiği mekanik olarak 50 GPa'ya kadar kararlıdır. Burada, PNSr_3 'ün elektromanyetik radyasyona etkilerini elde etmek için çeşitli optik parametreleri hesapladık. PNSr_3 'ün kızılötesi (IR), görünür ve ultraviyole (UV) grafiklere tepkisi, optoelektronik uygulamalar bağlamında özellikle önemlidir. Özellikle, antiperovskit bileşik PNSr_3 , UV bölgesinde maksimum yansıtma sergiler. Elde edilen optik parametreler, bu antiperovskite bileşiğin güneş pili ve optoelektronik uygulamalar için uygun olduğunu göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: DFT, PNSr_3 , Antiperovskite, Optiksel özellikler, Mekanik özellikler

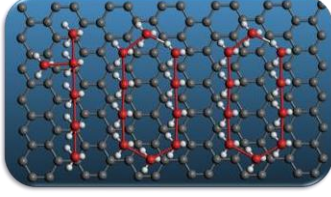
Perovskitler, küresel olarak sürdürülebilir çözümler için yaygın olarak kullanılan, yaygın olarak bol ve uygun maliyetli malzemeler olarak kabul edilmektedir. Perovskite yapıların ters muadilleri olan antiperovskitler, modern teknolojik gelişmelerdeki önemini daha da artıran bir dizi avantaj ve uygulama sunar. Bu malzemeler, A ve B'nin farklı büyüklükteki anyonları ve X'in bir katyonu temsil ettiği perovskite ABX_3 kristal yapısını korur. Çalışmada elde edilen sonuçlar Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) yöntemi kullanan Viyana Ab-initio Simülasyon Paketi (VASP) ile elde edilmiştir. Elektron-iyon etkileşimi, 750 eV enerjiye kadar düzlem dalga ile projektör-artırılmış dalga (PAW) yöntemi şeklinde ele alınmıştır. Elektron-elektron etkileşimindeki değişim ve korelasyon terimleri için, geliştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) içinde Perdew ve Zunger tipi fonksiyonel kullanılır. Brillouin bölgesinde kullanılan Monkhorst ve Pack k noktaları: $17 \times 17 \times 17$ Pseudo-atomik hesaplamalar için gerçekleştirildi: P ($3s^2 3p^3$), N ($2s^2 2p^3$), Sr ($4p^6 5s^2$). Elastik sabitleri tahmin etmek için zorlanma yönteminden yararlandık.



Şekil 1. PNSr_3 birim hücresi



Şekil 2. Enerji-Hacim Eğrisi



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



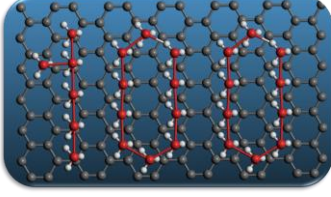
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Kısaca sonuçlar. Teknolojik önemi nedeniyle hem sıfır basınç hem de yüksek basınç dahil olmak üzere değişen basınç koşulları altında PNSr3'ün yapısal, elektronik, elastik özellikleri hakkında kapsamlı bir araştırma yaptık. Hesaplanan yapısal parametrelerimiz, diğer kaynaklardan elde edilen mevcut verilerle iyi bir uyum göstermektedir. Elastik sabitlerin analizine dayanarak, PNSr3 bileşiğinin

mekanik stabilitesinin 50 GPa'ya kadar olan basınçlarda bile bozulmadan kaldığını yani kararlılığını devam ettirdiğini doğruladık. Elektronik özelliklerden 0 basınç altına daha çalışmalara uygun olarak 0.63 eV'lik band aralığına sahip yarı iletken malzeme olduğu gösterilmiştir. Basınç uygulandıktan sonra ise PNSr3 bileşiği yarıiletken den metalik yapıya geçiş yapmıştır.

Kaynaklar

1. F. Gabbler, M. Kirchner, W. Schnelle, U. Schwarz, M. Schmitt, H. Rosner, R. Niewa, Z. Anorg. Allg. Chem. 630 (2004) 2292.
2. M. Bilal, M. Shafiq, B. Khan, H.A.R. Aliabad, S.J. Asadabadid, R. Ahmade, I. Ahmada, Phys. Lett. 375 (2014) 9601.
3. M. Moakafi, R. Khenata, A. Bouhemadou, F. Semari, A.H. Reshak, M. Rabah, Comput. Mater. Sci. 46 (2009) 1051–1057.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

İklim Felaketine Sebep Olan Karbondioksit ve Onun Grafen Tabanlı Nano Malzemeler Sayesinde Yakalanması

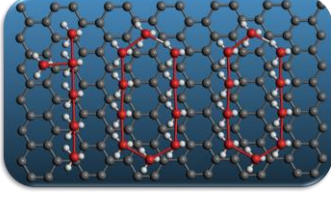
Meryem YURT, İsa BARUĞ, Doç.Dr.Hilal KÜÇÜK

