



Hacettepe Üniversitesi

# 29. YOĐUN MADDE FİZİĐİ ANKARA TOPLANTISI YMF 29

20 Aralık 2024, Cuma

Prof. Dr. Mehmet Yüksel Konferans Salonu, Hukuk Fakültesi  
Hacettepe Üniversitesi

<https://ymf29.hacettepe.edu.tr/>

aselsan



ASENTEK



**Onur Kurulu**

Hüseyin Zafer Durusoy

Recai Ellialtıođlu

Şinasi Ellialtıođlu

Ayşe Çiğdem Erçelebi

Yalçın Elerman

Tezer Fırat

**Düzenleme Kurulu**

Buğra Yıldız

M. Emre Taşgın

Emre S. Taşcı

Gamze Atak

**Bilim Kurulu**

Bekir Sıtkı Kandemir

Eyüp Duman

Şengül Kuru

Oğuz Gülseren

Ceyhun Bulutay

Engin Durgun

Süleyman Özçelik

Mehmet Çakmak

Saime Şebnem Aydın

Yasemin Şafak Asar

Mehmet Emre Taşgın

Emre S. Taşcı

Alpan Bek

O. Barış Malcıođlu

Hande Toffoli

## ÖNSÖZ

1984 yılından bu yana geleneksel olarak düzenlenen Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantılarının 29'uncusu bu yıl 20 Aralık 2024 Cuma günü Hacettepe Üniversitesi (Beytepe) Hukuk Fakültesi Prof. Dr. Mehmet Yüksel konferans salonunda gerçekleştirilecektir. Bu toplantıda 12 çağrılı konuşmacının sunum yapması ve 40 poster sunumu yapılması planlanmaktadır. Her yıl olduğu gibi bu yıl da seçilecek başarılı 3 poster ödüllendirilecektir.

Tüm katılımcılara, sözlü ve poster sunumlarıyla katkı verenlere, toplantıya destek veren kuruluşlara, danışma kuruluna ve diğer emeği geçenlere teşekkür ederiz.

Düzenleme Kurulu  
20 Aralık 2024

**PROGRAM**

8:45 – 9:15	<b>Kayıt</b>	
9:15 – 9:30	<b>Açılış Konuşması: Emre S. Taşçı</b>	
<b>I. OTURUM</b>	<b>Oturum Başkanı: Alpan Bek</b>	
9:30-9:50	Onur Tokel	There is plenty of room at the bottom: in-chip nanofabrication
9:50-10:10	Berna Morova	Kırınımsız Lazer Hüzmeleri ile Nano-Ölçekli Malzeme Yapılandırma: Yenilikçi Teknikler ve Uygulamalar
10:10-10:30	Doğan Kaya	Çok Fonksiyonlu Nanoparçacık Sentezi: Manyetik ve Katalitik Etkileşimi
10:30 – 11:10	<b>Poster Arası</b>	
<b>II. OTURUM</b>	<b>Oturum Başkanı: Süleyman Özçelik</b>	
11:10 – 11:30	Haldun Sevinçli	Çok katmanlı ve düzensiz iki-boyutlu yapılarda yük taşınımı: Rejimler arası hiyerarşinin kırılması ve yeni bir ölçekleme kuralı
11:30-11:50	Ege Özgün	Altıgen Örgülerde Harmonik Yaklaşım Altında Kiral Fononlar
11:50-12:10	İbrahim Sarpkaya	TMDC Heteroyapılarda Katmanlar Arası Eksitonların Kuantum Vuru Spektroskopisi
12:10-12:30	Sponsor Sunumu	ASENTEK
12:30 – 13:45	<b>Öğle Yemeği</b>	
<b>III. OTURUM</b>	<b>Oturum Başkanı: Oğuz Gülseren</b>	
13:45 – 14:05	Irmak Sargın	Malzeme Enformatiği ile XYB14 Kristal Ailesinin Kararlılığının İncelenmesi
14:05-14:25	Yoshiaki Kanamori	Metamaterials and nanophotonics open up new avenues for light manipulation technologies
14:25-14:45	Ramazan Şahin	Görünür Dalgaboylarında Aktif Ayarlanabilen Plazmonik
14:45 – 15:30	<b>Poster Arası</b>	
<b>IV. OTURUM</b>	<b>Oturum Başkanı: Bekir Sıtkı Kandemir</b>	
15:30 – 15:50	Abdullah Yıldız	Kurşunsuz perovskit güneş hücrelerinin simülasyonu
15:50-16:10	Aslı Tuncer	Kuantum Otto Motorunda Ising Spin-Camı Yakıtlar
16:10-16:30	Deniz Türkpençe	Doğrusal Olmayan Aktivasyonlu Açık Kuantum Nöron Modeli
16:30 – 16:45	<b>Ara</b>	
16:45 – 17:00	<b>Poster Ödülleri</b>	
<b>V. OTURUM</b>		
17:00 – 18:00	Duayenlerle Sohbet	

**Yoğun Madde Fiziği, Ankara Toplantıları****Geçmiş Toplantılar**

YMF 1	Katihal Fiziği Toplantısı	Hacettepe Üniversitesi	7 Şubat 1984
YMF 2	II. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri	Bilkent Üniversitesi	1992
YMF 3	III. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri	Ankara Üniversitesi	1993
YMF 4	IV Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri	Hacettepe Üniversitesi	30 Kasım 1994
YMF 5	Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri V	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	7 Mart 1997
YMF 6	Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri VI	Gazi Üniversitesi	28 Kasım 1997
YMF 7	Yoğun Madde Fiziği - Ankara Seminerleri VII	Bilkent Üniversitesi	30 Kasım 1998
YMF 8	8. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	9 Kasım 2001
YMF 9	9. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	20 Aralık 2002
YMF 10	10. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Hacettepe Üniversitesi	14 Kasım 2003
YMF 11	11. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Gazi Üniversitesi	3 Aralık 2004
YMF 12	12. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Ankara Üniversitesi	18 Kasım 2005
YMF 13	13. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	3 Kasım 2006
YMF 14	14. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Hacettepe Üniversitesi	2 Kasım 2007
YMF 15	15. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	7 Kasım 2008
YMF 16	16. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Gazi Üniversitesi	6 Kasım 2009
YMF 17	17. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Ankara Üniversitesi	5 Kasım 2010
YMF 18	18. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	25 Kasım 2011
YMF 19	19. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	20 Aralık 2013
YMF 20	20. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Hacettepe Üniversitesi	26 Aralık 2014
YMF 21	21. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Gazi Üniversitesi	25 Aralık 2015
YMF 22	22. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Ankara Üniversitesi	16 Aralık 2016
YMF 23	23. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	22 Aralık 2017
YMF 24	24. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	21 Aralık 2018
YMF 25	25. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Hacettepe Üniversitesi	20 Aralık 2019
YMF 26	26. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Gazi Üniversitesi	24 Aralık 2021
YMF 27	27. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Orta Doğu Teknik Üniversitesi	16 Aralık 2022
YMF 28	28. Yoğun Madde Fiziği - Ankara Toplantısı	Bilkent Üniversitesi	22 Aralık 2023

## DAVETLİ KONUŞMACILAR

## Kurşunsuz perovskit güneş hücrelerinin simülasyonu

**Nepse Seda BOZKURT, Abdullah YILDIZ\***

*Ankara Yıldırım Beyazıt Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Enerji Sistemleri  
Mühendisliği Bölümü, 06010, Ankara, \*yildizab@gmail.com*

Toksitesinden dolayı, kurşun (Pb), perovskit bazlı güneş hücrelerinin ticarileştirilmesinin önündeki önemli bir engeldir. Bu çalışmada, mükemmel termal olarak kararlı, kurşunsuz perovskit aktif katmandan oluşan güneş hücrelerinin fotovoltaj özellikleri kapsamlı bir şekilde incelendi. Cihaz optimizasyonu kullanılarak, yüksek verimli kurşunsuz yeni bir n-i-p perovskit güneş hücresi tasarımı önerildi. Önerilen, n-i-p yapısına sahip cihaz tasarımlarını teorik olarak analiz etmek için güneş hücresi kapasitans simülatörü (SCAPS-1D) kullanıldı. Perovskit ve seçici yük taşıma katmanları kalınlığı, soğurucu ve arayüz kusur yoğunluğu, çalışma sıcaklığı, seri ve paralel direnç değerleri optimize edilerek, optimum cihaz performans değerleri belirlenmiştir.

# Kuantum Otto Motorunda Ising Spin-Camı Yakıtlar

Aslı Tuncer

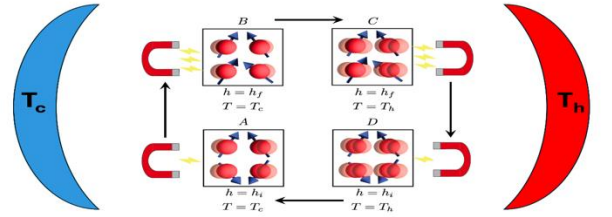
Koç Üniversitesi, Fizik Bölümü, 34450 İstanbul

Kuantum spin camları, düzensizlik ve bunalım gibi etkilerin egzotik faz davranışlarına yol açtığı, kuantum sistemlerde dikkat çekici bir model sınıfını temsil eder. Bu çalışmada, düzensiz spin etkileşimlerinin motorun termodinamik verimliliği ve performansı üzerindeki etkisini araştırıyoruz. Çalışmamız, spin camı sistemlerinin kuantum termodinamiği hakkında yeni içgörüler sunmakta ve kuantum ısı motorları ile kuantum bilgi işleminin geliştirilmesine yönelik potansiyel uygulamalara işaret etmektedir.

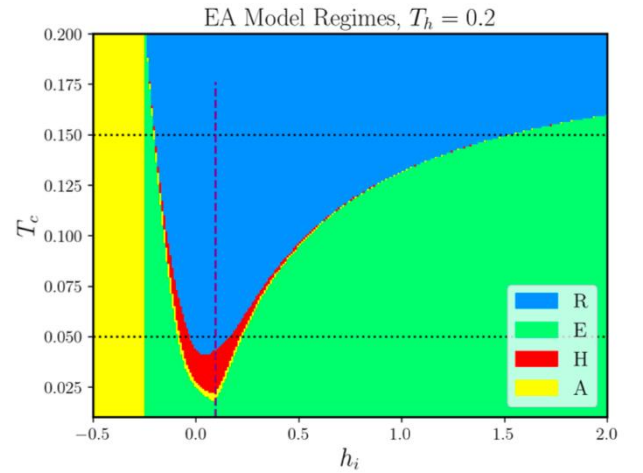
Kuantum termodinamiğinin gelişen alanlarından biri olan spin-camı modelleri, düzensiz manyetik sistemlerin karmaşık özelliklerini anlamak için güçlü bir araçtır.

Homojen etkileşimlere sahip Ising modeli Otto motorundan farklı olarak [1], sisteme düzensizlik ve rastgelelik unsurları dahil edildiğinde, Şekil 1.'de verilen model için, ısı motoru modunda, çift tepe yapısına sahip bir performans eğrisi ve kritik noktaya yakın [2] süperlineer ölçeklenme gördük,  $W \sim N^\alpha$ ,  $\alpha > 1$ . Ayrıca, soğutucu modunda (R), farklı sıcaklık bölgelerinde, süperlineer bir verimlilik artışı sağlanabileceğini gördük.

Sistemin gerçekçi davranışını sonlu zaman dinamikleri üzerinden incelediğimizde, termodinamik performans ve iş çıktısında gözlemlediğimiz süper-lineer ölçeklenme davranışı, kuantum sistemlerdeki düzensizlik ve bunalımın termodinamik performansı artırma potansiyelini vurgulamaktadır. Bulgularımız, kuantum ısı motorları, kuantum bilgi işleme ve enerji yönetimi uygulamalarında yeni yollar açma potansiyeline sahiptir.



(a)



(b)

**Şekil 1:** (a) Şematik olarak dört basamaktan oluşan bir kuantum Otto çevrimi: Adyabatik genişleme ( $A \rightarrow B$ ), izokorik sıcak termalizasyon ( $B \rightarrow C$ ), adyabatik sıkıştırma ( $C \rightarrow D$ ), izokorik soğuk termalizasyon ( $D \rightarrow A$ ). (b) Sabit  $T_h = 0.2$  değerinde, modelin çalışma rejimleri  $T_c$  ve dış alan  $h_i$  için gösterilmiştir.

## Kaynakça

1. G. Piccitto, M. Campisi, and D. Rossini, The ising critical quantum otto engine, *New Journal of Physics* 24, 103023 (2022).
2. Huse, D. A., & Fisher, D. S., Griffiths Phase in Quantum Ising Systems, *Physical Review B*, 33(8), 5138-5140, (1986).



# Kırınımsız Lazer Hüzmeleri İle Nano-Ölçekli Malzeme Yapılandırma: Yenilikçi Teknikler ve Uygulamalar

Berna Morova

*İstanbul Teknik Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 34469 İstanbul*

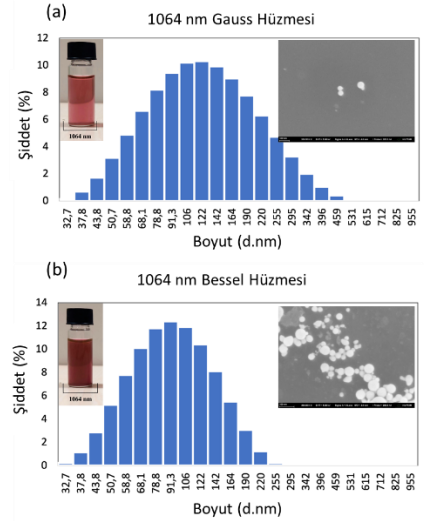
Bu çalışmada, kırınımsız hüzmeler kullanılarak silikon yüzeyinde nano yapıların üretilmesinin yanısıra farklı sıvı ortamlar içerisinde nanosaniye Bessel darbeleri kullanılarak farklı dalgaboylarında altın nanoparçacık üretimi gerçekleştirilmiş ve Gauss hüzmeleri ile karşılaştırmalı sonuçlar sunulmuştur.

Kırınımsız lazer darbeleri, saydam malzemelerden metallere kadar çok farklı malzeme tiplerinin yüksek hassasiyette yapılandırılmasına imkan tanır. Kırınımsız lazer hüzmelerinin yüksek en-boy oranı ve enerjisi nanometre ölçeğinde lokalize edebilme yetenekleri sayesinde hem yüzeylerde hem de yığın malzemelerin içerisinde nano-ölçekli yapılandırma, lazer ablasyonu ile sıvı içerisinde nanoparçacık üretimi gibi uygulamalar için etkin bir araç olarak öne çıkmaktadır [1-4].

Bu çalışmada, ultrahızlı lazer ablasyonu ile yüzey nano yapılandırma uygulamasının yanı sıra kırınımsız hüzmelerle doğrudan yazım tekniği kullanılarak yüzeyde nanometrik yapıların oluşturulması ve sıvı ortam içerisinde lazer ablasyonu ile nanoparçacık üretimi gibi lazerle malzeme işleme alanındaki farklı uygulamalara yoğunlaşmıştır. İlk olarak, nanosaniye darbe süresine sahip Gauss darbeleri ile silikon tabaka yüzeyinde nanometrik yapılar oluşturularak süperhidrofilik yüzeyler elde edilmiştir. Lazer nano-ışılama tekniğinin bir diğer uygulaması olarak da silikon tabaka yüzeyinde kırınımsız Bessel-vorteks hüzmeleri kullanılarak doğrudan nanometrik yapılar elde edilmiştir. Bu çalışmada, 120 femtosaniye darbe süresine sahip, 800 nm dalga boyunda Ti:Safir lazeri, bir faz plakası ve 10 derece taban açısına sahip aksikon kullanılarak Bessel-vorteks hüzmelerine çevrilmiş ve elde edilen merkez boşluk sayesinde nanometre mertebesinde yapılar oluşturulmuştur.

Son olarak, dalga boyunun ve ışın profilinin üretilen nanopartiküller üzerindeki etkisini incelemek amacıyla, %99,5 saflıktaki altın malzeme, deiyonize su içerisinde nanosaniye darbeli lazer kullanılarak farklı dalga boylarında ve farklı hüzmelerinde (Gauss ve Bessel hüzmeleri) işlenerek altın

nanopartiküller (Au-NP) elde edilmiştir. Deiyonize sudaki Au-NP'lerin kolloidal çözeltisi başarıyla elde edilmiş ve nanopartiküllerin boyut dağılımları ile optik özellikleri Dinamik Işık Saçılımı (DLS), Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve UV-Görünür-NIR spektroskopisi teknikleri kullanılarak analiz edilmiştir (Şekil 1).