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

Sanayinin gelişmesi, yanlış tarım ve hayvancılık ve insan nüfusunun hızla artması ile iklim değişiklikleri son yüzyılın en önemli sorunlarından biri haline gelmiştir. İklim değişikliklerinden dolayı, sel, kasırga, orman yangınları gibi doğal felaketlerin sayısı artmış ve artan sera gazlarının yoğunluğu nedeniyle sıcaklık son yüz yılda hiç olmadığı kadar artmıştır. İklim değişikliklerinin en önemli nedenlerinden biri sera gazlarının normal seviyesinden fazla olması sonucu atmosferin sıcaklığının sanayi devriminden bu yana $\sim 1^\circ$ artmış olmasıdır. Karbondioksit atmosferde sera etkisi gösteren gazlardan biridir ve toplam salınan sera gazlarının %77 si karbondioksittir [1-2]. Tahminlere göre her yıl yaklaşık 100.000 insan global sıcaklık değişimlerinden dolayı hayatlarını kaybediyor. Dünya sağlık örgütü(WHO)bu sayıların 2030-2050 yılları arasında artacağına ve her yıl 250 bin insanın sıcaklık artışının sebep olduğu gıda kıtlığı, sıtma, ishal ve ısı stresinden dolayı ölebileceğini bildiriyor. Birleşmiş Milletler'in iklim değişimiyle ilgili dördüncü değerlendirme raporuna göre, 2100 yılına kadar sıcaklığın ortalama 2-4,2 derece yükselmesi beklenmektedir [3]. Özellikle gelişmiş ülkelerde (Amerika, Avrupa, Çin) bireysel ve endüstriyel kullanımlardan dolayı çok fazla karbon salınımı (tüm dünyadaki karbon emisyonunun %76'sı) meydana gelmektedir. Karbon salınımını azaltabilmek için, yeşil enerji üretiminin artırılması ile birlikte bir diğer çalışma da salınan fazla karbondioksiti yakalayıp kullanılabılır (yakıt, gübre, inşaat sektörü...) malzemelere dönüştürmeye çalışmaktır. Bu yüzden çeyrek yüzyılda nanomalzemeler (bulk,yüzey,zar,metalorganik kafes)kullanarak karbondioksit yakalama araştırmaları yoğunluk kazanmıştır. Bu çalışmada yoğunluk-fonksiyonel teori(DFT)hesaplamaları yapılarak bor kümeleri ile katkılı grafen malzemeler oluşturulacaktır. Oluşturulan malzemenin karbondioksit yakalama özelliği teorik olarak incelenecektir. İlk aşamada, farklı sayıda bor kümeleri grafene katılanarak kararlı malzemeler seçilecektir. Daha sonra kararlı malzemelerin çeşitli elektronik özellikleri (adsorbeenerji, yük geçişi, manyetik değişkenlik, bağ yapısı vs.) incelenerek grafen tabanlı malzemenin karbondioksit tutuculuğu ölçülecektir. Grafen malzemesinin seçilme sebebi, grafen 2boyutlu kolayca modifiye edilebilen hafif ve doğada bolca bulunan karbon atomlarından oluşan malzemedir. Arı peteğine sahip grafen, geniş bir alana sahip olduğu için modifiye edilebilirliği sayesinde karbondioksit tutması için aktif bölgeler kolayca oluşturulabilir. Bugüne kadar modifiye edilmiş grafen üzerinde birçok karbondioksit çalışması yapılmış olsa da [5-6],hala verimi yüksek ve karbondioksiti daha aktif bir şekilde yakalayabilen katalizöre ihtiyaç vardır. Borun grafen kafesine eklenmesi malzemenin karbondioksit gazını kimyasal olarak tutması beklenmektedir [8].Yapılan araştırmanın başında olduğumuz için çalıştayda elimizdeki veriler sunulacaktır.

Kaynaklar

1. Addendum to the Emissions Gap Report 2021.
2. Köse, S., İklim değişikliğiyle mücadelede yerel yönetimlerin rolü ve yeşil yeni düzen. 2022, Marmara Üniversitesi (Turkey).
3. Altıntaş, H.,Türkiye'de birincil enerji tüketimi, karbondioksit emisyonu ve ekonomik büyüme ilişkisi: eşbütünleşme ve nedensellik analizi. Eskişehir Osmangazi Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Dergisi, 2013.8(1): p.263-294.
- 4.<https://www.weforum.org/agenda/2021/12/siberia-america-wildfires-emissions-records-2021/>

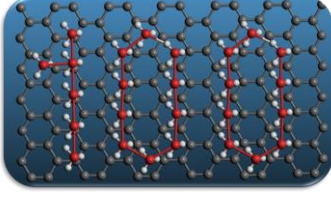


100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

5. Li, J. et. al., Enhanced CO₂ capture on graphene via N,S dual-doping. Applied Surface Science, p.420-425.
6. An, L., et. al., Novel nitrogen-doped porous carbons derived from graphene for effective CO₂ capture. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2019. 58(8): p.3349-3358.
7. https://www.etimaden.gov.tr/storage/2021/Bor_Sektor_Raporu_2020.pdf
8. J. Mater. Kimya. A, 2016, 4, 5002-5025.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Termoelektrik Kriyo İğnenin Parametrelerinin Araştırılması

Nurcan BİNGÖLER

Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet. Kriyo uygulamaları, aşırı soğukun canlıların biyolojik yapıları üzerindeki etkilerinden yararlanılarak geliştirilmiş teşhis ve tedavi yöntemleridir. Günümüzde aşırı soğukun biyolojik sistemler üzerindeki iki farklı etkisi kullanılarak tanı ve tedavi amaçlı üç farklı kriyo uygulama yöntemi geliştirilmiştir. Ortopedi, göğüs hastalıkları, dermatoloji, üroloji ve karaciğer metastaz cerrahisinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada dünyada ilk kez TES Termoelektrik Ltd. Şti. de üretilen Türk patentli (Patent No:2020-22699, PCT/TR/2021/051301) termoelektrik kriyo iğne cihazın parametrelerini iyileştirmek amacıyla araştırmalar yapılmıştır. Bunun için yeni soğutma yöntemleri ve teknolojileri kullanılarak üretilen çevre dostu, ucuz, pratik ve kullanışlı termoelektrik kriyo iğnenin tüm termoelektrik parametreleri teorik ve deneysel olarak incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Termoelektrik, kriyo iğne

Bir termoelektrik kriyo iğne kullanılarak kullanılan termoelektrik modüllerin teorik ve deneysel araştırılması yapılmıştır. Daha sonra cihazın bir bütün olarak başta termoelektrik olmak üzere bütün fiziksel parametrelerinin incelenmiştir. Buna göre ölçüm yöntemleri ve cihazları termoelektrik biliminin ve sanayisinin çok önemli konularını oluşturduğundan çözülmesi gereken iki temel problem vardır. Birincisi, hassas ölçüm yapabilmektir. Burada klasik yöntemle çalışan cihazların ölçüm hata payları %30 - %40 civarındadır. İkincisi, bu cihazlar çok pahalıdır. Türkiye’de TES Ltd. Şirketi’nde geliştirilen ve yeni yöntemle çalışan ve çok ucuz olan TEPAS gibi cihazların ölçüm hata payları %5 altında olduğundan hassas ölçüm yapılabilmektedir. TEPAS’ın çalışma prensiplerini oluşturan yeni yöntemin teorisi R. Ahıska tarafından geliştirilmiştir. Bu çalışmada teorik hesaplamalar yeni yöntemle yapılmıştır.

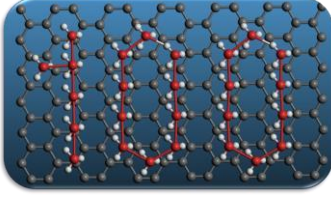


Şekil 1. Termoelektrik kriyo iğne ve test düzeneği

Sonuç. Yeni soğutma yöntemleri ve teknolojileri kullanılarak üretilen çevre dostu, ucuz, pratik ve kullanışlı termoelektrik kriyo iğnenin tüm termoelektrik parametreleri teorik ve deneysel olarak incelenmiştir. Elde edilen deneysel sonuçlar hata sınırları içinde teorik hesaplama sonuçlarıyla aynı olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca bu çalışmada yeni ölçüm yöntemiyle çalışan TEPAS sistemin yüksek performansı görülmüştür.

Kaynaklar

1. A. H. Yavuz, “Bulanık Mantık Denetimli Termoelektrik Beyin Soğutucusu”, Doktora Tezi, Ankara, 1-180 (2009).
2. Z. Aktaş, Kriyo Uygulamaları, Bölüm A-5b, 2014
3. S. Dişlitaş, Bilgisayar Kontrollü Termoelektrik Performans Analiz Sistemi, Doktora Tezi, Ankara, 2009
4. Kwon, B. K., Mann, C., Sohn, M. H., “Hypothermia for spinal cord injury”, The Spine Journal, 8(2): 859-874 (2008).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

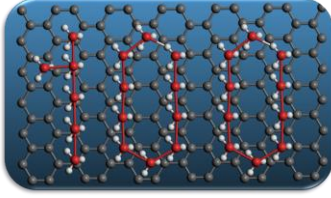
Türkiye'deki Termoelektrik Bilimi ve Teknolojisi

Prof. Dr. Raşit AHISKA

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara 06500

Özet. Bu çalışmada, Türkiye'deki termoelektrik biliminin, sanayisinin bugünü ve perstekifi incelenmiş ve Türkiye'de bu teknolojilerin gelişmesi için yapılması gerekenler önerilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Termoelektrik, bilim, sanayi



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Bor-katkılı 3-boyutlu grafen-tabanlı sistemlerde metan (CH_4) tutunma süreçlerinin incelenmesi

Sezgin AYDIN

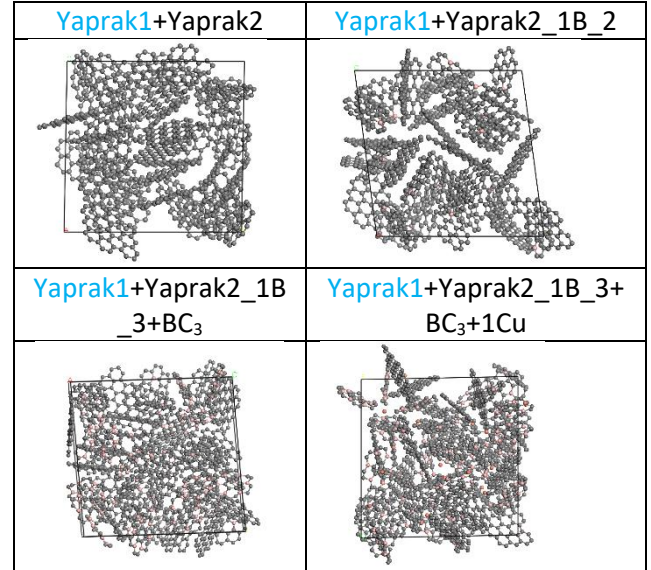
Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, 06500

Özet. Farklı geometrilere sahip grafen parçalarından moleküler mekanik yöntemler yoluyla oluşturulan 3-boyutlu kristal yapıların metan (CH_4) tutunma süreçleri araştırıldı. Tutunma süreçlerini iyileştirebilmek amacıyla grafen parçalarına bor katkılanarak ve farklı sayılarda metal (Cu) dekore edilerek yeni sistemler tasarlandı ve tutunma süreçleri incelendi.

Anahtar Kelimeler: Moleküler mekanik, metan, bor-katkılama

Zehirli gazların veya metan (CH_4) gibi seçimli bazı gazların nano-yapılarda depolanması oldukça önemlidir [1, 2]. Bor-katkılı grafen yapıların ve ilave olarak metal dekore edilmiş sistemlerin hidrojen depolama çalışmalarından “görece” iyi tutucular oldukları bilinmektedir. O nedenle, grafen tabanlı bor katkılı ve metal dekore edilmiş nano-yapraklardan moleküler mekanik yöntemler kullanılarak 3-boyutlu amorf sistemler tasarlandı, elde edilen sistemler optimize edilerek CH_4 depolama kapasiteleri karşılaştırmalı bir şekilde incelendi.

Grafen parçaları veya katkılı-yapraklar (Şekil 1) farklı miktarlarda (veya yüzdelerde) “Amorphous Cell” ile kübik bir kristal birim hücresi şeklinde paketlenildi. Elde edilen birim hücreler Forcefield tabanlı geometri optimizasyonu yapmayı mümkün kılan “Forcite+” ile optimize edildi (Şekil 1). Sorption modülü yardımıyla, yaprakları içeren birim hücrelerin her biri için CH_4 moleküllerinin adsorpsiyon (tutunma) süreçleri modellendi ve 10^7 MD adımı için ortalama adsorpsiyon eğrileri çizildi. Basınç 1 atm ve sıcaklık 298 K olarak seçildi.

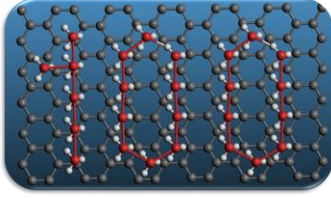


Şekil 1. Forcite+ ile optimize edilmiş geometriler

Bor katkılı sistemlerin Cu-dekore edilmiş sistemlerle karşılaştırıldığında daha iyi sonuçlar verdiği gözlemlendi.

Kaynaklar

1. L. Wang, Z. Wang, X. Li, Y. Yang, “Molecular Dynamics mechanism of CH_4 diffusion inhibition by low temperature in anthracite microcrystallites”, ACS Omega 5, 23420-23428 (2020).
2. Y. Zhang, J. Zhuo, Y. Wu, Q. Yao, Energy Fuels 34, 4153-4161 (2020).