**Şekil 1:** (a) Gauss ışın profili ve (b) Bessel ışın profili ile 1064 nm'de ns darbeli lazer ablasyonu ile üretilen Au-NP'lerin boyut dağılımları, kolloidal çözeltinin görüntüleri ve SEM sonuçları.

Sonuç olarak, nanosaniye ve femtosaniye darbe sürelerine, farklı hüzmelerine ve dalga boylarına sahip lazerler kullanılarak yarıiletken ve metal malzemelerde nano-yapılandırma uygulamaları gerçekleştirilmiş ve elde edilen sonuçlar sunulmuştur. Bu sonuçlar, kırınımsız lazerlerin derin ve geniş alanlı işlemlerde, nano ölçekteki özelliklerin yeni işlevler için hibrit yapılar halinde geliştirilmesinde uygulanabilirliğini göstermektedir.

## Teşekkür

Bu çalışma, kısmen Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK, Proje No: 120F326) ve İstanbul Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi (Proje No: 44400) tarafından desteklenmiştir.

## Kaynakça

- [1] K. Nejati, M. Dadashpour, T. Gharibi, H. Mellatyar, and A. Akbarzadeh, *Journal of Cluster Science* 33 (1), 1-16, 2022.
- [2] M.I. Anik, M. Niaz, A. Al Masud, M. Hasan, *Nano Select*, 3 (4), 792-828 2022.
- [3] G.K.Podagatlapalli, S. Hamad, Md. A. Mohiddon and V. R. Soma, *Laser Physics Letters*, 12 (3), 036003, 2015.
- [4] D. Banerjee, M. Akkanaboina and V. R. Soma, *Optical Materials*, 154, 115668, 202

## Doğrusal Olmayan Aktivasyonlu Açık Kuantum Nöron Modeli

Deniz Türkpençe

İstanbul Teknik Üniversitesi, Elektrik Müh. Bölümü, 34467, Maslak İstanbul

Bu çalışma, süperadyasyon fenomeninden ilham alarak doğrusal olmayan bir aktivasyon tepkisine sahip yeni bir kuantum nöron modeli sunmaktadır. Çalışmamızda yüksek spin ( $J \geq 1/2$ ) açısal momentumuna sahip sonda kuantum sistemi (PQS) kullanan model, farklı kuantum durumlarında çoklu bilgi rezervuarları ile etkileşerek hiperbolik tanjant benzeri bir aktivasyon sergilediğini göstermektedir. Master denklem formülasyonu ile sabit durum çözümleri ve gradyan tabanlı öğrenme için bir maliyet fonksiyonu türetilmiştir. Bu yaklaşım, kuantum öğrenme yapılarında durağan durumlar için klasik olmayan kaynakları kullanma potansiyelini vurgulamaktadır.

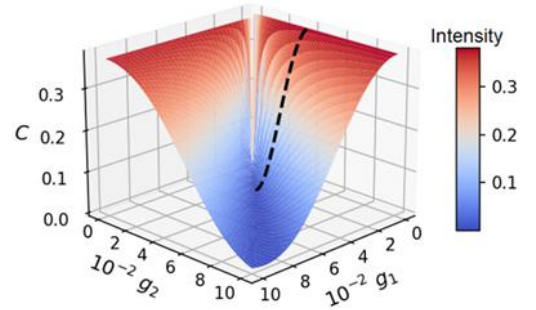
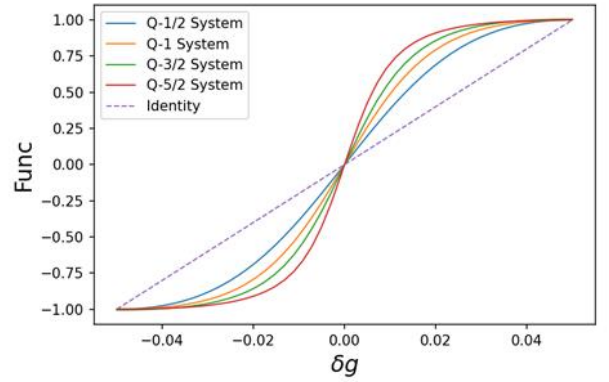
Lineer bir doğaya sahip kuantum teorisi ve bu teoriye dayalı kuantum hesaplama paradigması ile lineer olmayan bir yapıya sahip sinir ağlarının birleştirilmesi problemi önemli bir araştırma alanı oluşturmaktadır. Açık kuantum sistem dinamiğine dayalı disipatif kuantum hesaplama modelinin yaygın kuantum devre modeli ile özdeş işlem kapasitesine sahip olduğu literatürde yer almaktadır [1]. Bu çalışmada, süperadyasyon [2] olgusundan ilham alınan doğrusal olmayan aktivasyona sahip yenilikçi bir kuantum nöron modeli tanıtılmaktadır.

Modelde, yüksek spin açısal momentumu ( $J \geq 1/2$ ) içeren bir sonda kuantum sistemi (PQS), farklı kuantum durumlarındaki bilgi rezervuarları ile etkileşime girerek ikili sınıflandırma gerçekleştiren bir kuantum perceptron sunmaktayız. PQS, bilgi rezervuarları ile çarpışma temelli dissipation süreci sonucunda kararlı bir duruma ulaşır ve bu durum ikili karar çıktısını barındırır. Ayrıca, elde edilen kararlı durum çözümleri ve maliyet fonksiyonu gradyan inişi temelli öğrenme görevlerinde başarılı bir performans göstermiştir.

Nöronun hiperbolik tanjant benzeri bir aktivasyonla yanıt vermesi,  $J$  değeri ile kontrol edilebilmekte ve elde edilen sabit durum çözümleri, gradyan inişine dayalı öğrenme görevlerinde başarılı bir performans sergilemektedir. Bu modelin, kararlı durumda klasik olmayan kuantum kaynaklarını kullanma potansiyeli içermesi, kuantum öğrenme yapılarının geliştirilmesi için umut verici bir yaklaşım sunmaktadır.

## Kaynakça

1. F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. Ignacio Cirac, Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation, *Nature Phys.*, vol. 5, no. 9, pp. 633–636, (2009)
2. Dicke, R. H.. "Coherence in Spontaneous Radiation Processes". *Physical Review*, 93(1), 99-110, (1954)



**Şekil 1:** Geliştirilen açık kuantum perseptron modelinin aktivasyon cevabı ve gradyan inişe dayalı eğitimi. (Üst panel) Kuantum Perseptron sistemin durağan durum miknatıslanmasının hiperbolik tanjant ( $\tanh[\beta_j x]$ ) göre değişimi. Spin açısal kuantum sayısı mavi çizgi için  $J=1/2$  ve  $\beta_{(1/2)}=2.22$ ; turuncu çizgi için  $J=1$  ve  $\beta_{(1/2)}=2.78$ ; yeşil çizgi için  $J=3/2$  ve  $\beta_{(3/2)}=3.33$  ve kırmızı çizgi için  $J=5/2$  ve  $\beta_{(5/2)}=4.10$ 'dur. (Alt panel)  $g_1$  ve  $g_2$  varyasyonuna karşı yüzey tasviri ile maliyet fonksiyonu minimizasyonu. Spin açısal momentum değeri  $J=1$ 'dir. Öğrenme oranı  $\eta = 2.4 \times 10^{-5}$

## Çok Fonksiyonlu Nanoparçacık Sentezi: Manyetik ve Katalitik Etkileşimi

Doğan Kaya<sup>1,2</sup>

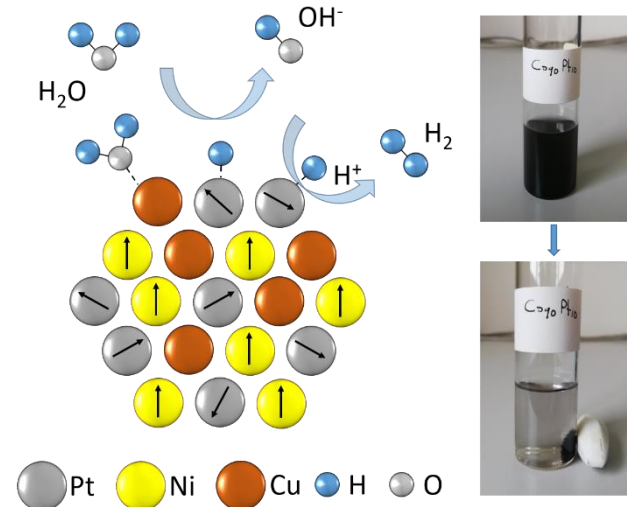
<sup>1</sup>Çukurova Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Sarıçam, 01330, Adana

<sup>2</sup>Çukurova Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İleri Malzemeler ve Nanoteknoloji Anabilim Dalı, Sarıçam, 01330, Adana

Günümüzdeki yüksek enerji talebi ve çevre kirliliği, yüksek verimlilikte, düşük maliyetli, geri dönüştürülebilir ve aynı zamanda çok işlevli özelliklere sahip katalitik ve manyetik nanoparçacıkların (NP'ler) geliştirilmesine olan ihtiyacı artırmaktadır. Özellikle sürdürülebilir enerji üretimi kapsamında hidrojen üretim reaksiyonları (HER) ve oksijen üretim reaksiyonları (OER) için kullanılan elektrokatalizörlerin etkinliğini artırmak büyük önem taşımaktadır. Bu bağlamda, NP'lerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini optimize ederek, maliyet-etkin çözümler sunulması ve bu malzemelerin çevresel etkilerinin en aza indirilirken verimliliğin artırılması hedeflenmektedir. Manyetik ve katalitik NP'ler, hem manyetik geri kazanım potansiyelleri hem de yüksek elektrokatalitik performansları ile büyük ilgi çekmektedir.

Bu çalışmada, Pt metalinin 3d geçiş metalleri Co, Ni ve Cu ile alaşım sentezi, karakterizasyonu ve manyetik ile katalitik özelliklerinden bahsedilecektir. Bu özelliklerin sinerjik potansiyeline vurgu yapılarak, manyetizma, kataliz ve manyetik ayırma alanlarında kullanılacak çok yönlü nanomalzemelerin geliştirilmesi hedeflenmiştir. NP bileşimi ve morfolojisi üzerinde hassas kontrol sağlamak amacıyla, modifiye edilmiş poliyol yöntemi gibi ileri sentez yöntemleri kullanılmıştır.

Bu bağlamda, elde edilen ikili PtNi, PtCo, PtCu ve üçlü PtCuNi [1-4] NP'ler, 10 nm'nin altındaki boyutlarda sentezlenmiş olup, düşük HER voltajı (30,3 mV, RHE) ve düşük OER voltajı (1,36 V, RHE) özellikleri sunulacaktır. Sıcaklığa ve uygulanan manyetik alana bağlı çalışmalar, üretilen NP'lerin manyetik özelliklerini ortaya koyarken, oda koşullarında 10 emu/g üzerinde elde edilen toplam manyetizasyon değeri, NP'lerin çevreden küçük bir miktarda geri kazanılmasında etkin bir değer olduğunu göstermiştir.



**Şekil 1:** Üçlü metal PtNiCu NP üzerinde hidrojen gazı eldesi mekanizması. Su içinde homojen dağılmış CoPt NP'lerin bir mıknatıs yardımı ile geri dönüştürülmesi.

### Kaynakça

1. I.B. Isik, D. Kaya, A. Ekicibil, F. Karadag, "One-pot synthesis of multifunctional ternary PtCuNi alloys: Magnetic properties and efficient hydrogen evolution reaction in alkaline media", *Electrochim. Acta*, **477**, 143794, (2024).
2. D. Kaya, I. Demiroglu, I.B. Isik, H.H. Isik, S.K. Çetin, C. Sevik, A. Ekicibil, F. Karadag, "Highly active bimetallic Pt-Cu nanoparticles for the electrocatalysis of hydrogen evolution reactions: Experimental and theoretical insight", *Int. J. Hydrogen Energy*, **48** (95), 37209-37223, (2023).
3. D. Kaya, H.H. Isik, I.B. Isik, I. Adanur, Y. Wang, M. Akyol, F. Karadag, A. Ekicibil, "Magnetically separable low Pt substituted Co nanoparticles: Investigation of structural, magnetic, and catalytic properties", *Physica B: Condensed Matter*, **632**, 413765, (2022).
4. I.B. Isik, D. Kaya, H.H. Isik, A. Ekicibil, F. Karadag, "Bifunctional bimetallic PtNi, PtCu, and NiCu nanoparticles: Electrocatalytic activities for hydrogen evolution reaction and magnetic properties", *Materials Science and Engineering: B*, **300**, 117081, (2024).

# Altıgen Örgülerde Harmonik Yaklaşım Altında Kiral Fononlar

Ege Özgün<sup>1</sup>, Fatih Özaydın<sup>2,3</sup>, Tuğrul Hakioglu<sup>4</sup>

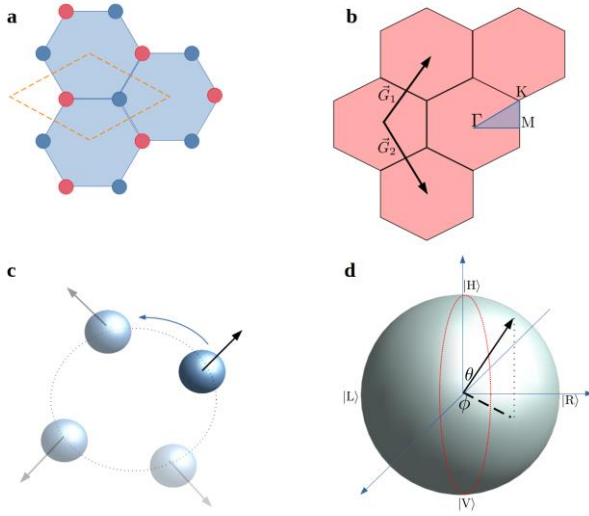
<sup>1</sup>Hacettepe Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06800, Ankara

<sup>2</sup>Tokyo International University, Institute for International Strategy, 170-0013, Tokyo, Japonya

<sup>3</sup>Nanoelectronics Research Center, Kadıköy, İstanbul

<sup>4</sup>İstanbul Teknik Üniversitesi, Enerji Enstitüsü ve Fizik Mühendisliği Bölümü, 34467, İstanbul

Kiral fononların teorik olarak öngörülmesinin hemen ardından deneysel olarak gözlemlenmesiyle konuya olan ilgi artmıştır. Bu çalışmada, harmonik yaklaşım altında, altıgen örgüye sahip farklı malzemeler için yüksek simetri noktalarında kiral fonon modlarının genel yapısı incelenmiş ve tanımlanan eliptiklik parametresi çerçevesinde yüksek simetri noktalarına ek olarak yüksek simetri hatlarında da kiral yapıya sahip olan ve olmayan fonon modları hesaplanmıştır.



**Şekil 1.** Gerçek uzayda (a) ve ters örgü uzayında (b) altıgen örgülü malzemelerin genel yapısı. (c) Kiral fononlar. (d) Eliptiklik parametresinin Bloch küresinde gösterimi

Kiral fonon modlarının altıgen örgülerde teorik olarak ortaya atılmasının [1] hemen üç sene ardından kiral fononlar deneysel olarak gözlemlenmiştir [2]. Basit bir kütle-yay modeli çerçevesinde ve parabolik bir potansiyel yaklaşımı altında indirgenmiş Brillouin bölgesinin etrafında, yani yüksek simetri noktaları ve hatlarında kiral fonon modlarını göstermek mümkündür.

## Kaynakça

- 1 L. Zhang ve Q. Niu, "Chiral phonons at high-symmetry points in monolayer hexagonal lattices" Phys. Rev. Lett., **115** 115502 (2015).
- 2 H. Zhu v. d., "Observation of chiral phonons" Science, **359** 579 (2018)

Bu çalışma kapsamında birinci, ikinci ve üçüncü yakın komşular hesaba katılarak bahsedilen harmonik yaklaşım altında Şekil 1'de (a-b) gerçek uzayda ve ters örgü uzayındaki genel yapısı verilmiş olan altıgen örgülü yapılar için fonon modları hesaplanmıştır. Yapılan hesaplar Grafen, altıgen Bor Nitrür (BN), tek katmanlı Bizmut (Bi) ve tek katmanlı Kurşun Telür (PbTe) gibi bir çok farklı malzemeyi kapsamaktadır.