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Galyum Tabanlı 2B van der Waals Heteroyapılarda Bant Hizalanması

Yeşim Moğulkoç¹, Aşkın Seher Bal¹, Rabia Çağlayan²

¹Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği, Ankara, 06100

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

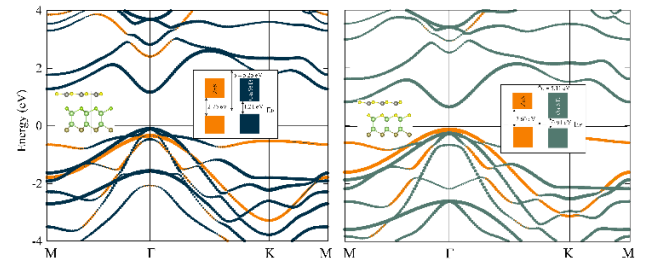
Özet. İlk ilkesel yöntemler ile galyum dikalkojenit yapıların farklı iki boyutlu malzemeler ile vdW heteroyapılar oluşturulmuştur ve bu yapıların optoelektronik özelliklerini ve her bir vdW heteroyapının bant hizalanması incelenmiştir. Janus yapılarda ise kalkojen atomlarının değişmesi bant hizalanmalarının tip-I'den tip-II'ye doğru değiştiği gözlemlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: iki boyutlu heteroyapılar, galyum dikalkojenitler, bant hizalanması, optoelektronik özellikler

Atomik kalınlıktaki iki boyutlu (2B) malzemelerde ortaya çıkan kuantum hapis etkileri sayesinde bu malzemeler yığın suretlerinden daha verimli ve düşük enerji tüketimine sahiptirler. Grup-III dikalkojenitler grubu içinde bulunan iki boyutlu galyum dikalkojenit malzemeleri son yıllarda ilgi çekici bir konu haline gelmiştir. Bu malzemelerin geniş bant aralıkları ve yüksek foto-duyarlılıklarına sahip olmaları nedeniyle yeni nesil optoelektronik uygulamalar için uygun aday oldukları önceki çalışmalarda gösterilmiştir [1]. Yeni nesil teknolojik uygulamalar için yarıiletkenlerin optoelektronik özelliklerinin dış etkiler ile ayarlanabilir olması önemlidir. İki farklı 2B malzemenin dikey olarak istiflenmesiyle oluşturulan van der Waals (vdW) heteroyapılar, istif desenlerine bağlıdır ve tek katmanlı hallerine göre daha işlevseldir.

2B vdW heteroyapılarının kullanım alanlarını belirlemek için bant hizalanmalarını belirlemek önemlidir. Bu heteroyapılar, tip-I (ayrık seviyeler), tip-II (kademeli seviyeler) ve tip-III (kırık seviyeler) olmak üzere üç farklı şekilde düzenlenebilir. Tip-I yapılar, LED'ler ve lazerler için uygunken, tip-II heteroyapılar fotovoltaik ve fotokatalitik uygulamalar için idealdir. Diğer yandan, tip-III heteroyapılar fotodedektör gibi alanlarda kullanılır. İlk ilkesel yöntemler ile Janus galyum dikalkojenit

yapıların farklı iki boyutlu malzemeler ile -altı farklı istif desenini göz önünde bulundurarak- vdW heteroyapılar oluşturulmuştur ve yapısal özellikleri incelenerek, dinamik kararlılıkları da fonon spektrumları ile belirlenmiştir. Kararlı bulunan bu yapıların optoelektronik özellikleri ve bant hizalanması incelenmiştir.



Şekil 1. Janus galyum dikalkojenitleri ile oluşturulan van der Waals heteroyapılarına ait katman iz düşürülmüş elektronik bant yapıları. (İlgili yapılara ait bant hizalanmaları grafiklerin içinde sunulmuştur.)

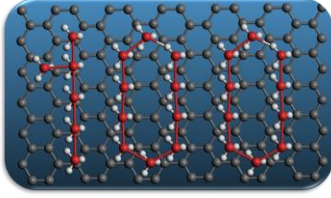
Janus yapılar ile oluşturulan heteroyapılarda elektronik bantların geniş bir bant aralığına sahip direkt bant yapısına sahip olduğu ve yapıdaki kalkojen atomlarının değiştirilmesi ile yapıların bant hizalanmalarının tip-I'den tip-II'ye doğru değiştiği gözlemlenmiştir.

Kaynaklar

1. C. Ren, S. Wang, H. Tian, Y. Luo, J. Yu, Y. Xu, M. Sun, "First-principles investigation on electronic properties and band alignment of group III monochalcogenides". *Scientific Reports*, 9(1), 13289 (2019).

Teşekkür

Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu (hy mf.ankara.edu.tr) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır. Bu çalışma TÜBİTAK 2209-A kapsamında desteklenmektedir.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

Janus İki Boyutlu XICl (X= Be, Mg, Ca) Malzemelerinin Optoelektronik Özelliklerinin Ab-initio Yöntemler Kullanılarak İncelenmesi

Yeşim Moğulkoç, Gülden Yıldız Şengüler, Sılasu Demir

Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği, Ankara, 06100

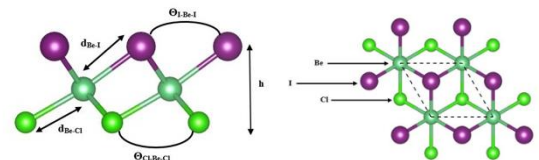
İki boyutlu Janus XICl (X=Be, Mg, Ca) malzemelerinin optoelektronik özellikleri bu çalışmada araştırılmıştır. Yüksek hassasiyetli ilkeler temel alınarak yapılan hesaplamalar, Janus iki boyutlu XICl (X=Be, Mg, Ca) malzemelerinin yapısal, elektronik ve optik özelliklerini aydınlatmak amacıyla gerçekleştirilmiştir. Ayrıca, malzeme kararlılığına ilişkin yapısal analizlerin yanı sıra fonon özellikleri üzerine dinamik kararlılık analizleri de sunulmuştur. Bu çalışma, iki boyutlu Janus malzemelerin kullanımıyla yeni nesil optoelektronik uygulamalar için potansiyel malzeme önerileri sunmaktadır. Bulgular, malzeme bilimine ve optoelektronik teknolojilerine katkı sağlama potansiyeline sahiptir.

Anahtar Kelimeler: Janus, 2D malzeme, elektronik, optik

İki boyutlu (2B) Janus malzemeler, farklı özelliklere sahip çift taraflı yapısıyla dikkat çekerek çeşitli teknolojik uygulamalar için umut vaat eden adaylar olarak ortaya çıkmıştır. 2B Janus malzemelerin özgün özellikleri, iki yüzleri arasındaki elektronik, optik, mekanik ve kimyasal özelliklerdeki değişiklikler sayesinde birçok uygulama olasılığını gündeme getirmektedir. İki boyutlu (2B) Janus malzemeler düzlem dışı asimetrisi sebebiyle güneş pilleri, gaz algılama, bataryalar ve piezoelektrik cihazlar gibi çeşitli uygulama alanlarına sahiptir. Janus malzemelere öncülük eden MoS₂'nin sentezlenmesi ve MoS₂(Se₂)'den daha üstün fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip olması sebebiyle farklı 2B Janus malzemeler teorik ve deneysel olarak incelenmiştir. MoS₂'nin sentezlenmesiyle bu alanda yapılan çalışmalar da artmıştır. 2B heteroyapıların elektronik bantları ve Schottky bariyer yükseklikleri dış bir elektrik alan ve gerilme altında araştırma grubumuz tarafından da araştırılmıştır [1].

Janus MoS₂Se tek tabakasının düşük taşıyıcı rekombinasyon oranına sahip verimli bir geniş solar spektrumlu su ayrıştırıcı fotokatalizör olduğuna dair araştırmalar Ma ve arkadaşları tarafından incelenmiştir [2].

Bu motivasyonlarla, bu çalışma kapsamında; 2B Janus XICl (X= Be, Mg, Ca) malzemesinin tek katmanının yapısal, elektronik ve optik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak incelenmiştir. Bu teorik incelemeler neticesinde 2B Janus XICl (X= Be, Mg, Ca)'in güneş pillerinde şeffaf iletken malzeme olarak kullanımı için umut verici bir malzeme olduğu öngörülmektedir.



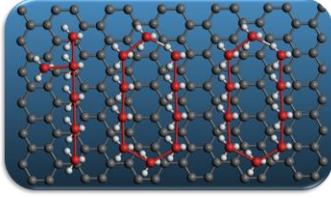
Şekil 1. Janus 2D BeICl'nin yandan ve üstten görünümü

Kaynaklar

1. Mogulkoç, Y., Guler, H.E., Tokmakci, B.N., Çağlayan, R. "Comprehensive study on electronic structures of SiGe/GaSeTe vdW heterobilayer.", Journal of Materials Science volume 58, pages4020–4030 (2023).
2. Ma, X., Wu, X., Wang, H., Wang, Y.A "Janus MoS₂Se monolayer: A potential wide solar-spectrum water-splitting photocatalyst with a low carrier recombination rate.", Journal of Materials Chemistry A, 6(5), 2295–2301 (2018).

Teşekkür

Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu (hyf.ankara.edu.tr) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır. Bu çalışma TÜBİTAK 2209-A kapsamında desteklenmektedir.



100.YIL ANISINA
YOĞUN MADDE FİZİĞİ ÇALIŞTAYI
27.10.2023



Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara, TÜRKİYE

İki Boyutlu Janus SnSSe Malzemesi Üzerine Küçük Gaz Moleküllerinin Adsorpsiyonu

Yasin Zengin¹, Rabia Çağlayan², Yeşim Moğulkoç¹

¹Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği, Ankara, 06100

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

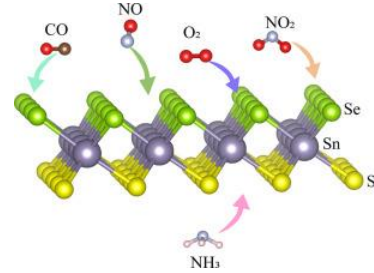
İki boyutlu (2D) Janus SnSSe malzemesinin kararlı olan 1T fazı için küçük gaz molekülleri adsorbe edilmiş ve bu malzeme üzerindeki adsorpsiyon davranışları incelenmiştir. Karbonmonoksit (CO), azot monoksit (NO), azot dioksit (NO₂), amonyak (NH₃) ve oksijen (O₂) gaz molekülleri 2D Janus SnSSe malzemesinin her iki yüzeyine farklı adsorpsiyon konfigürasyonlarında ve dikey ve paralel yönelimlerde adsorbe edilmiştir. Adsorpsiyon enerjileri ve yükseklikleri hesaplanarak malzemelerin adsorpsiyon özellikleri incelenmiştir. Ayrıca, spin polarize elektronik bandı, durum yoğunluğu, yük yoğunluğu ve Bader analizi gibi karakterizasyonlar da yapılmıştır. Ayrıca her bir molekül için geri kazanım süresi hesaplanmış ve bu malzemelerin en kararlı yapıları seçilerek optik özellikleri de incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, İki Boyutlu Malzemeler, Adsorpsiyon, Toksik Gaz Molekülleri

Toksik gaz moleküllerinin 2D Janus SnSSe malzemesine adsorpsiyonu ile çevre kirliliğinin nano malzemeler kullanılarak çözümü ve yeni nesil yarıiletken teknolojisinde kullanılabilecek düşük boyutlu sistemlerin üretimi için öngörü sağlama amaçlanmıştır. Düzlem dalga hesabına dayanan YFT hesabında Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır.

Tablo 1. 2D Janus SnSSe için gaz moleküllerine göre adsorpsiyon yüksekliği (h), adsorpsiyon enerjisi (E_{ads}), toplam dipol moment (μ), yük transferi (ΔQ), geri kazanım süresi (τ)

Gaz Mol.	h (Å)	E_{ads} (eV)	M (μ_B)	ΔQ ($ e $)	τ (ns)
CO	3.25	-0.084	0.00	-0.016	0.026
NO	2.50	-0.223	0.86	0.072	5.560
NO ₂	2.85	-0.168	1.00	-0.054	0.660
NH ₃	2.60	-0.156	0.00	0.016	0.416
O ₂	3.20	-0.072	2.00	-0.025	0.016



Şekil 1. Küçük gaz molekülleri/SnSSe adsorpsiyonu

2D Janus SnSSe malzemesinde NO gaz molekülünün adsorpsiyon sonucu elde edilen verilerin diğer moleküllere kıyasla daha anlamlı olduğu görülmüştür. Ayrıca NO/SnSSe malzemesi için dielektrik fonksiyonun sanal kısımlarına ait pik noktaları morötesi bölgeye karşılık gelmektedir. Bu durumda 2D Janus SnSSe malzemesinin optik sensör olarak kullanılabileceği ve NO molekülünün diğer moleküllere kıyasla daha kolay tespit edilebileceği öngörülmüştür.