Şekil 1c'de kiral fonon modları gösterilmiştir. Fonon modlarının farklı k-noktalarında ve farklı bantlarda lineer, dairesel ve eliptik polarizasyon durumlarının detaylı incelenmesi adına bir eliptiklik parametresi tanımlanmıştır. Bu parametrenin indirgenmiş Brillouin bölgesinde gösterilmesi, farklı malzemeler için kiral fonon yapılarının karşılaştırmalı olarak incelenmesinde kolaylık sağlamıştır. Eliptiklik parametresinin Bloch küresi üzerinde gösterimi de (Şekil 1d) farklı malzemeler ve farklı bantlar için kiral fonon modlarının karşılaştırılmasında kullanılabilecek başka bir gösterim biçimi olarak sunulmuştur.

## Çok katmanlı ve düzensiz iki-boyutlu yapılarda yük taşınımı: Rejimler arası hiyerarşinin kırılması ve yeni bir ölçekleme kuralı

Hâldun Sevinçli

Bilkent Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800 Ankara

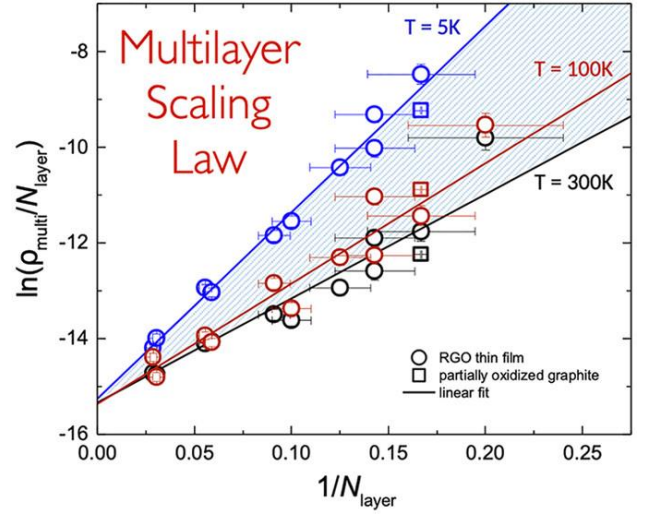
Grafen oksit ve onun ısı işlem ile indirgenmiş hali hem temel bilim hem de uygulamalar açısından yenilikler vaat eden malzemelerdir. Bu sunumda, kuvvetli düzensizlik içeren çok-katmanlı indirgenmiş grafen oksit yapılarda iletkenliğin kalınlıkla değişimine dair deneysel verilerden, kuantum mekaniksel benzetim yöntemleriyle elde ettiğimiz sonuçlardan ve Thouless ilişkisini kullanarak elde ettiğimiz ölçekleme kuralından bahsedilecektir. Hesaplarımızda, iletkenliğin düzensizlik miktarına göre kalınlık bağımlılığının zıt davranışlar gösterdiği gözlenmiştir. Buna ek olarak, çok katmanlı yapılarda difüzyon ile lokalizasyon arasındaki hiyerarşinin kırıldığı durumlar ortaya çıkmaktadır. Saptanan bu yeni rejimler, katman içi ve katmanlar arası çiftleşme matris elemanları ve bunların ortalama-serbest-yol, lokalizasyon uzunluğu ve düzlemler arası difüzyon uzunluğu ile ilişkileri açısından açıklanacaktır. Elde ettiğimiz ölçekleme bağıntısının deneylerle karşılaştırması yapılacak ve kuralın grafen oksit dışı malzemelerde de geçerli olduğu gösterilecektir.

İki-boyutlu yapıların taşınım özellikleri üç-boyutlu yığık yapılardan temel farklılıklar gösterirler. Düzensizlik varlığında taşınım özellikleri daha da farklılaşırlar. Çok-katmanlı düzensiz van der Waals yapılarda ise taşınım, üç-boyutlu yapıların karakteristiklerine yakınsamak bir tarafa, çok daha belirgin farklılaşmalar sergilemektedir.

Bu farklılıklar, yakın süre önce Kovtun ve arkadaşlarının deneylerinde indirgenmiş grafen oksit özelinde somutlaşmıştır. [1] Özellikle, iletkenliğin katman sayısına bağımlılığına dair elde edilen sonuçları mevcut modeller ile açıklamak mümkün olmamıştır. Bu sistemlerin gerçekçi bir modellemesini yapabilmek için  $10^6$  ve daha fazla sayıda atom içeren sistemler kurgulanmış ve bunların taşınım özellikleri kuantum mekaniksel yöntemlerle incelenmiştir. Kusur yoğunluğuna bağlı olarak katmanlar arası çiftleşmenin iletkenliği azaltıcı veya artırıcı etkileri gözlenmiştir. Yapılan detaylı analizler sonucunda deneysel sonuçların katmanlar arası çiftleşme ve düzensizliğin ortak etkisi olduğu ortaya konmuştur. [2]

Bu çalışma Flag-Era JTC 2017 çerçevesinde desteklenen ‘Modelling Charge and Heat transport in 2D-materials based Composites – MECHANIC’ projesi kapsamında ve TÜBİTAK (117F480) desteğiyle gerçekleştirilmiştir. Hesaplamaların bir kısmı TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve

Grid Hesaplama Merkezi’nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.



**Şekil 1:** Çok katmanlı indirgenmiş grafen oksit yapıların öz-direncinin katman sayısı ile ölçeklenmesi  $\ln(\rho_{\text{multi}}/N_{\text{layer}})$  ve  $1/N_{\text{layer}}$  eksenlerinde gösterilmektedir. Referans 2’deki deneysel veriler dairelerle kısmen okside olmuş grafene dair veriler karelerle gösterilmiştir. Ölçekleme bağıntısı farklı sıcaklıklardaki verilerde lineer bir ilişki sergilemektedir. Şekil, 2 numaralı referanstan alınmıştır.

### Kaynakça

1. A. Kovtun, A. Candini, A. Vianelli, A. Boschi, S. Dell’Elce, M. Gobbi, K.H. Kim, S. Lara Avila, P. Samorì, M. Affronte, A. Liscio, V. Palermo, “Multiscale Charge Transport in van der Waals Thin Films: Reduced Graphene Oxide as a Case Study” *ACS Nano* **15**, 2654 (2021).
2. M.N. Çınar, A. Antidormi, V-H. Nguyen, A. Kovtun, S. Lara-Avila, A. Liscio, J-C. Charlier, S. Roche, H. Sevinçli, “Toward Optimized Charge Transport in Multilayer Reduced Graphene Oxides” *Nano Letters* **22**, 2202 (2022).

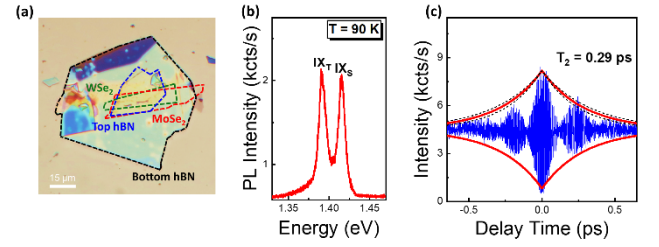
## TMDC Heteroyapılarda Katmanlar Arası Eksitonların Kuantum Vuru Spektroskopisi

Mehmet Atif Durmuş ve İbrahim Sarpkaya

Bilkent Üniversitesi, UNAM, 06800, Ankara

Yarı iletken geçiş metali dikalkojenit (TMDC) heteroyapılarda oluşan uzun ömürlü katmanlar arası eksitonlar (IX), sahip oldukları heyecan verici optik ve elektronik özelliklerinden dolayı son zamanlarda yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Sahip oldukları ince yapı dahil birçok fotofiziksel özellik verimli optoelektronik, vaditronik ve kuantum fotonik aygıtların geliştirilmesi amacıyla bu çalışmalarda ele alınmıştır. IX'lerin spin-singlet ( $IX_S$ ) ve spin-triplet ( $IX_T$ ) adı verilen iki farklı spin durumunun varlığı da kuramsal çalışmalarda öngörülmüş ve yakın zamanda deneysel olarak doğrulanmıştır. Bununla birlikte, IX'lerin yukarıda belirtilen uygulama alanlarında etkin bir şekilde kullanılabilmesi için, bu durumlar arasında herhangi bir etkileşim veya korelasyon olup olmadığının bilinmesi gerekmektedir. Bu konuşmada,  $WSe_2$ - $MoSe_2$  heteroyapısında ortaya çıkan spin-singlet ve spin-triplet IX'leri arasında

koherent bir etkileşimin varlığını kuantum vuru spektroskopisini [1] kullanmak suretiyle göstereceğiz. IX'lerin iki spin durumu arasındaki koherent bağlanmanın açık bir işareti olarak kuantum vuru sinyalleri deneysel olarak ilk defa grubumuz tarafından gözlemlendi [2].



**Şekil 1:**  $WSe_2$ - $MoSe_2$  heteroyapısında bulunan katmanlar arası eksitonlar ve PL özellikleri. (a) hBN ile kapsüllenmiş  $WSe_2$ - $MoSe_2$  heteroyapısının optik mikroskop görüntüsü. (b) 90 K'de ve  $400 \mu W$  pompa gücü altında 532 nm sürekli dalga lazer uyarımı ile kaydedilen  $IX_T$  ve  $IX_S$ 'nin PL spektrumları. (c) Hem  $IX_T$  hem de  $IX_S$  PL emisyonlarını aynı anda bir Michelson interferometresine göndermek suretiyle elde edilen kuantum vuru interferogramı.

**Teşekkür:** Bu çalışma TÜBİTAK tarafından Proje No: 121F138 ve 118C402 kapsamında desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. J. Erland and I. Balslev, "Theory of quantum beat and polarization interference in four-wave mixing", *Physical Review A*, **48**, R1765(R) (1993).
2. M.A. Durmuş and I. Sarpkaya, "Quantum Beats between Spin-Singlet and Spin-Triplet Interlayer Exciton Transitions in  $WSe_2$ - $MoSe_2$  Heterobilayers", *Nano Letters*, **24**, 5767–5773 (2024).

Malzeme Enformatiği ile XYB<sub>14</sub> Kristal Ailesinin Kararlılığının İncelenmesi

Irmak Sargin, Uğur Rıza Akbulut

Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Metalürji ve Malzeme Mühendisliği 06800, Ankara

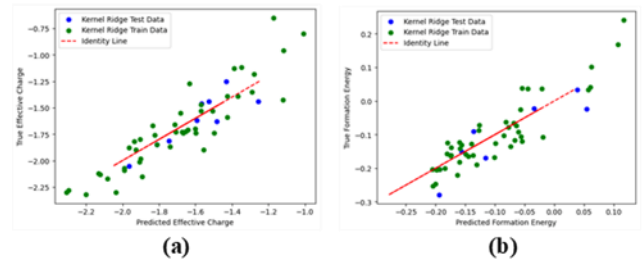
Bor açısından zengin XYB<sub>14</sub> kristal ailesi, geniş bant aralığı, yüksek sertlik, mükemmel termal kararlılık ve yüksek Seebeck katsayısı ile yüksek sıcaklık termoelektrik malzemesi olarak potansiyel bir adaydır. Özellikle AIYB<sub>14</sub> bileşimi büyük bir ilgi alanıdır. Termoelektrik ve termomekanik özelliklerle ilişkili olarak AIYB<sub>14</sub> ve kristal ailesinin diğer üyelerindeki bağlanmayı incelemek için birçok birinci ilke hesaplaması gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada, bu ailedeki bileşiklerin kararlılığını tahmin etmek amacıyla literatürden alınan veriler malzeme enformatiği yöntemleriyle analiz edilmiştir. Gözetimli, çok değişkenli bir regresyon modeli, sadece yığın kimyasal özelliklere dayalı olarak Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi sonuçlarını tahmin ederek bileşim-kararlılık ilişkilerini anlamak için kullanılmıştır. Bu yöntem YFT'den daha az hassas olmasına rağmen, 2 milyon kat daha hızlıdır ve gerçekleştirilmesi gereken YFT hesaplamalarının miktarını azaltmak için bir yol haritası sağlamıştır. Çalışmada 49 element ve 16 farklı stokiyometri ile 38,416 farklı bileşik haritalanmış ve kararlı bileşimler belirlenmiştir. Ayrıca, bu sonuçlara dayanarak yığın özellikler ile kararlılık arasındaki ilişki analiz edilmiştir. Malzeme enformatiği yöntemi ile YFT'nin birleştirilmesinin, malzeme yapı-özellik ilişkisini anlamak için daha hızlı bir yol sağlayabileceği de gösterilmiştir.

Bor açısından zengin boritler, mekanik, tribolojik ve termal özellikleri nedeniyle öne çıkan malzemelerdir. Bu özelliklerin temel nedeni, bor ikosahedron ağlarıdır [1]. Kimyasal formül XYB<sub>14</sub> olup, X ve Y elementleri metallerdir. Her ikosahedron iki elektron eksiklidir. X ve Y atomları ikosahedrona elektron sağlar; dolayısıyla yapının kararlılığı, X ve Y'den ikosahedronlara yapılan yük transferine önemli ölçüde bağlıdır [2]. Yük transferi etkin yük ile nicel olarak ifade edilir. Yüksek bor içerikli boritlerin etkin yükü ve oluşum enerjileri yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) hesaplamaları ile incelenmektedir. Ancak bu yapının karmaşık yapısı bu hesaplamaları maliyetli hale getirmekte ve umut verici yeni bileşimlerin geliştirilmesini sınırlandırmaktadır.

Bu çalışmada bilimsel literatürden toplanan veri kümesi elementlerin yığın kimyasal özelliklerini, YFT ile hesaplanmış oluşum enerjilerini ve etkin yükleri kapsamaktadır. Bu veri kümesi her bileşim için literatürde var olmayan etkin yükün hesaplanması amacı ile öncelikle koreslasyon analizi ile incelenmiştir ve boyut azaltımı amacıyla birbiriyle yüksek korelasyona sahip özellikler elenmiştir. Sonuç olarak, etkin yükün tahmini için altı parametre kullanılmıştır. Bu özellikler, daha normal dağılımlara ulaşmak amacıyla ön işleme tabi tutulmuş ve ardından normalize edilmiştir. Farklı modeller test edilmiş ve en yüksek doğruluk Kernel Ridge regresyon ile elde edilmiştir. Hesaplanan etkin yük değerleri de veri setine eklenmiş ve

oluşum enerjisi tahmini için aynı adımlar izlenmiştir. Bu tahmin için en iyi model yine Kernel Ridge olmuştur.

Tahminlerin doğruluğu, ortalama mutlak hata (MAE) ile ölçülmüştür. Etkin yük modeli 0.1027 ortalama mutlak hata verirken, oluşum enerjisi modeli 0.03427 eV/atom ortalama mutlak hata sağlamıştır. Şekil 1, hem etkin yük hem de oluşum enerjisi için tahmin edilen ve gerçek değerlerin karşılaştırmasını göstermektedir. Bu modeller daha sonra 38,416 farklı bileşim için oluşum enerjisi hesaplanmasında kullanılmış ve oluşum değerlerini etkileyen faktörler incelenmiştir. Bu inceleme sonucunda en yüksek kararlılığın, literatürdeki etkin yük değerleriyle örtüşmediği ve bunun sebebinin literatürdeki limitli kompozisyon çeşitliliği olduğu görülmüştür.



Şekil 1: Tahmin edilen değerlerin gerçek değerler ile karşılaştırılması a) Etkin yük, b) Oluşum enerjisi

## Kaynakça

1. Kölpin, Helmut, et al. "Phase stability and elastic properties of XMgB<sub>14</sub> studied by ab initio calculations" Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics 78.5 (2008): 054122.
2. Kölpin, Helmut, et al. "Phase stability of AIYB<sub>14</sub> sputtered thin films." Journal of Physics: Condensed Matter 21.35 (2009): 355006.

## There is plenty of room at the bottom: in-chip nanofabrication

Onur Tokel

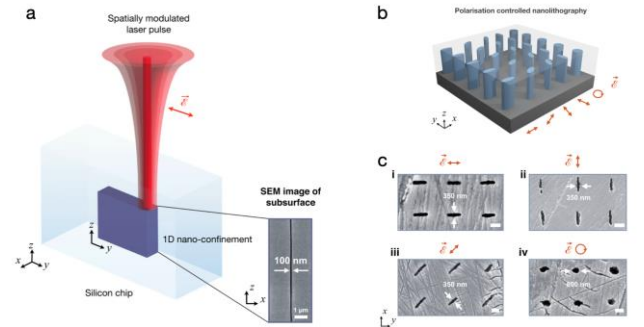
Bilkent Üniversitesi- Fizik Bölümü, 06800, Ankara

Günümüzde yarı-iletken temelli nano-teknolojilerin ölçeklenmesini karakterize eden *Moore* yasası yavaşlamış, *Feynman*'ın nano-teknolojiye atfedilen meşhur sözü, "there is plenty of room at the bottom" yonga yüzeyi ile sınırlı kalmıştır. Burada bu diktayı sözlük anlamı ile alarak, yonga derinliklerinde nano-ölçekli lazer etkileşimlerinin ve üretimin mümkün olabileceği, ve bu yeni paradigmanın ortaya koyabileceği olası nano-teknolojiler tartışılacaktır.

Silisyum (Si) modern teknolojinin temel taşlarından biridir. Bu kritik malzemede nano-üretim konvansiyonel litografi ile mümkün olabilmektedir. Fakat mevcut yaklaşımlar pahalı ve kompleks üretim adımlarını içermekte, ve yüksek miktarda yatırım gerektirmektedir. Buna ilaveten, konvansiyonel nano-üretim tamamen yonga yüzeyi ile sınırlıdır. Yeni ortaya çıkan lazer-temelli yonga-içi üç-boyutlu litografi ise bu problemleri eş-zamanlı olarak çözmek hedefi ile öne çıkmaktadır [1]. Bu yeni paradigmada yonganın şeffaf olduğu dalga-boylarında, nanosaniye ya da ultrahızlı atımlara sahip lazer demetleri malzeme yüzeyinde bir değişim yapmadan yonga derinliklerine ilerler, ve doğrusal-olmayan etkileşimleri tetiklerler [1, 2]. Lazer kendinden odaklanma ile enerjisini lokal olarak malzemeye geçirerek kristal yapısını değiştirir. Bu teknikler ile 1- $\mu\text{m}$  çözünürlüğe ulaşmak ve optik cihaz üretmek mümkündür [2].

Yonga-içi yazma özgün optik etkilerin de kapısını aralamaktadır. Bir örnek olarak literatürde ilk defa lazer-ile-yazılmış gömülü alan çevresinde *çift-kırınım* etkisini gözledik [3]. Bu etkiyi temel alarak yine ilk kez yonga içerisinde özgün dalga-plakalarının üretimini mümkün olabileceğini önerdik [3] ve bu özgün optik elemanların yüksek verim ile çalıştıklarını deneysel olarak teyit ettik.

Bu ilerlemeler Gauss tipi lazer demetleri ile elde edilmiştir. Bununla ilişkili olarak lazerin uzaysal dağılımı enerjinin yonga içerisinde odaklanmasına etki etmektedir [1]. Burada uzaysal demet desenleyici (*Spatial Light Modulator* - SLM) denen holografik maskeler kullanarak, demeti Bessel türü dağılıma çevirdik. Bessel demetinin kritik saçılmaya dayanıklı doğası sayesinde etkileşimin son derece sınırlı bir hacimde gerçekleşebileceğini başarı ile gösterdik, buna ek olarak lazer kutuplaması üretimde bir parametre olarak ortaya koyduk (Şekil 1) [4].



**Şekil 1:** (a) Desenlendirilmiş lazer demetleri ile yonga içinde üç-boyutlu nano-ölçekli yazma [4]. (b) Lazer kutuplaması kontrolü ile yonga içi nano-litografi [4].

Bu heyecan verici sonuçlar ile Si yonga içerisinde gömülü olarak 100-nm seviyesine kadar inilmiştir. Sonuçta *ultra-yüksek çözünürlükte yonga-içi direk lazer yazma* başarı ile gösterilmiştir [4].

### Kaynakça

1. O. Tokel *et al.* "In-chip microstructures and photonic devices fabricated by nonlinear laser lithography deep inside silicon", *Nature Photonics*, 11, 639, (2017).
2. M. Chambonneau, D. Grojo, O. Tokel, F. Ö. Ilday, S. Tzortzakakis, S. Nolte, "In-volume laser direct writing of silicon", *Laser & Photonics Reviews*, 2100140, (2021).
3. A. Saltik, O. Tokel, "Laser-written wave plates inside the silicon enabled by stress-induced birefringence", *Optics Letters*, 49, 1, 49, (2024).
4. R. A. Sabet, A. Ishraq, A. Saltik, O. Tokel, "Laser nanofabrication inside silicon with spatial beam modulation and anisotropic seeding", *Nature Communications*, 15: 5786 (2024).

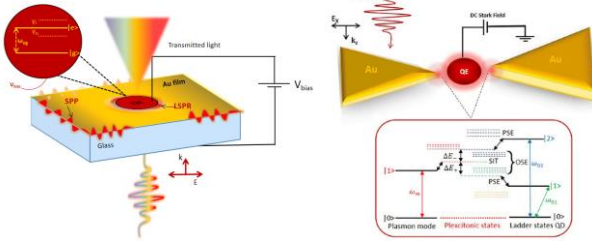


## Görünür Dalgaboylarında Aktif Ayarlanabilen Plazmonik Ramazan Şahin

Akdeniz Üniversitesi, Fizik Bölümü, 07508 Antalya  
Türkiye Ulusal Gözlemevleri, TUG, 07058 Antalya

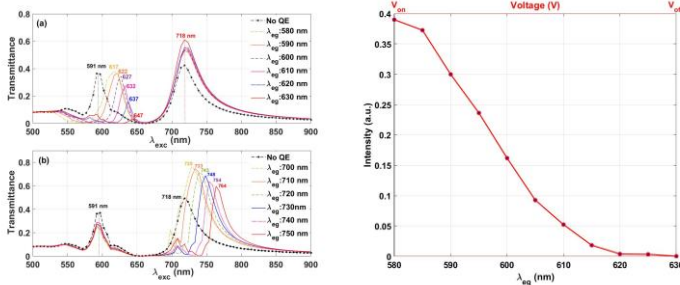
Fotonik entegre devrelerdeki (PIC) bileşenlerin elektromanyetik spektrumun özellikle görünür dalgaboylarında aktif kontrolü, programlanabilir cihazların geliştirilmesi için esastır. Bir fotonik cihazın çalışma bant aralığı üretildikten sonra ayarlanamaz. Burada, optik dalga boylarında (i) ayarlanabilir olağanüstü optik iletim (EOT) ve (ii) ayarlanabilir kendiliğinden foton emisyonu (SPE) için fotonik sistemlerin elektrikle kontrolünü gösteriyoruz.

Her iki düzende de elektro-optik ayar, voltajla ayarlanabilir kuantum yayıcı (QE) aracılığıyla EOT sensöründe ve plazmon-yayıcı çiftleşmiş sistemde uyarılan plazmon salınımlarının dinamiklerinin modüle edilmesiyile sağlanmaktadır.



Şekil 1: (L) EOT yapısının şematik diyagramı ve (R) üç seviyeli QE ile hibrit plazmonik.

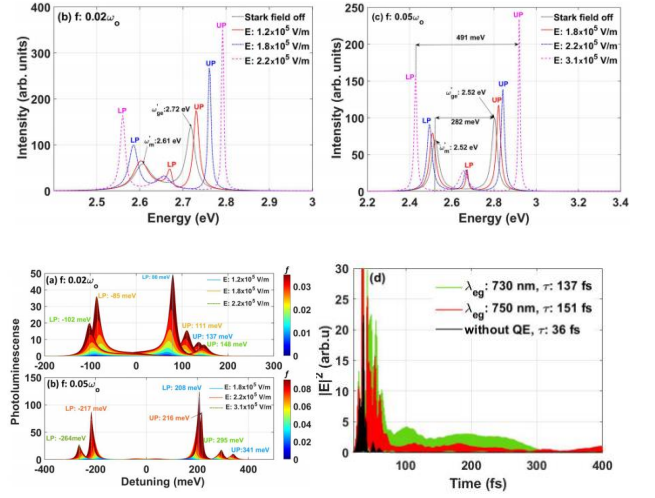
Plazmon modlarının spektral ve zamansal evrimini iki farklı yaklaşımla analiz ediyoruz. Analitik yaklaşımda, bağlı harmonik osilatör modeline dayalı bir teorik çerçeve geliştiriyor ve QE'nin varlığında plazmonik ve plexitonik durumların tutarlı kontrolünü, ayrıca QE'nin rezonans frekansını harici voltaj önyargısı ile değiştirerek bu durumların spektral modülasyonunu gösteriyoruz. Bu şekilde, EOT sinyalinin çalışma frekansı, üç büyüklük mertebesine karşılık gelen bir modülasyonla,  $10^{-4}$  ile 0.4 arasında sürekli olarak ayarlanabilir [1].



Şekil 2: EOT cihazından farklı seviye aralığına sahip QE için optik iletkenlik.

### References

1. H.Asif, A. Bak, M. E. Taşgın and R. Sahin, "Voltage-controlled extraordinary optical transmission in the visible regime", *Physical Review B*, 109, 125425 (2024).
2. H.Asif and R. Sahin, "Modulating the temporal dynamics of nonlinear ultrafast plasmon resonances", *Journal of Optics*, 24, 045003 (2022).
3. H.Asif and R. Sahin, "Stark-control of plexitonic states in incoherent quantum systems", *Physical Review A*, 110, 0237313 (2024).



Şekil 3: (b,c) Plexitonik durumların Stark ayarı ve (a,b) VIS rejiminde ayarlanabilir fotoluminesans. (d) Zaman domeninde plazmon salınımlarının güç spektrumu.

Hesaplamalı yaklaşımda, plazmon modlarının zamana bağlı uzaysal ve zamansal dinamiklerini sonlu farklar zaman alanı yöntemiyle (FDTD) inceliyoruz. Ayrıca, uzun ömürlü QE'nin varlığında hızlı bozulan yüzey plazmonlarının ömür uzatımını tartışıyoruz [2]. Bunun yanı sıra, rezonant etkileşimdeki plazmon-yayıcı sistemi, iki seviyeli QE'de Stark etkisiyle indüklenen hibridizasyon nedeniyle plexitonik durumların yol girişimini sergilemektedir [3].

Önerilen fotonik sistemlerin aktif ayarlanmasına dair yöntemimiz, isteğe bağlı olarak voltaj kontrollü EOT cihazı sunmaktadır. Diğer taraftan, plexitonların Stark ayarı, kuantum sistemlerde eş-fazlılığı artırır ve optik bantlarda tek foton yayıcılarının (SPE) açma/kapama anahtarlamasını tetikler. Bu tür ayarlanabilir sistemler, kuantum hesaplama, dolanıklık ve bilgi işleme gibi çeşitli uygulamalar için PIC teknolojisinde uygulanabilir ve kompakt elemanlar olarak öne çıkmaktadır.

## Metamaterials and nanophotonics open up new avenues for light manipulation Technologies

Yoshiaki Kanamori

Department of Robotic, Graduate School of Engineering, Tohoku University, 980-8579 Sendai, Japan

Micro/nano processing technology plays a crucial role in the advancement of both academic research and the industrialization of metamaterials and nanophotonics. There is a strong demand for the development of micro/nano fabrication techniques that can produce metamaterials and nanophotonic devices tailored to specific needs. In this paper, I explore various metamaterials and nanophotonic devices developed by my research group, such as dielectric *Mie* scattering sphere metamaterials for visible light, MEMS-driven silicon waveguides for optical communication systems, micro-electromechanical-systems (MEMS)-driven electromagnetically induced transparency metamaterials for 6G communications, MEMS-driven ladder-type metamaterials, and heat-shielding metamaterials, along with their respective microfabrication technologies.

Since the year 2000, publications and communities focused on metamaterials have surged. Notably, 2000 was the year D. R. Smith demonstrated a negative refractive index in the GHz band [1]. This breakthrough, which had been theoretically predicted, brought the concept of an invisibility cloak closer to reality and propelled metamaterials into a prominent and rapidly growing academic field, attracting numerous researchers. Fabrication is key for showcasing metamaterials' unique optical properties. A major challenge is developing precise microfabrication technologies. Integrating metamaterials and nanophotonics into society requires robust micro- and nanofabrication techniques. This paper discusses the metamaterials and nanophotonic devices developed by my research group, along with their microfabrication technologies.

### I. Dielectric *Mie* scattering sphere metamaterials

Dielectric metamaterials for visible light and a hydrogen annealing technique for fabricating silicon nanospheres have been developed [2]. These silicon nanospheres can be precisely arranged by size and location, with potential applications in high-resolution image sensors, structural colors, ultra-compact spectrometers, and biosensors.

### II. MEMS-driven Si waveguide

In optical communication systems, silicon photonics is crucial for enhancing optical integrated circuit performance, necessitating

active devices. An active wavelength selective filter using a silicon microdisk resonator and MEMS-driven movable silicon nanowire waveguides have been fabricated [3]. Hydrogen annealing has significantly improved the resonator's Q value.

### III. MEMS-driven reconfigurable metamaterials

To realize 6G communications, a wavelength-selective reconfigurable metamaterial has been developed. MEMS-driven electromagnetically induced transparency metamaterials can modulate the transmittance and phase of THz waves [4]. Reconfigurable ladder-shaped metamaterials, integrated with a MEMS cantilever array, can function as a shutter or phase modulator [5].

### IV. Heat-shielding metamaterials

Traditional heat-shielding glass blocks radio waves in the 5G/6G communication bands, causing issues for wireless communication on smartphones and mobile devices. To address this, a nano-periodic aluminum heat-shielding metamaterial has been developed [6]. Applied to windows, this metamaterial reflects heat-causing near-infrared wavelengths while allowing 5G/6G radio waves and visible light to pass through. It features a cross-shaped aluminum structure patterned at 460 nm on a quartz substrate. This technology could enhance heat-shielding windows for buildings and vehicles, helping to manage power supply and rising temperatures indoors and in cars.

A part of this work was supported by JST, CREST Grant Number JPMJCR2102.

### References

1. D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, (2000) 4184–4187.
2. T. Okatani, Y. Abe, T. Nakazawa, K. Hane, and Y. Kanamori, *Opt. Mater. Express* **11**, (2021) 189-197.
3. T. Okatani, Y. Sato, K. Imai, K. Hane, and Y. Kanamori, *J. Vac. Sci. Technol. B* **39**, (2021) 030602.
4. Y. Huang, K. Nakamura, Y. Takida, H. Minamide, K. Hane, and Y. Kanamori, *Sci. Rep.* **10**, (2020) 20807.
5. Y. Huang, T. Okatani, N. Inomata, and Y. Kanamori, *Appl. Phys. Lett.* **122**, (2023) 051705.
6. M. V. Nguyen, T. Okatani, and Y. Kanamori, *Appl. Opt.* **62**, (2023) 7411-7419.

## POSTER SUNUMLARI

## Transmission control of THz waves using gap-variable cut-wire-metamaterials

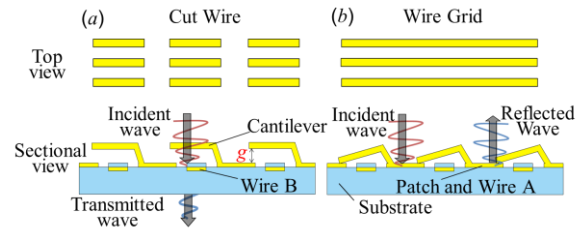
Arisa Fujimoto, Ying Huang, and Yoshiaki Kanamori

*Department of Robotics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan*

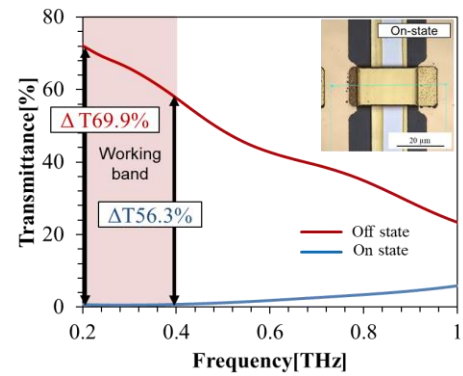
In recent years, research on sixth-generation mobile communication systems (6G) has been underway in many countries around the world. 6G explicitly uses terahertz (THz) waves. In order to realize a wide variety of optical elements in the THz region, it is necessary to develop new materials with a wide range of optical properties. However, the problem is that there are few optical materials suitable for THz waves. Moreover, an active shutter that actively manipulates the transmission and blocking of THz waves is also required. In this research, we proposed a THz-wave-transmittance-modulated metamaterial by integrating a cantilever structure with a cut-wire-metamaterial. We fabricated two static devices, namely, On and Off states, and evaluated the modulation of transmittance due to changes in the gaps of the metamaterial.