Kaynaklar

- Y. Zengin, R. Çağlayan, Y. Moğulkoç, "Adsorption of small gas molecules onto the two-dimensional Janus SnSSe monolayer", *Computational Condensed Matter*, e00815 (2023).
- Y. Zengin, *Doktora Tezi*, "Toksik Gaz Moleküllerinin İki Boyutlu Malzemeler Üzerine Adsorpsiyonu", Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, YÖK Tez Referans No: 10577730 (2023).

Teşekkür

Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu (hyfm.ankara.edu.tr) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır. Ankara Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü (BAP) tarafından FBA-2023-2800 numaralı Araştırma Projesi kapsamında desteklenmiştir.

Katılımcı Listesi

AD-SOYAD	KATILIM TÜRÜ	e-posta adresi	KURUM
Adem TATAROĞLU	dinleyici	ademt@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Ahmet DEMİRCİ	Dinleyici	ademirci@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Ahmet KARADAĞ	Dinleyici	ahmetphysicist@hotmail.com	İstanbul Kültür Üniv.
Ahmet KILIÇ	Dinleyici	ak.2004.turkey@gmail.com	Gazi Üniv.
Alev SAKARYA	Davetli Konuşmacı	alevsakarya@trakya.edu.tr	Trakya Üniv.
Ali GENCER	Davetli Konuşmacı	gencer@science.ankara.edu.tr	Ankara Üniv.
Ali Haydar ÖZTÜRK	poster	alihaydar.ozturk@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Alpaslan GÜRBÜZ	poster	alpaslan.gurbuz@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Arda Levent ÖZDEMİR	Dinleyici	ardalevent6@gmail.com	
Aşkın Seher BAL	Dinleyici	askiinseher@gmail.com	Ankara Üniv.
Aycan ÖZKAN	Düzenleme kurulu	aycan@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Ayfer AYDOĞAN	poster	ayf.aydogan@gmail.com.	Gazi Üniv.
Ayşen ÖZEN	Dinleyici	Aysen.ozn3@gmail.com	Gazi Üniv.
Azra PARILDAYAN	Dinleyici	parildayanazra@gmail.com	Gazi Üniv.
Barış AKMAN	Dinleyici	lbaris.akman@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Başak Çağlayan TOPRAK	poster	basakcaglayantoprak@gmail.com	Ankara Üniv.
Belgin KOÇAK	dinleyici	belgin.kocak@ostimteknik.edu.tr	Ostim Teknik Üniv.
Berfin SAĞIR	Dinleyici	berfinsagir.bsr@gmail.com	Gazi Üniv.
Berkay Eren ÖZÜN	Dinleyici	b.ozun8658@gmail.com	Gazi Üniv.
Beyza Nur TOKMAKCI	Dinleyici	beyzantok@gmail.com	Ankara Üniv.
Bilge ÖZKAN	Dinleyici	bilge.ozkan6@gmail.com	Gazi Üniv.
Buğrahan ERBAR	Dinleyici	berbar@aselsan.com.tr	Gebze Teknik Üniv.
Burak KARATAŞOĞLU	Dinleyici	burakkaratasoglu1@gmail.com	Ankara Üniv.
Buse KULOĞLU	Dinleyici	nanomoresim@gmail.com	Kırıkkale Üniv.
Buse YILDIRIM	Dinleyici	buseyildirim02@hotmail.com	Ankara Üniv.
Bülent KUTLU	Düzenleme kurulu	bkutlu@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Büşra SAYIN	poster	b.badiseba@gmail.com	Gazi Üniv.
Can AKKUŞ	poster	akkuss.can@gmail.com	Gazi Üniv.
Çiğdem Şükriye GÜÇLÜ	poster	cigdemguclu@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Derya ÖZGÜR	dinleyici	deryaoncel@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Dilara TIRIN	Dinleyici	dilaratrn.16@gmail.com	Gazi Üniv.
Doğa IŞIK	Dinleyici	doga.isik9@gmail.com	Gazi Üniv.
Doğukan ALKAN	Dinleyici	adogukn@gmail.com	Gazi Üniv.
Ebrar Melisa ASLAN	Dinleyici	ebrar25melisa55@gmail.com	Gazi Üniv.
Ecem BÖBREK	Dinleyici	simyacem@gmail.com	Gazi Üniv.
Efe Erdem DÖNMEZ	Dinleyici	efeerdemd9@gmail.com	Gazi Üniv.
Efe KARANACAĞOĞLU	Dinleyici	karanacakoglu2@gmail.com	Ankara Üniv.
Elif BAYAT	Dinleyici	06.elif.2004@gmail.com	Gazi Üniv.
Elif GÜLER	Dinleyici	23420102017@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Elif KÜLEKÇİ	Dinleyici	elfklkci@gmail.com	Gazi Üniv.
Emin BAŞKAYA	Dinleyici	emin.kutuphane@gmail.com	Gazi Üniv.
Emine Betül BEKTAŞ	Dinleyici	betulbektas139@gmail.com	Gazi Üniv.
Emircan TURGUT	Dinleyici	emircan14turgut@gmail.com	Gazi Üniv.