A metamaterial is an artificial optical material in which unit elements are arranged in a sufficiently small amount compared to the wavelength of electromagnetic waves.<sup>[1]</sup> When the unit element resonates with an electromagnetic wave of a specific frequency, it exhibits a unique optical response within that frequency that cannot be obtained with natural materials. By designing the shape and dimensions of meta-atoms, its optical properties can be controlled, making it suitable for the manipulation of electromagnetic waves. In particular, the tuning method using Micro-Electro-Mechanical Systems can convert electrical energy into mechanical motion and directly deform the structure of the metamaterial, so that THz wave modulation with high contrast can be realized.<sup>[2]</sup> In this research, we propose a THz-wave-transmittance-modulated metamaterial by integrating a cantilever structure with a cut-wire-metamaterial. We fabricate two static devices, namely, On and Off states, and evaluate the modulation of transmittance due to changes in the gaps of the metamaterial.

A device to be fabricated in this research consists of an SiO<sub>2</sub> substrate with a periodic arrangement of Au patches, electrodes, and cantilevers. There are two electrodes called Wire A and Wire B. A patch is formed in the same plane as Wire A, and the cantilever is electrically connected to Wire A. When the gap  $g$  between a tip of the cantilever and the patch is large enough, it is considered to be in the Off state. At this time, the whole device behaves as a cut wire, resulting in high transmittance (Fig. 1(a)). In the On state after driving voltage is applied, the cantilever is attracted to Wire B by electrostatic attraction, and the tip touches the adjacent patch, acting as a wire grid polarizer. At this time, when a THz wave is incident with a polarization direction parallel to the longitudinal direction of the cantilever, the THz wave is blocked (Fig. 1(b)). The structural dimensions were designed numerically based on rigorous coupled-wave analysis so that the contrast of transmittance became clear at the frequency of 0.2–0.4 THz in the 6G communication band, and the electrostatic attraction and applied



**Fig. 1** Device conceptual diagram.(a)Off and (b)On states.



**Fig. 2** Measured transmittance spectra.

voltage acting between the wiring and the cantilever were taken into account.

We fabricated two static devices with  $g = 2.443$  and  $0.124 \mu\text{m}$  in the Off and On states, respectively. An optical microscope image (top view) of the fabricated cantilever in the On state is shown in the inset of Fig. 2. Transmittance spectra was measured by THz-TDS for each device. As shown in Fig. 2, in the Off state, transmittance of 57.1% or more is obtained in the working band. In the On state, transmittance of 0.766% or less is observed in the working band. At 0.2 THz, the maximum transmittance modulation  $\Delta T$  of 69.9% is obtained.

In summary, we confirmed that the transmittance can be greatly modulated by changing the gap  $g$  of the metamaterial and switching between the Off and On states. A part of this work was supported by JST CREST (Grant No. JPMJCR2102).

## References

1. D. R. Smith, J. B. Pendry, and M. C. K. Wiltshire, *Science* **305** (5685), 788-792 (2004).
2. Y. Huang, T. Okatani, N. Inomata, and Y. Kanamori, *Optics Express* **31**(18), 29744-29754 (2023)

## 2D Janus XSSe (X = Sn ve Ti) Yapılarının 1T ve 2H Fazlarında Fonksiyonelleştirilmesi

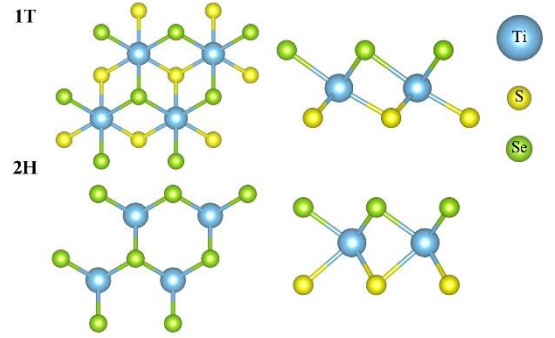
Ata Berk Öztürk<sup>1</sup>, Mert Çağlar Bulduk<sup>1</sup>, Aybey Moğulkoç<sup>2</sup>, Yeşim Moğulkoç<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara

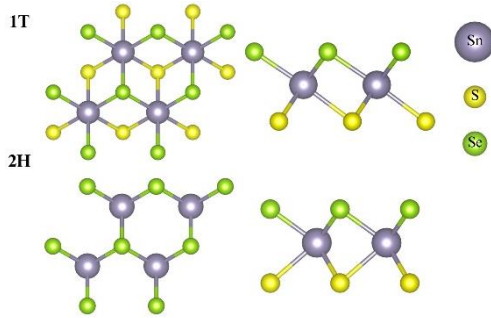
<sup>2</sup>Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06100, Ankara

Bu çalışmada, yeni nesil iki boyutlu Janus malzemelerden olan SnSSe ve TiSSe'nin yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) ile fonksiyonelleştirilmesi incelenmiştir. 2D Janus malzemeler, asimetric yapılarından dolayı enerji depolama, nanoelektronik ve fotonik gibi alanlarda benzersiz uygulama potansiyeline sahiptir. Bu çalışmada, belirtilen yapıların dinamiksel kararlılıkları fonon analizleri ile incelenmiştir. Çalışmanın hedefi fonksiyonelleştirilmiş 2D SnSSe ve TiSSe sistemlerinde kararlı olan yapıların elektronik özelliklerinin ayrıntılı olarak incelenmesi sağlanacaktır.

Bu çalışmanın amacı, SnSSe ve TiSSe Janus yapılarının yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) kullanarak halojen elementleri (F, Cl, Br, I) ile fonksiyonelleştirilmesidir. 2D boyutlu Janus malzemeler, benzersiz fiziksel ve kimyasal özellikleri sayesinde enerji depolama, nanoelektronik ve fotonik gibi alanlarda geniş bir potansiyele sahiptir. Çalışma, SnSSe ve TiSSe yapıların 1T ve 2H fazlarının kararlılığını fonon hesaplamaları ile analiz etmiş ve halojen elementleri ile fonksiyonelleştirerek en kararlı yapıları belirlemiştir. Elektronik ve optik özelliklerin analizleri, bu yapıların performanslarının fonksiyonelleştirme ile geliştirilebileceğini göstermiştir.



Şekil 2: 1T-2H TiSSe yapılarının üstten ve yandan görünümü



Şekil 1: 1T-2H SnSSe yapılarının üstten ve yandan görünümü

1T ve 2H fazında çalışılması önerilen 2D sistemlerde fonksiyonelleştirilmiş yapıların çeşitli alanlarda kullanımı değerlendirilmiştir. Bu çalışma, literatüre ve malzeme bilimine katkı sağlayarak, yeni nesil malzemelerin geliştirilmesi ve endüstriyel entegrasyonunu ilerletmeyi amaçlamaktadır.

### Kaynakça

1. Mogulkoc, A., Mogulkoc, Y., Jahangirov, S., Durgun, E. "Characterization and stability of Janus TiXY (X/Y= S, Se, and Te) monolayers." The Journal of Physical Chemistry C 123, **49** (2019): 29922-29931.
2. Yagmurcukardes, M., et al. "Quantum properties and applications of 2D Janus crystals and their superlattices." Applied Physics Reviews 7, **1** (2020).
3. Guo, San-Dong, et al. "Predicted Janus SnSSe monolayer: a comprehensive first-principles study." Physical Chemistry Chemical Physics 21, **44** (2019): 24620-24628.

**Teşekkür:** Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu (hymf.ankara.edu.tr) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapmıştır.

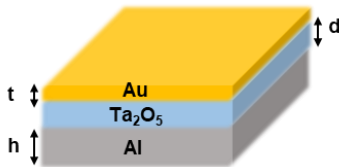
## Yansıtıcı Renk Filtreleri için Au/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Al İnce Filmlerinin Saçtırma Yöntemiyle Üretimi ve Karakterizasyonu

Atahan Hazer<sup>1</sup>, Yusuf Çekerek<sup>1</sup>, Eylül Defne İnan<sup>1</sup> ve Meltem Dönmez Kaya<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Bölümü, 06500, Ankara

<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, 06500, Ankara

Görünür bölgede belirli bir dalga boyunu seçici olarak yansıtarak çeşitli renkler gösteren metal tabanlı yansıtıcı renk filtreleri, son yıllarda optik sahteciliğe karşı koruma, renk dekorasyonu ve baskı, görüntüleme/görüntüleme cihazları ve organik güneş hücreleri gibi çeşitli uygulamalar için önemli bir bileşen olarak büyük ilgi görmüştür [1]. Avantajları ve ümit verici uygulamaları nedeniyle son zamanlarda yapılan birçok çalışma F-P boşluklarına dayalı spektral filtrelerin tasarımına odaklanmıştır [2]. Bu çalışmada, ince altın (Au) film tabakası ve kalın alüminyum (Al) filminden oluşan ve bir tantal pentaoksit (Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) dielektrik tabakasıyla ayrılmış F-P boşluklarına dayalı yansıtıcı renkli filtreler gösterilmektedir. Çalışmamızda, farklı Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> ince film kalınlıklarında Au/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Al filmleri RF saçtırma tekniği kullanılarak cam ve Si alttaşlar üzerine kaplandı. En iyi yapı tasarımını elde etmek için, kalın (h=100 nm) alt metal (Al) katman ve ince (t=10 nm) üst metal (Au) katmanın ortak bir deneysel yapılandırma kalınlık optimizasyonu sağlandı. Önerilen renk filtresinin şematik konfigürasyonu Şekil 1'de gösterilmektedir.



Şekil 1: Au/Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/Al yapısının şematik diyagramı

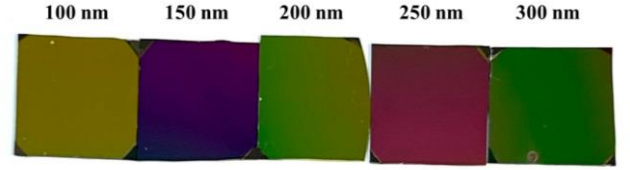
### Teşekkür

Bu çalışma, 1919B012325961 nolu proje ile TÜBİTAK (2209-A) tarafından ve 2019K12-149-045 nolu proje ile CB-SBB tarafından desteklenmektedir.

### Kaynakça

1. Yang, Z., Zhou, Y., Chen, Y., Wang, Y., Dai, P., Zhang, Z., & Duan, H. (2016). Reflective color filters and monolithic color printing based on asymmetric Fabry-Perot cavities using nickel as a broadband absorber. *Adv. Opt. Mater.*, 4(8), 1196-1202.
2. Deng, H., Li, Z., Stan, L., Rosenmann, D., Czaplowski, D., Gao, J., & Yang, X. (2015). Broadband perfect absorber based on one ultrathin layer of refractory metal. *Optics letters*, 40(11), 2592-2595.

Ayrıca, elde edilen film yapılarının fotoğrafları Şekil 2'de sunulmaktadır. Üretilen filmlerin; yapısal, morfolojik ve optik analizleri gerçekleştirildi. Filmlerin kristal yapıları yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı (HR-XRD), yüzey pürüzlülükleri ve tanecik büyüklükleri yüksek performans Atomik kuvvet mikroskobu (hp-AFM) ve geçirgenlik ile yansıma ölçümleri UV-Vis spektrometresi kullanılarak incelendi.



Şekil 2: Üretilen ince filmlerin fotoğrafları

Yapısal analizlerle ince filmlerin başarılı bir şekilde oluşturulduğu belirlendi. Optik analiz sonuçları incelendiğinde yansıtıcılık değerlerinin yaklaşık olarak %90'ın üzerinde olduğu gözlemlendi. Ayrıca 3x3 µm<sup>2</sup>'lik yüzey tarama alanında gerçekleştirilen AFM ölçüm sonuçlarından filmlerin yüzeylerinin oldukça homojen olduğu görüldü. Özetle, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> bir dielektrik tabakası kullanarak asimetric F-P boşluklarına dayanan bir tür yansıtıcı renk filtresi gösterdik. Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> tabakasının kalınlığının ayarlanmasıyla farklı yansıma renkleri başarıyla elde edildi. Metal-dielektrik tabanlı yansıtıcı renk filtresi uygulamalarında Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>'in kullanılabilir avantajlı bir malzeme olduğu belirlendi.

# KIZILÖTESİ UYGULAMALAR İÇİN GaAs ÜZERİNE ÇOKLU KATMAN YANSIMA ÖNLEYİCİ KAPLAMA TASARIMI VE GELİŞTİRİLMESİ

Bengisu SAYIN<sup>1</sup>, Süleyman ÖZÇELİK<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Bilimi ve Mühendisliği, Fen Bilimleri Enstitüsü, 06500, Ankara, Türkiye

<sup>2</sup>Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Gazi Üniversitesi, 06500, Ankara, Türkiye

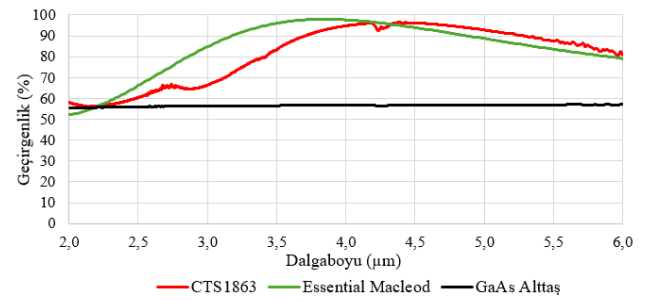
Bu çalışmada, GaAs tabanlı dedektörlerde yansımaya ve saçılmayı azaltmak amacıyla uygun yansımaya önleyici ince filmler geliştirilmesi hedeflenmiştir. GaAs malzemesinin yüksek kırılma indisine sahip olması, yansımaya oranını artıran temel bir etken olarak belirlenmiştir. Bu nedenle, GaAs tabanı üzerine özgün bir kaplama tasarımı geliştirilerek, 3-5  $\mu\text{m}$  dalga boyu aralığında %95 optik geçirgenlik elde edildi.

Tasarım sürecinde, ince film kaplamaların dizaynı, analizi, üretimi ve sorun giderilmesi için kapsamlı bir yazılım paketi olan *Essential Macleod* kullanılmıştır. [1] Bu yazılım aracılığıyla, GaAs taban üzerinde 150/100/150/100 nanometre kalınlıklarında sırasıyla SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> olmak üzere dört katmanlı bir modelleme gerçekleştirilmiş ve bu katmanlar, püskürtme sistemi (*sputtering*) kullanılarak üretilmiştir.

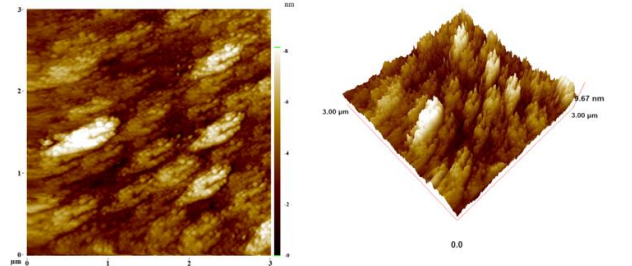
Püskürtmeli biriktirme, ince filmleri alt tabakalar üzerine biriktirmek için yaygın olarak kullanılan bir fiziksel yöntemdir. Bu teknik, hedef malzemenin iyon bombardımanı sonucunda buharlaştırılması esasına dayanır ve tamamen fiziksel bir süreci ifade eder. [2]

Üretilen ince film CTS1863 olarak adlandırılmıştır ve yapısal ve optik özellikleri, XRD, FTIR spektrometresi ve AFM ölçümleri ile karakterize edilmiştir. Yüzey morfolojisi analizinde, ortalama karekök pürüzlülük (RMS) değerinin 1,33 nm olduğu belirlenmiştir. X-ışını kırınım (XRD) analizinde ise numunenin yapısal analizinde TiO<sub>2</sub> için (110), SiO<sub>2</sub> için (101) ve (022), GaAs altta için ise (200) ve (004) yönelimli piklerin oluştuğu gözlemlenmiştir.

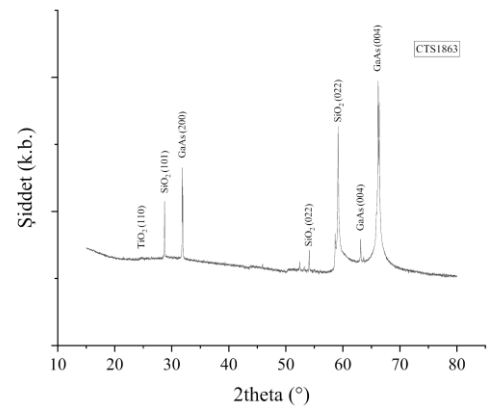
Bu çalışma, kızılötesi dedektörlerin performansını artırmaya yönelik önemli bir adım olabilir ve endüstriyel uygulamalara değerli katkılar sunabilir.



Şekil 1: CTS1863 numunesinin karşılaştırmalı optik geçirgenlik grafiği



Şekil 2: CTS1863 numunesinin 2D ve 3D topografik görüntüleri



Şekil 3: CTS1863 numunesinin X-ışını kırınım deseni

## Teşekkür

Bu çalışma, 2019K12-149045 nolu proje ile T.C. Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

## Kaynakça

- [1] The Essential Macleod. Thin Film Center: Essential macleod. (n.d.). <https://www.thinfilcenter.com/essential.php>
- [2] Depla, D., Mahieu, S., & Greene, J. E. (2010). Sputter deposition processes. In *Handbook of deposition technologies for films and coatings* (pp. 253-296). William Andrew Publishing.

## Grafen Yüzeyinin Selenofen ve Furan Molekülleri ile Dekore Edilmesi

**Berfin Çelik<sup>a</sup>, Sefa Akcan<sup>a</sup>, Çağıl Kaderoğlu<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup>Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 0600, Ankara*

Bu çalışmada 5-elemanlı hetero-halkalı bileşikler grubundan selenofen (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>Se) ve furan (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O) moleküllerinin grafen üzerine adsorplanması araştırılmıştır. Molekül+Grafen hibrit yapıların yapısal, elektronik ve optik özellikleri kuantum mekaniksel bir hesaplama yöntemi olan ab-initio Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) ile belirlenmiştir. Bu amaçla ilk olarak izole durumdaki moleküller ile temiz grafen yüzeyi ayrı ayrı modellenmiştir. Daha sonrasında ise moleküllerin [2+2] ve [4+2] adsorpsiyon konfigürasyonları dikkate alınarak, elde edilen hibrit yapılarda temiz yüzeye kıyasla oluşan farklar belirlenmiştir. Furan ve selenofen adsorplanmasının grafenin 0 eV olan band aralığını genişlettiği görülmüştür. İlaveten, temiz grafenin optik absorpsiyonu doğrultudan bağımsızken, molekül adsorpsiyonunun optik özellikleri doğrultuya bağlı hale getirdiği ve pik şiddetleri ile pozisyonlarında değişikliğe neden olduğu belirlenmiştir. Araştırmanın son aşamasında ise furan ve selenofen moleküllerinin grafen yüzeyinde dimerleşmesi incelenmiştir. Monomer adsorplanmasında olduğu gibi dimerler de temiz grafenin band aralığını arttırmış ve optik absorpsiyonun doğrultuya bağlı hale getirmiştir. Sonuç olarak, selenofen ve furan moleküllerinin grafenin elektronik ve optik özelliklerini modifiye etmek için kullanılabilmesi gösterilmiştir.

Bu çalışma, TÜBİTAK 2209/A – Üniversite Öğrencileri Araştırma Projeleri Destekleme Programı kapsamında 1919B012206972 numarası ile desteklenmiştir. Bu çalışmada yapılan tüm hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.



## Spin 3 - Spin 5/2 Karışımının Manyetik Özelliklerinin İncelenmesi

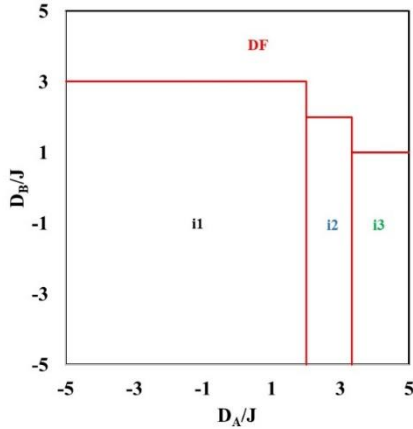
Çağrı Kani<sup>1</sup>, Aycan Özkan<sup>2</sup>

1 Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı, 06500 Ankara, Türkiye  
 2 Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 06500 Ankara, Türkiye

Ferrimanyetik malzemeler son yıllarda umut vadeden özellikleri nedeniyle dikkat çekmektedir. Zengin çeşitliliğe sahip kompleksler, elde edilmek istenilen özelliklere göre stratejik olarak inşa edilebilmektedir. Spin 3 – Spin 5/2 karışımının Ising model ile modellendiği çalışmamızda hesaplamalar Creutz Cellular Automatondan üretilen cooling algoritması ile 1000.000 zaman adımı üzerinden yapıldı [1,2]. Hesaplamalarımızda aşağıdaki Ising model hamiltoniyeni kullanıldı.

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \sigma_j + D_A \sum_i S_i^2 + D_B \sum_j \sigma_j^2$$

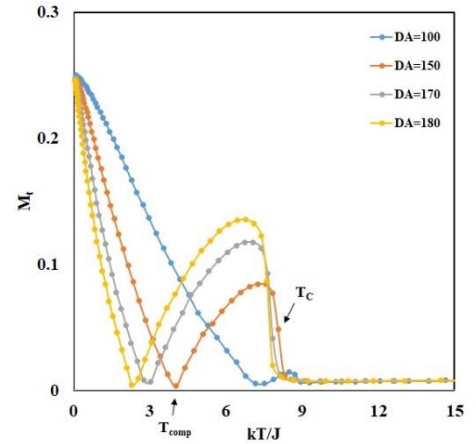
J, S ve  $\sigma$  arasındaki antiferromanyetik bilineer etkileşim parametresi;  $D_A$  ve  $D_B$  tek iyon anizotropi terimidir. Örgü boyu  $L=128$  olan kare örgü için yapılan hesaplamalarda en-yakın komşu etkileşimi ve periyodik sınır şartları dikkate alındı. Düzen parametresi ( $m_a$ ,  $m_b$ ) ve alınganlık ( $\chi$ ) niceliklerinin sıcaklıkla değişimi, zaman adımı ve örgü üzerinden alınan ortalamalarla elde edildi.



Şekil 1:  $D_A/J - D_B/J$  taban durum faz diyagramı

$D_A/J$ ' nin ve  $D_B/J$ ' nin (-5; 5) değer aralığında elde edilen faz diyagramında i1 ( $S = 3, \sigma = -5/2$ ), i2 ( $S = 2, \sigma = -5/2$ ) ve i3 ( $S = 1, \sigma = -5/2$ ) taban durum bölgelerinin yanı sıra düzensiz faz bölgesi (DF) olduğu görüldü (Şekil 1).

Taban durum faz diyagramının değişik bölgelerinden seçilen ( $D_A, D_B$ ) parametre setleri için yapılan hesaplamalarda S ve  $\sigma$  spinlerinin konumlandığı alt örgülerde spin karışımı için düzen parametresi olan mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi incelendiğinde, faz uzayında ait oldukları bölgenin özelliklerini sergiledikleri görüldü. Toplam mıknatıslanmanın ( $M_t$ ) ise kritik sıcaklık ( $T_c$ ) değerinin altındaki bir sıcaklıkta sıfır değeri aldığı, yani spin karışımı sisteminin telafi noktasına ( $T_{comp}$ ) sahip olduğu görüldü.



Şekil 2: Toplam mıknatıslanmanın ( $M_t$ ) sıcaklıkla değişimi ve telafi noktası ( $T_{comp}$ )

## Kaynakça

1. A. Özkan, "A simulation of the mixed spin 3- spin 3/2 ferrimagnetic Ising model", Phase Transitions **89**, 94–105 (2016).
2. A. Özkan, B. Kutlu "Critical behavior of low dimensional magnetic systems", J.of Magn. And Magn. Mat. **425**, 78–83 (2017).

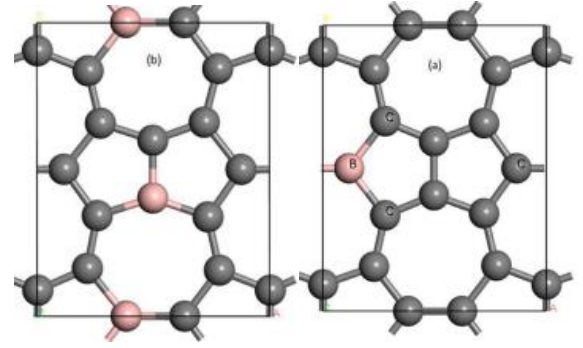
## ThMoB<sub>4</sub>-Tipi Bor-katkılı Grafen Yapılarında Li ve Ca Katkılamasının Hidrojen Tutma Kapasitesine Etkileri

Can Akkuş, Sezgin AYDIN

Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 06500, Ankara

ThMoB<sub>4</sub>-tipi grafene, farklı sayılarda bor-katkılayarak elde edilen kararlı 1B- ve 2B-yapıları, Li ve Ca ile dekore edilerek hidrojen tutma kapasiteleri ilk-prinsipler yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları yapılarak incelendi. İlk adımda, grafen yapısında bor katkılayarak oluşturulan 1B ve 2B yapılarına (Şekil 1)[1] Li ve Ca atomlarının tutunması araştırıldı. Farklı konumlar üzerinden bağlanma enerjisi hesaplanarak en kararlı bağlanma konumu tespit edildi.

Daha sonra, metal etrafına CLICH algoritmasıyla 1-9H<sub>2</sub> yerleştirilerek ve RICH algoritmasıyla (4+4)H<sub>2</sub>, (5+5)H<sub>2</sub>, (6+6)H<sub>2</sub> yerleştirilerek elde edilen ilk yapıların optimizasyonları yapıldı, ortalama H<sub>2</sub> tutunma enerjileri hesaplandı. (5-7)H<sub>2</sub> durumları Tablo 1'de listelendi. Sonuçlar, Li ve Ca'nın hidrojen adsorpsiyonunda farklı performanslar sergilediğini ortaya koydu. Tutunma enerjisinin hem dopant türüne hem de eklenen hidrojen miktarına bağlı olarak değişiklik gösterdiği tespit edildi.



Şekil 1: 1B ve 2B alt taş konfigürasyonları

**Tablo 1:** Hidrojen molekülü başına ortalama tutunma enerjileri (eV)

nH <sub>2</sub>	1B		2B	
	Li	Ca	Li	Ca
5	0.194	0.229	0.207	0.250
6	0.166	0.201	0.194	0.219
7	0.151	0.195	0.180	0.208

Ca'nın Li'ye göre daha verimli olduğu, sadece metal atomunun değil tabakanın da tutunma süreçlerine katkı sağladığı görüldü. Sunulan yapıların, uygun tutunma süreçleri sayesinde alternatif katı-hal hidrojen depolama malzemesi olarak kullanılabilirler sonucuna varıldı.

### Kaynakça

1. Aydın, S., & Ciftci, Y. O. (2021). *Mechanical and dynamic properties of stable two-dimensional boron-substituted ThMoB<sub>4</sub>-type graphene: First-Principles Study*. *Materials Today Communications*, 27, 102322. doi:10.1016/j.mtcomm.2021.102322
2. Alp, I. O., Aydın, S., & Ciftci, Y. O. (2018). *First-principles hydrogen adsorption properties of Li-decorated ThMoB<sub>4</sub>-type graphene*. *International Journal of Hydrogen Energy*. doi:10.1016/j.ijhydene.2018.07.05

## Absorption control by variable air-gap metal-insulator-metal metamaterials

Daiki Iwamoto and Yoshiaki Kanamori

*Department of Robotics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan*

It is expected that 6G communications will begin around 2030. As a countermeasure to radio interference that will accompany its widespread use, it will be necessary to develop radio wave absorbers that are effective against terahertz waves. Metamaterial absorbers have been devised so far. In this study, we propose a polarization-independent absorption control technology using a variable air-gap metal-insulator-metal metamaterial in the 6G communication band.

6G communication is expected to become widespread from around 2030. The communication band is expected to be 275–450 GHz as communication capacity increases. It is easy to imagine that radio wave interference will occur in 6G as communication scale increases. It is necessary to develop radio wave absorbers compatible with 6G. There are several candidates, one of which is metamaterials (MMs). MMs are artificial subwavelength structures that can create optical properties not found in nature. A structure in which a dielectric layer is sandwiched between metal layers is called a metal-insulator-metal (MIM) structure. MMs with MIM structures can be used as absorbers, which are called MM absorbers. An MM absorber becomes an electric resonator and generates absorption loss for electromagnetic waves at a specific frequency. The resonant frequency is determined by the shape and dimensions of the MMs as well as the refractive index and thickness of the dielectric material of MIM structures. When the dielectric is solid, the material and shape cannot be changed. This means that the absorption loss cannot be dynamically adjusted. Therefore, we considered a method to use air as the dielectric and change the air-gap thickness. Previous research has been done, in which the distance between the metal layers was 10 – 40  $\mu\text{m}$  to control the absorption loss [1]. Their device used split-ring resonators, so the optical properties were dependent on the incident polarization direction. In this study, a cross-shaped MM was designed to eliminate polarization dependency for an MM absorber.

Electromagnetic field simulation was performed using CST Studio Suite 2024. Figure 1 shows a schematic of the unit structure of proposed MM absorber. Here,  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$ , and  $D$  are the wave vector, electric field vector, magnetic field vector, and air-gap, respectively. Electromagnetic waves of 0.2 – 0.4 THz are incident in the normal direction.  $D$  is changed from 0 to 60  $\mu\text{m}$ . Air-gap dependence of calculated absorption spectra is shown in Fig. 2. When  $D = 7.52 \mu\text{m}$ , the reflectance at a frequency of

0.361 THz is  $2.30 \times 10^{-5}$ . Since the transmittance can be considered approximately 0, absorption is 0.999 or more. It is also found that the absorption gradually shifts to the lower frequency side as  $D$  increases. For example, at a frequency of 0.361 THz, the absorptance varies between 0.018 and 0.999 by varying  $D$  between 0.00  $\mu\text{m}$  and 7.52  $\mu\text{m}$ , respectively. In summary, we proposed a polarization-independent absorption control technology using a variable air-gap MIM-MM in the 6G communication band, and successfully verified through numerical calculations that the absorption can be tuned with high contrast by controlling the air gap.

A part of this work was supported by JST, CREST Grant Number JPMJCR2102. We acknowledge Dr. Taiyu Okatani and Dr. Naoki Inomata for valuable comments.

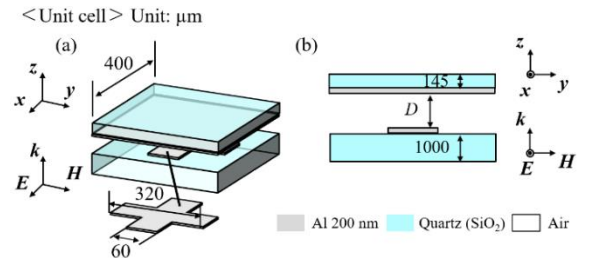


Figure 1: A schematic of the unit structure of proposed MM absorber. (a) A perspective view and (b) a cross-sectional view.