Emre ACIRLI	Dinleyici	emreacirli@gmail.com	Gazi Ünv.
Emre DEMİR	Dinleyici	emred3216@gmail.com	Gazi Ünv.
Eren Can ÇOBAN	Dinleyici	ecan.coban@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Erkan HEKİN	poster	erkan0684@gmail.com	Gazi Ünv.
Esmanur KANDEMİR	Dinleyici	Esmanurkandemir@gmail.com	Gazi Ünv.
Esra BALCI	dinleyici	balci.esra@hbv.edu.tr	Hacı Bayram Veli Ünv.
Esra EROĞLU	dinleyici	ergluesra@gmail.com	ODTÜ
Esra KOZ	Dinleyici	kozesarasemin@icloud.com	Gazi Ünv.
Esra YÜKSELTÜRK	dinleyici	esra.yukselturk@ostimteknik.edu.tr	Ostim Teknik Ünv.
Eylül Defne İNAN	Dinleyici	edefne.inan@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Fadime DEMİR	poster	fadimedemir6640@gmail.com	Gazi Ünv.
Fatih ERSAN	Davetli Konuşmacı	fatih.ersan@adu.edu.tr	Adnan Menderes Ünv.
Fatih Furkan KARA	Dinleyici	ffurkankara@gmail.com	Gazi Ünv.
Fatih KOÇAKER	Dinleyici	fatihkocaker918@gmail.com	Gazi Ünv.
Fatma Kübra ÖZTEKİN	poster	f.kubraoztekin06@gmail.com	Gazi Ünv.
Fatmanur KAHRAMAN	Dinleyici	fatmanurkahraman51@gmail.com	Gazi Ünv.
Feyza Fatma ÇELİK	Dinleyici	feyzaf.celik06@gmail.com	Gazi Ünv.
Furkan CİN	Dinleyici	furkan5306@hotmail.com	Gazi Ünv.
Furkan İLBEY	Dinleyici	furkanilbey00@gmail.com	Gazi Ünv.
Gökтуğ ÇAĞAN	Dinleyici	goktugcagann@gmail.com	Gazi Ünv.
Gökтуğ EFTEKİN	Dinleyici	goktug.eftekin@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Gökтуğ TURAN	Dinleyici	goktug_6176@hotmail.com	Gazi Ünv.
Görkem Can KARAKAYA	Dinleyici	gcan.karakaya@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Gül Nida KUZAY	Dinleyici	nidakuzay@gmail.com	Gazi Ünv.
Gülçin ÇORBACI	poster	gulcincorbaci1997@gmail.com	Gazi Ünv.
Gülden YILDIZ ŞENGÜLER	dinleyici	senguler@ankara.edu.tr	Ankara Ünv.
Hakan ÇİFTCİ	dinleyici	hciftci@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Halil İbrahim EFKERE	dinleyici	i.efkere@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Hamza Kaan EKİCİ	Dinleyici		
Hande TOFFOLİ	Davetli Konuşmacı	ustunel@metu.edu.tr	ODTÜ
Hanım Evşan PIRIKOĞLU	Dinleyici	hanimprkoglu@gmail.com	Gazi Ünv.
Hasan ONGAN	Dinleyici		Fizik Haber
Hatice Kambur ÇAVUŞ	dinleyici	hatice.kanbur@bozok.edu.tr	Bozok Ünv.
Hatice KILINÇ	poster	hatice.kilinc1@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Hatice Kübra DEĞİRMENCİ	Dinleyici	kubra.drmcii@gmail.com	Gazi Ünv.
Hazal ASLANDOĞAN	Dinleyici	armoni1881@gmail.com	Gazi Ünv.
Helin SUNAR	Dinleyici	helin.sunar@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Hilal YÜCEL	Davetli Konuşmacı	hkurt@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
Hümeyra Eslem GÜLER	Dinleyici	h.eslemguler@gmail.com	Ankara Ünv.
Hüseyin ACAR	Dinleyici	Lewafc@gmail.com	Gazi Ünv.
Hüseyin BAŞPINAR	Dinleyici	hbaspnar@gmail.com	Gazi Ünv.
İbrahim Halil KIZILKAYA	Dinleyici	ibrahimhalilkzk81@gmail.com	Ankara Ünv.
İlkin Yıldız AKDEMİR	Dinleyici	ilkinyildiz45@gmail.com	Gazi Ünv.
İlknur Kars DURUKAN	Düzenleme kurulu	ilknurdurukan@gazi.edu.tr	Gazi Ünv.
İrem Almina GEMİCİ	poster	iremalmina.gemici@gmail.com	Gazi Ünv.
İrem ERDOĞAN	Dinleyici	iremerdgan18@gmail.com	Gazi Ünv.

İrem Nur KILINÇARSLAN	Dinleyici	iremnurkilincarslan34@gmail.com	Gazi Üniv.
İsa BARUĞ	poster	isa.barug@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
İskender GÖKALP	Davetli Konuşmacı	igokalp@metu.edu.tr	Tübitak MAM
İsmet Taylan KAYA	Dinleyici	guardtk04@gmail.com	Gazi Üniv.
Kaan DENGİZ	Dinleyici	ka_dengiz@hotmail.com	Gazi Üniv.
Kemal Doğukan SAKARYA	Dinleyici	dogukan.sakarya2003@gmail.com	Gazi Üniv.
Kemal efe ÖZDEMİR	Dinleyici	Kemalefezdmr@gmail.com	Gazi Üniv.
Kutay ÖZAYDIN	Dinleyici	kutay.ozaydin@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Kübra ÖZTÜRK	Dinleyici	kubraa.ozturkk96@gmail.com	Gazi Üniv.
Lider Tetik Erk KAŞIKÇI	Dinleyici	lidertetikerk@protonmail.com	Ankara Üniv.
Mahmoud AWADALLA	Dinleyici	mahmoud.ama00@gmail.com	Ankara Üniv.
Mahmut AYDIN	Dinleyici	aydinmahmut686@gmail.com	Gazi Üniv.
Mahmut ÇAĞLAYAN	Dinleyici	caglayanmahmud0@gmail.com	Gazi Üniv.
Mehmet BAHAT	dinleyici	bahat@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Melek COŞKUN	Dinleyici	melekcoskun@icloud.com	Gazi Üniv.
Melike ŞAHİN	Dinleyici	Melikesa853@gmail.com	Gazi Üniv.
Melisa ASLAN	Dinleyici	melisaarslan2022@gmail.com	Gazi Üniv.
Merve Nurhan GÜNEY	Düzenleme kurulu	mnguney@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Meryem YURT	poster	yurtmeryem12@gmail.com	Gazi Üniv.
Mirac ÇORAK	Dinleyici	mirac.corak@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Muhammad Adnan SAEED	Dinleyici	Adnan.cssp@gmail.com	Gazi Üniv.
Muhammad AMMAD	Dinleyici	ammadm540@gmail.com	Gazi Üniv.
Murat ÇAVUŞ	Davetli Konuşmacı	murat.cavus@yobu.edu.tr	Bozok Üniv.
Murat Karanacakoğlu	Dinleyici	mkaranacak52@gmail.com	Ankara Üniv.
Musa AYAĞLAR	Dinleyici	musa.ayaglar@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Mustafa KARANACAKOĞLU	Dinleyici		
Nazlı Eylül DAĞ	Dinleyici	nzlylldg5@gmail.com	Gazi Üniv.
Nazlıcan YAZICIOĞLU	Dinleyici	nazlicanyazicioglu1@gmail.com	Gazi Üniv.
Nehir Ece ALKAN	Dinleyici	nehirecealkan05@gmail.com	Gazi Üniv.
Nisa Nur YENER	Dinleyici	nisaaanur08@gmail.com	Gazi Üniv.
Nuhibe TÜRKDAL	Dinleyici	nturkdal@gmail.com	Aksaray Üniv.
Nur ALBAKIR	dinleyici	Nuralbakir9@gmail.com	Gazi Üniv.
Nurcan BİNGÖLER	poster	nurcanbingoler@hotmail.com	Gazi Üniv.
Nurullah BEL	Dinleyici	nurullahbel829@gmail.com	Gazi Üniv.
Oğuz Kaan SEYMEN	Dinleyici	okseymen07@gmail.com	Gazi Üniv.
Oğuz YILDIRIM	Dinleyici	yldrmoguzylidrm@gmail.com	Gazi Üniv.
Oğuzhan B. TEKİN	Dinleyici		Eduline Bilişim
Olca KUBAT	Dinleyici	olca.kubat@eduline.com.tr	Eduline Bilişim
Ozan Bayram BOZOĞLU	Dinleyici	bozogluzozan46@gmail.com	Gazi Üniv.
Özge Zorlu KAYMAK	Dinleyici	ozgeren1403@gmail.com	Gazi Üniv.
Özlem BAYAL	Dinleyici	ozlembayal@gazi.edu.tr	Gazi Üniv.
Özlem BIÇAKÇI	Dinleyici	Ozlembckc3@gmail.com	Gazi Üniv.
Perihan Çağlar	Dinleyici	perihan06caglar@gmail.com	Gazi Üniv.
Pınar Şahin	Dinleyici	pnshn04@gmail.com	Gazi Üniv.
Prof.İdris SORAR	Dinleyici	sorar@mku.edu.tr	Mustafa Kemal Üniv.
Rabia ÇAĞLAYAN	poster	rcaglayan@ankara.edu.tr	Ankara Üniv.