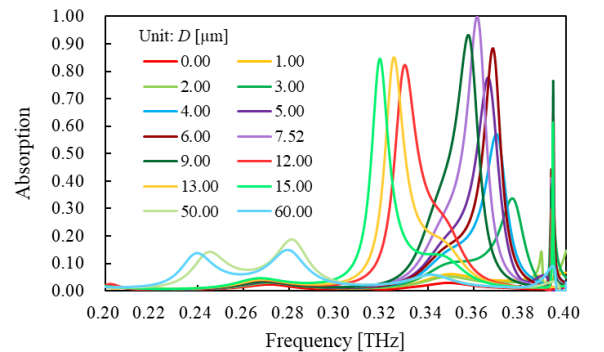


Figure 2: Air-gap dependence of absorption spectra (calculated values).

## References

1. L. K. Piper, H. J. Singh, J. R. C. Woods, K. Sun, O. L. Muskens, and V. Apostolopoulos, "Mechanically Tunable Terahertz Metamaterial Perfect Absorber", *Advanced Photonics Research* **2** (12), 2100136 (2021).

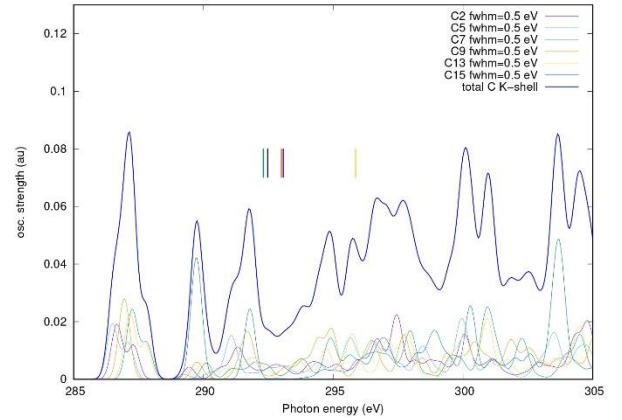
## Makine öğrenmesi ile NEXAFS ve XPS spektrogramları: Uyarılmış durum özelliklerinden hassas moleküler yapı belirlemeye

Ece Senem Kondakçı, Arda Erbasan, Daniele Toffoli, Hande Üstünel

*Fizik Bölümü, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Ankara, Türkiye*  
*Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste, Italy*

Çekirdek-elektron spektroskopileri, X-ışını Absorpsiyon Spektroskopisi (XAS) ve X-ışını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS) gibi yöntemler, emici atomların yerel geometrik ve kimyasal ortamları hakkında detaylı bilgi elde etmek için kritik öneme sahiptir. XPS, X-ışını fotonlarıyla etkileşim sonucunda elektronların saçılmasına dayanan fotoelektrik etkisine dayanır. XAS'ta ise örnek, monokromatik X-ışınlarına maruz bırakılır ve bu, boş sanal yörüngelere geçişlere ve bir çekirdek deliği ve parçacık durumunun oluşmasına yol açar [1]. Ayarlanabilir radyasyon kaynakları, özellikle senkrotron ışık kaynaklarının daha yaygın hale gelmesine rağmen, Yakın Kenar X-ışını Absorpsiyon İnce Yapısı (NEXAFS) spektrogramlarının yorumlanması hala zorlayıcıdır ve kesin kuantum mekanik hesaplamalar gerektirir [2].

Makine öğrenimi (ML) yöntemleri, spektroskopi verilerini tahmin etmek için çok yönlü ve maliyet etkin bir çözüm sunar [3]. Bu çalışma, moleküler yapılardan NEXAFS spektrogramlarının tahmini (doğrudan problem) ve NEXAFS spektrogramlarından moleküler yapıların çıkarımı (ters problem) için yenilikçi bir ML tabanlı metodoloji sunmaktadır. Çalışmada, farklı soğurma merkezlerine (C, O, F, B, S ve metaller) sahip çeşitli moleküller için K-kenarı ve L-kenarı NEXAFS spektrogramları üretilmiş ve ML modellerini nicel doğrulukla eğitmek ve doğrulamak için kullanılmıştır.



**Şekil 1:** C K-kabuk (C K-shell) salınım gücü (oscillator strength) ve foton enerjisi (Photon energy) grafiği

**Tablo 1:** C atomu Bağ Enerjileri

C Atomu	Bağ Enerjisi (eV)
Ion	204.45240540
Ground State	-88.02432755
Transition Point (Ionization Potential)	292.47673295

Metodoloji, XPS ve NEXAFS spektrogramlarının kapsamlı bir moleküler veri tabanının geliştirilmesini içermektedir. Kesin NEXAFS spektrogramları, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi-Geçiş Potansiyeli (DFT-TP) ve Zaman Bağımlı Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (TDDFT) kullanılarak hesaplanmıştır [4]. Özellikle çekirdek deliği gevşeme etkilerinin tanımlanmasının zor olduğu Bor gibi elementler için, açık dalga fonksiyonu yöntemleri kullanılmaktadır. Amsterdam Modelleme Paketi (AMS), DFT-TP ve TDDFT hesaplamalarını, yüksek verimli ışık akışı kütüphanesi PLAMS aracılığıyla kolaylaştırmaktadır [5]. Yapay Sinir Ağları ve Kernel Ridge regresyonu doğrudan problemi çözmek için kullanılırken, Rastgele Ormanlar (Random Forests) gibi sınıflandırma yöntemleri ters problemde uygulanmıştır. Bu çalışmanın kataliz, ilaç tasarımı ve enerji sektörlerinde geniş kapsamlı uygulamaları bulunmaktadır.

**Kaynakça**

1. Stöhr, J. (1992). NEXAFS Spectroscopy. Springer, Berlin, Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02853-7>
2. X-ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS, and XANES, D. C. Koningsberger, R. Prins; A. Bianconi, P.J. Durham Chapters, Chemical Analysis 92, John Wiley & Sons, 1988.
3. Dunjko V, Briegel HJ. Machine learning & artificial intelligence in the quantum domain: a review of recent progress. Rep Prog Phys. 2018 Jul;81(7):074001. doi: 10.1088/1361-6633/aab406. Epub 2018 Mar 5. PMID: 29504942.
4. Triguero, L. & Pettersson, Lars & Agren, Hans. (1998). Calculations of near-edge x-ray-absorption spectra of gas-phase and chemisorbed molecules by means of density-functional and transition-potential theory. Phys. Rev. B. 58. 10.1103/PhysRevB.58.8097.
5. Toffoli, D., Stredansky, M., Feng, Z., Balducci, G., Furlan, S., Stener, M., Ustunel, H., Cvetko, D., Kladnik, G., Morgante, A., Verdini, A., Dri, C., Comelli, G., Fronzoni, G., & Cossaro, A. (2017). Electronic properties of the boroxine-gold interface: evidence of ultra-fast charge delocalization. Chemical Science, 8(5), 3789-3798. <https://doi.org/10.1039/C6SC05632F>

## Giyilebilir teknolojide esnek sıcaklık sensörleri için Ag inter dijital elektrotların aerosol jet baskı tekniği ile geliştirilmesi

Efe Erdem Dönmez<sup>2</sup>, Göktuğ Çağan<sup>2</sup>, Helin Sunar<sup>2</sup>, Berk Serbest<sup>1,2</sup>, Tuğçe Ataşer<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Ankara  
<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Fotonik Bölümü, Ankara

Son yıllarda, optik-fotonik uygulamalar için sürekli olarak sensörlerin kalitesini hassasiyet, doğruluk ve uzun ömür açısından iyileştirmeye çalışılmaktadır. Bilim ve teknolojiye ilerleme, sağlık sektörü, savunma sanayi ve giyim ve kozmetik sanayi gibi farklı uygulamalara yönelik elektronik uygulamalar, hafif ve esnek alttaşlar üzerinde düşük maliyetli yeni nesil sensörlerin geliştirilmesine yol açmıştır [1, 2]. Esnek elektroniklerin gelişmesiyle birlikte, fizyolojik ve çevresel parametrelerin gerçek zamanlı izlenmesine yönelik giyilebilir teknolojik uygulamalardaki esnek sensörler giderek daha fazla araştırmanın odağı haline gelmiştir. Giyilebilir sensörlere örnek olarak, kişisel sağlık amacıyla biyolojik sinyalleri toplamak için doğrudan insan cildine veya kıyafetlerine takılan sensörler verilebilir. Son yıllarda, yüksek hassasiyet, hızlı tepki hızı ve geniş bir aralık gibi olumlu algılama performansına sahip giyilebilir sıcaklık sensörleri yaygın olarak rapor edilmektedir [3-5].

Sıcaklık sensörleri için gümüş (Ag) inter dijital elektrotların geliştirilmesi önemli bir parametredir. Son zamanlarda mürekkepli baskı teknolojisi hızlı üretim, düşük maliyet ve çevre dostu gibi özelliklerinden dolayı hızlı bir şekilde gelişmektedir. Bu teknolojinin en yenilerinden olan Aerosol jet baskı teknolojisi, temassız ve maskesiz olarak doğrudan esnek ve esnek olmayan alttaşlara 100 ile 10 µm arasında çizgi genişliğine sahip elektrotların üretilmesine olanak sağlar. İnterdijital elektrotların genişliği, kalınlığı ve geometrik şekli gibi parametreler elektronik cihazların performanslarını önemli derecede etkilemektedir. Bu çalışmada, esnek Kapton alttaşlar üzerine aktif alanı daha etkin bir şekilde kullanılabilmesi için farklı geometrilere sahip gümüş inter dijital elektrotlar geliştirildi. Aerosol jet baskı yöntemi ile gümüş mürekkep ultrasonik atomizer kafa kullanılarak Kapton üzerine basıldıktan sonra farklı geometrilere sahip inter dijital elektrotların genişliği, kalınlığı ve dirençleri karşılaştırılmıştır. Kapton alttaşın kalınlığı 25 µm, gümüş inter dijital elektrotların çizgi genişliği 50 µm ve dirençleri 7.53 ile 5.38 Ω arasında değişmektedir.

**Teşekkür:** Bu çalışma, 2209-A öğrenci proje olarak 1919B012323335 nolu proje ile TÜBİTAK ve 2019K12-149045 nolu proje ile Türkiye Cumhuriyeti Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. Nag A., Simorangkir R.B.V.B, Gawade D.R., Nuthalapati S., Buckley J.L., O'Flynn B., Altinsoy M.E., Mukhopadhyay S.C., (2022). Graphene-based wearable temperature sensors: A review. *Materials & Design*, 221, 110971.
2. Sapra S., Chakraborty A., Nuthalapati S., Nag A., Inglis D.W., Mukhopadhyay S.C., Altinsoy M.E. (2023). Printed, wearable e-skin force sensor array. *Measurement*, 206, 112348.
3. Cai T., Yan Y., Park Y., Lee T., Peng D., Liu Y., Ha C.S., Kim K.C. (2021). Phosphorescence-Based Flexible and Transparent Optical Temperature-Sensing Skin Capable of Operating in Extreme Environments. *ACS Appl. Polym. Mater.*, 3, 2461–2469.
4. Lin X., Li F., Bing Y., Fei T., Liu S., Zhao H., Zhang T. (2021). Biocompatible Multifunctional E-Skins with Excellent Self-Healing Ability Enabled by Clean and Scalable Fabrication. *Nano-Micro Lett.*, 13, 200.
5. Han C.G., Qian X., Li Q., Deng B., Zhu Y., Han Z., Zhang W., Wang W., Feng S.P., Chen G., Liu W. (2020). Giant thermopower of ionic gelatin near room temperature. *Science*, 368, 1091–1098.

## NiO İnce Filmlerin Yapısal ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi

**Ekin Burcu Demirbaş, Basat Salih Öcüt, Celil Atakan Dicle, Musa Ayağlar,  
Halil İbrahim Efkere, Saime Şebnem Aydın**

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

Metal oksit yarı iletkenlerden olan nikel oksit (NiO) elektriksel ve optik özellikleri nedeniyle optoelektronik ve ince film cihaz uygulamaları için öneme sahiptir [1] ve son yıllarda çalışmalarda aktif olarak yer almaktadır. Metal oksitlerin çoğu doğal olarak n-tipi yarıiletkenler iken, sayısı az olan p-tipi malzemelerden biri olan nikel oksitler, mükemmel kimyasal kararlılığı ve elektromanyetik spektrumun görünür aralığında yüksek geçirgenliği ile öne çıkmaktadır [1]. Bant aralıkları hazırlama tekniğine ve koşullara bağlı olarak 3.4 ile 4.2 eV arasında değişebilmektedir [1]. NiO güneş hücreleri, fotodetektörler gibi çeşitli elektronik ve optoelektronik cihazlarda kullanılmaktadır.

Bu çalışmada, NiO fotodetektör yapılarını elde etmek amacıyla NiO ince filmler RF Magnetron Püskürtme tekniği ile farklı gaz basınçlarında (5, 10 ve 15 mTorr) cam ve Si alttaşlar üzerine kaplandı. Farklı gaz basınçlarında kaplanan filmlerin optik ve yapısal özellikleri, UV-Vis spektroskopisi ve X-ışını Kırınımı (XRD) ölçümleri ile değerlendirildi. Numunelerin XRD kırınım desenleri incelendiğinde, NiO'e ait karakteristik kırınım pikleri yaklaşık 36.8°, 42.4° ve 62.1° de gözlemlendi. Bu pik pozisyonlarının (111), (200) ve (220) düzlemlerine karşılık geldiği ve numunelerin kübik kristal yapısında olduğu tespit edildi [1-3]. Malzemelerin UV-Vis ölçümleri sonucunda, her üç numune için yasak enerji bant aralığı yaklaşık 3.8 eV olarak belirlendi ve bu sonucun literatür ile uyumlu olduğu görüldü [3].

**Teşekkür:** Bu çalışma 1919B012334055 nolu 2209A projesi ile TÜBİTAK ve 2019K12-149045 nolu proje ile Türkiye Cumhuriyeti Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

### Kaynakça

1. D. Mateos-Anzaldo, R. Nedev, O. Perez-Landeros, M. Curiel-Alvarez, J. Castillo-Saenz, A. Arias-Leon, B. Valdez-Salas, L. Silva-Vidaurre, E. Martinez-Guerra, E. Osorio-Urquiza, N. Nedev, "High-performance broadband photodetectors based on sputtered NiOx/n-Si heterojunction diodes", *Optical Materials* **145**, 114422 (2023).
2. M. Bonomo, "Synthesis and characterization of NiO nanostructures: a review" , *Journal of Nanoparticle Research*, **20**, 222 (2018).
3. A. Rahdar, M. Aliahmad, Y. Azizi, "NiO Nanoparticles: Synthesis and Characterization", *Journal of Nanostructures* **5**, 145- 151 (2008).

## Doğrusal ve Doğrusal Olmayan Kırılma İndisi Güçlendirmenin Optik Kontrolü

Elif ÖZTÜRK<sup>1,2</sup>, Hira ASIF<sup>3</sup>, Mehmet GÜNAY<sup>4</sup>, Mehmet Emre TAŞGIN<sup>2</sup>, Ramazan ŞAHİN<sup>3</sup>

1)Hacettepe Üniversitesi, Nanoteknoloji ve Nanotıp ABD, 06800 Ankara,

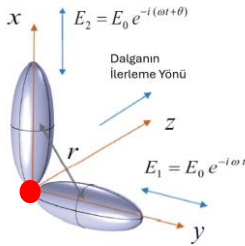
2)Hacettepe Üniversitesi Nükleer Bilimler Enstitüsü, 06800 Ankara,

3)Akdeniz Üniversitesi, Fizik Bölümü,07058Antalya

4) Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Nanobilim ve Nanoteknoloji Bölümü, 15030 Burdur

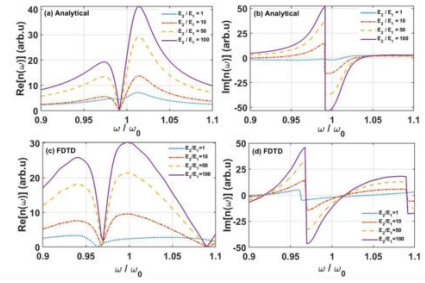
Geleneksel fotonik aygıtlar, kullanılan malzemenin doğası gereği belirli kırılma indislerine sıkışmış durumda ve kısıtlı analiz imkânı sunmaktadır. Son on yıllarda fotonik kristallerin gelişen teknolojisiyle kırılma indisinin küçük değişimleri dahi beraberinde yenilikçi birçok uygulamayı getirmiştir. Fakat tersinir olmayan süreçlere dayanan bu teknolojide kırılma indisi değişimi %5-10 civarında sınırlı kalmaktadır [1]. Geçmişte yapılan sistemi süren elektromanyetik kaynağın faz ve polarizasyon serbestlik dereceleri kullanılarak bu anlamda gerçekleştirilen çalışmalardan da ilham alarak hazırlanan çalışmamız kapsamında kırılma indisinin 8 kata kadar sadece basit bir polarize kaynakla aktif olarak kontrol edilebileceği bir meta-yüzey örneği önermekteyiz [2].