Rabia ŞAHİN	Dinleyici	Rabiashnn.81@gmail.com	Ankara Ün.v.
Raşit AHISKA	poster	ahiska@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Rohat ADIGÜZEL	Dinleyici	rohat21adgzl@gmail.com	Gazi Ün.v.
Rüveyda ALTINOLUK	Dinleyici	rumeydaaltinoluktr@gmail.com	Gazi Ün.v.
Saime Şebnem AYDIN	dinleyici	cetins@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Sakin YILDIRIM	Dinleyici	Sakin0019@gmail.com	Gazi Ün.v.
Salih SAYGI	Dinleyici	salih.saygi@gop.edu.tr	Gaziosmanpaşa Ün.v.
Samet KARANACAĞLU	Dinleyici	sametkaranacak@gmail.com	Gazi Ün.v.
Sefa MÜFTÜOĞLU	Dinleyici	sefamuftuoglu@gmail.com	Yıldız Teknik Ün.v.
Serap Şentürk DALGIÇ	Davetli Konuşmacı	dserap@yahoo.com	Trakya Ün.v.
Sezgin AYDIN	Davetli Konuşmacı	sezginaydin@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Sılasu DEMİR	poster	slasudemir@gmail.com.	Ankara Ün.v.
Sudem KARSAK	Dinleyici	23043030022@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Süha Gül KARA	Dinleyici	suhagulk@gmail.com	Gazi Ün.v.
Süleyman ÖZÇELİK	Davetli Konuşmacı	sozcelik@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Şemsettin ALTINDAL	Davetli Konuşmacı	altundal@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Şenay YURDAKUL	dinleyici	senayy@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Şerife GÜMÜŞ	Dinleyici	Serife1419gms@gmail.com	Gazi Ün.v.
Şevval DOĞAN	Dinleyici	sevdo34@gmail.com	Gazi Ün.v.
Şeymanur BAŞARAN	Dinleyici	sbsrn235@gmail.com	Gazi Ün.v.
Şimal KIRCA	Dinleyici	simallkirca@gmail.com	Gazi Ün.v.
Talha AKALIN	Dinleyici	bytlh06@windowslive.com	Gazi Ün.v.
Taner Cem ÖZSOY	Dinleyici	Tcem.ozsoy@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Tarık ASAR	dinleyici	asar@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Tolga Kağan Ünver	Dinleyici	tkagan.unver@gmail.com	Gazi Ün.v.
Tuana Sude ODABAŞ -	Dinleyici	Tuanasudeodabas5884@gmail.com	Gazi Ün.v.
Tuğba ÖKÜZCÜ	Dinleyici	tubitugba10@gmail.com	Gazi Ün.v.
Tuğçe GÜRİSOY	Dinleyici	tugcegrsy7@gmail.com	Gazi Ün.v.
Tuğçe Nur ŞİMŞİR	Dinleyici	tugcenursimsir@gmail.com	Ankara Ün.v.
Uğur İLTER	Dinleyici	ilter.ugur@yahoo.com	
Utku TOPCU	Dinleyici	utkutopcu097@gmail.com	Gazi Ün.v.
Veysel ERKOÇ	Dinleyici	veyselerkoc21@gmail.com	Gazi Ün.v.
Yasemin ÇİFTÇİ	Düzenleme kurulu	yasemin@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Yasemin Şafak ASAR	dinleyici	yaseminsafak@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Yasin ZENGİN	poster	yasinzenginmeb@gmail.com	Talim ve Terbiye kurulu Başkanlığı
Yeşim MOĞULKOÇ	Davetli Konuşmacı	yesim.mogulkoc@eng.ankara.edu.tr	Ankara Ün.v.
Yunus ÖZEN	dinleyici	yunus.ozen@gazi.edu.tr	Gazi Ün.v.
Yusuf ÇEKEREK	Dinleyici	yousifyr55@gmail.com	Gazi Ün.v.
Yücel Mert KARAOĞLU	Dinleyici	ymlr.darkson@gmail.com	Gazi Ün.v.
Zahide TERZİOĞLU	Dinleyici	kizilotesi.zahide@gmail.com	Ankara Ün.v.
Zeynep Ece KORKMAZ	Dinleyici	zeynepcekorkmaz6@gmail.com	Hacettepe Ün.v.