Çalışma sürecinde birbirine dik iki gümüş nanoçubuktan oluşan sisteme x polarize ( $E_2$ ) ve y polarize ( $E_1$ ) ışık düşürülüp, kaynakların farklı genlik ve faz farkı durumları detaylandırıldı. Şekil 1'de detayı gösterilen sistemde y polarize ışık sabit tutulup, x polarize ışığın genliği ve faz farkı değiştirildi. Tek bir kaynaktaki değişim sistemin tüm polarizasyonuna etkiyip iki rod arasında bulunan sıcak noktada ışığın hapsedilmesini sağladı. Bu kapsamda doğrusal ve doğrusal olmayan senaryolar kuantum mekaniksel yöntemlerle analitik olarak ve FDTD metoduyla simülasyon bazlı incelendi.

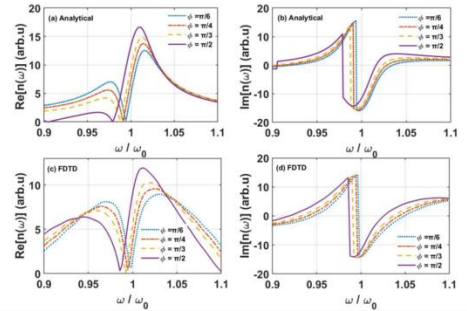


Şekil 1: İki dik gümüş küreselimsi (spheroidal) nanoparçacıktan oluşan ve  $\theta$  faz farkına sahip iki dik polarizasyonlu kaynakla uyarılan bir plazmonik yapı

Analitik metod Jaynes-Cummings modelini temel alarak sistemin enerji denklemini türetilip, kuramsal çözümüne dayanırken FDTD çözümü de yapılmıştır [3,4]. Birbiriyle oldukça tutarlı sonuçlar veren bu çalışmaların çıktısına dair örnek grafik Şekil 2 ve 3'de görselleştirilmiştir. Şekil 2'de doğrusal rejimde yapılan hesaplamalarla kaynak genlik oranı değiştirilerek kırılma indisinde yaklaşık 8 katlık bir değişimin analitik ispatını sunmaktadır. Şekil 3 ise, kaynağın faz farkının değişiminin; rezonans frekansında yaptığı değişime dikkat çekmektedir.



Şekil 2: Kırılma indisinin ( $n$ ) reel ve imajiner kısımlarındaki iyileştirme, doğrusal rejimde, faz farkı  $\phi$ 'nin farklı değerleri için, normalize edilmiş frekansın bir fonksiyonu olarak (a,b) analitik ve (c,d) FDTD yaklaşımlarıyla değerlendirilmiştir. Darbe genliği oranı 10 olarak alınmıştır.



Şekil 3: Kırılma indisinin ( $n$ ) reel ve imajiner kısımlarındaki güçlendirme, doğrusal rejimde, farklı darbe genlik oranları için, normalize edilmiş frekansın bir fonksiyonu olarak (a,b) analitik ve (c,d) FDTD yaklaşımlarıyla değerlendirilmiştir.  $\phi$  değeri  $\pi/2$  olarak alınmıştır

Daha da spesifik olarak ifade etmek gerekirse; genlik değişimiyle indis arttırımı kontrolü, faz değişimiyle de operasyon frekansının dramatik olarak kontrol edilebileceği açıkça görülmüştür. Bu kontrolün; elektromanyetik spektrumun görünür bölge uygulamaları açısından oldukça önemli olduğu aşıkardır. Benzer çalışma doğrusal olmayan rejim içinde gerçekleştirilmiştir.



**Kaynakça**

1. Gorbach, A. V. (2013). Nonlinear graphene plasmonics: Amplitude equation for surface plasmons. *Physical Review A*, 87(1), 013830. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.01383>
2. Panahpour, A., Mahmoodpoor, A., & Lavrinenko, A. V. (2019). Refraction enhancement in plasmonics by coherent control of plasmon resonances. *Physical Review B*, 100(7), 075427. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.075427>
3. M. E. Tasgin, A. Bek, and S. Postacı. Fano Resonances in the Linear and Nonlinear Plasmonic Response, chapter 1. Springer, 2018. hamiltonyen
4. Scully, M. O., & Zubairy, M. S. (1997). *Quantum Optics*. Cambridge University Press.

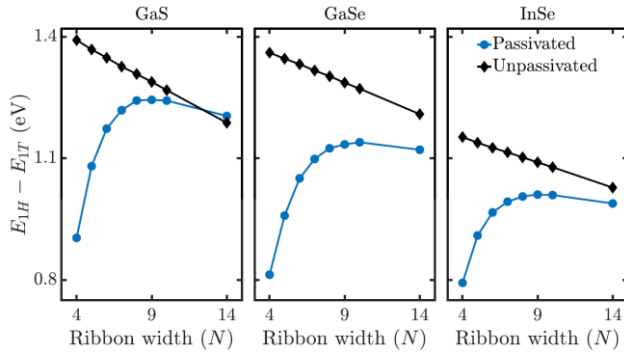
## Grup III metal monokalkojenit zikzak nanoşeritlerde 1T fazının 1H fazına göre termodinamik kararlılığı

Emin Aliyev <sup>1</sup>, Arash Mobaraki <sup>1</sup>, Hâldun Sevinçli <sup>2</sup>, Seymur Jahangirov <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Bilkent Üniversitesi, UNAM-Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Enstitüsü, 06800 Ankara

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

Grup III-VI monokatmanlarının (MX'ler) benzersiz optoelektrik ve termoelektrik özellikleri nedeniyle, nanoşeritleri (NR'ler) ortaya çıkan bir yarı-1D malzeme sınıfı olarak büyük ilgi görmüştür. Çalışmaların çoğunluğu iki boyutta en kararlı 1H faz MX'lerin koltuk NR'lerini incelemeye yöneliktir, çünkü bu fazın zikzak kenar NR'leri (ZNR'ler) metalik davranış göstermektedir. Bununla birlikte, 1T fazının NR'leri neredeyse hiç ilgi görmemiştir. Yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı ab initio simülasyonları kullanarak, GaS, GaSe ve InSe'nin hidrojen pasivasyon yapılmış ve yapılmamış 1T ve 1H ZNR'lerinin termodinamik kararlılığını sistematik olarak karşılaştırdık. Sonuçlarımız, 1T faz MX ZNR'lerinin 34 nm'ye kadar genişliklerde termodinamik olarak kararlı olduğunu ortaya koymaktadır; bu aralık çağdaş deneysel üretim teknikleriyle gerçekleştirilebilir. Ayrıca, 1T ZNR'ler yarı iletken olarak kalır ve kenarlar arasında herhangi bir yerleşik potansiyel olmadan Meksika şapkası benzeri üst değerlik bandını korur. Tamamlayıcı olarak, 1T InSe ZNR'lerin hidrojenasyon enerjileri pozitifdir ve yerleştirilmiş durum nedeniyle, pasivasyon yapılmamış durum neredeyse düz bir üst değerlik bandına sahiptir. Bulgularımız, grup III-VI NR'lerin sonraki sentez yolları için bir pusula görevi görür.



**Şekil 1:** Pasivasyon yapılmış (mavi daireler) ve pasivasyon yapılmamış (siyah kareler) durumlarda 1H ve 1T fazları arasındaki enerji farkı.

## n-Bileşenli Kübikspin Spin Camlarında Zengin Faz Diyagramlarının Ortaya Çıkışı

E. Can Artun<sup>1,2</sup>, Deniz Sarman<sup>3</sup>, A. Nihat Berker<sup>2,1,4</sup>

<sup>1</sup> TÜBİTAK Temel Bilimler Araştırma Enstitüsü, 41470, Kocaeli

<sup>2</sup> Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Kadir Has Üniversitesi, 34083, İstanbul

<sup>3</sup> Fizik Bölümü, Boğaziçi Üniversitesi, 34342, İstanbul

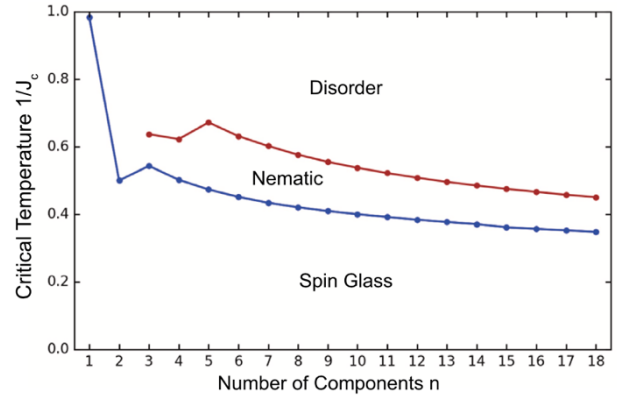
<sup>4</sup> Fizik Bölümü, Massachusetts Teknoloji Enstitüsü, 02139, Cambridge

Üç boyutlu n-bileşenli kübik-spin spin camı sistemlerinin hem dış manyetik alan varlığında [1] hem de yokluğunda [2] kapsamlı bir incelemesi sunulmaktadır. Hiyerarşik örgüler üzerinde kesin renormalizasyon grubu hesaplamaları kullanarak,  $n \geq 3$  bileşen için spin camı ve düzensiz fazlar arasında nematik bir fazın ortaya çıktığını gösteriyoruz (Şekil 1); bu, donmuş düzensizlik (quenched-disordered) barındıran bir miktarda yeni bir sıvı kristal fazını temsil etmektedir.

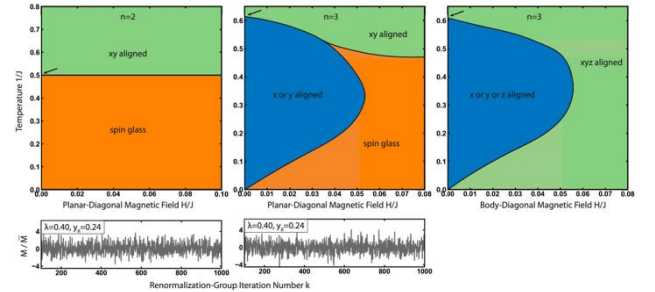
Sistem eksenel, düzlemsel-köşegen ve gövdesel-köşegen manyetik alanlara maruz bırakıldığında, 17 farklı düzenli faz ve çoklu spin camı faz topolojileri içeren dikkat çekici derecede zengin faz diyagramları sergilemektedir.

Spin camı fazları, renormalizasyon grubu dönüşümleri altında karakteristik kaos göstermekte olup, hesaplanan Lyapunov üstelleri bileşen sayısı n'ye göre tek-çift salınımları sergilemektedir.

Bulgularımız, ayrı spin sistemlerinin hem spin camı hem de nematik fazları barındırabileceğini ortaya koyarak, çeşitli alan konfigürasyonları altında beklenmedik derecede zengin düzenlenme davranışları sergilediğini göstermektedir.



Şekil 1: Ferro-antiferro simetrik  $p = 0,5$  değerindeki nematik ve spin camı geçiş sıcaklıkları, spin bileşenlerinin  $n$  sayısına bağlı olarak. Nematik fazın  $n \geq 3$ 'te devam ettiği görülmektedir.



Şekil 2: Uzaysal boyut  $d = 3$ ,  $p = 0,5$  için düzlemsel-diyagonal ve gövde-diyagonal manyetik alanlar altında kübikspin sistemi için hesaplanan faz diyagramları.

### Kaynakça

1. E. C. Artun, D. Sarman, A. N. Berker, "Axial, Planar-Diagonal, Body-Diagonal Fields on the Cubic-Spin Spin Glass in  $d=3$ : A Plethora of Ordered Phases under Finite Fields", *Physical Review E* **110**, 034123 (2024).
2. E. C. Artun, D. Sarman, A. N. Berker, "Nematic Phase of the n-Component Cubic-Spin Spin Glass in  $d=3$ : Liquid-Crystal Phase in a Dirty Magnet", *Physica A*, **640**, 129709 (2024).

## FAPbI<sub>3</sub> Perovskit Tabakasında PEAI tuzlarının Fotovoltaik Uygulamalar için Yüzey Pasivasyonu Etkilerinin DFT Metodu ile İncelenmesi

P15

Esra EROĞLU<sup>1,2</sup>, Cem MADEN<sup>2,3</sup>, Hande TOFFOLİ<sup>1</sup>, Figen VARLIOĞLU YAYLALI<sup>2,4</sup>,  
Aliakber KARABAĞ<sup>2,4</sup>, Mustafa YAŞA<sup>2</sup>, Selçuk YERCI<sup>2,3,5</sup>, Emrullah Görkem GÜNBAŞ<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>ODTÜ, Fizik Bölümü, 06800, Ankara, Türkiye

<sup>2</sup>ODTÜ, Güneş Enerjisi Araştırma ve Uygulama Merkezi (GÜNAM), 06800, Ankara, Türkiye

<sup>3</sup>ODTÜ, Mikro ve Nanoteknoloji Bölümü, 06800, Ankara, Türkiye

<sup>4</sup>ODTÜ, Kimya Bölümü, 06800, Ankara, Türkiye

<sup>5</sup>ODTÜ, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü, 06800, Ankara, Türkiye

[ergluesra@gmail.com](mailto:ergluesra@gmail.com)

Perovskit malzemeler, düşük maliyetli üretim teknikleri ve üstün optoelektronik özellikleri sayesinde fotovoltaik teknolojilerde dikkat çekmektedir. Ancak, bu malzemelerin performans ve kararlılığı, yüzey kusurları ve çevresel etkilerle sınırlıdır. PEAI (feniletilamonyum iyodür) tuzları, perovskit tabakalarında yüzey kusurlarını gidermenin yanı sıra, taşıdıkları hidrofobik ünitelerle malzemeyi oksijen ve neme karşı daha dayanıklı hale getirebilmektedir[1].

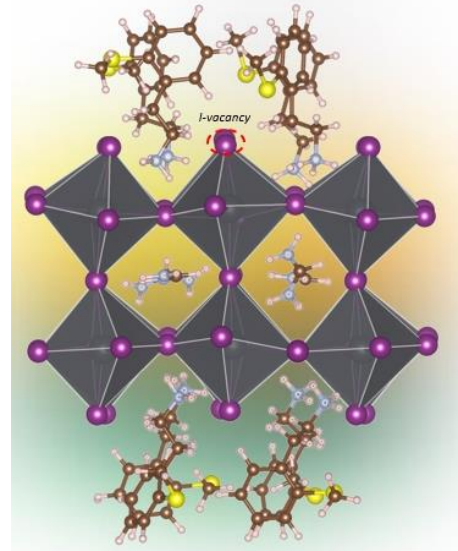
Bu çalışmada, PEAI tuzlarının farklı moleküler oryantasyonlarının (orto, meta, para) kusurlu ve kusursuz FAPbI<sub>3</sub> perovskit tabakalarındaki yüzey pasivasyon etkileri teorik olarak incelenmiştir. Tüm teorik hesaplamalar, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (Density Functional Theory, DFT) kapsamında, VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package) kullanılarak gerçekleştirildi. Geometri optimizasyonu yapılan tüm sistemlerin yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. OA-1 PEAI tuzu tutunmuş FAPbI<sub>3</sub> optimize perovskit tabaka Şekil 1'de verildi. FAPbI<sub>3</sub> perovskit tabaka üzerine tutunmuş PEAI tabanlı OA-1 tuzunun farklı oryantasyonları (O1, O2, O3 ve O4) için hesaplanan bağlanma enerjisi ( $E_B$ ) ve iş fonksiyonunun ( $\phi$ ) eV cinsinden değerleri Tablo 1'de sunuldu. Burada O1 ve O2 kusursuz, O3 ve O4 ise I-kusurlu perovskit tabakası için farklı oryantasyonlarla elde edilmiş başlangıç geometrilerini temsil etmektedir.

**Tablo 1:** O1, O2 ve O3 oryantasyonu için hesaplanmış bağlanma enerjisi ( $E_B$ ), iş fonksiyonu ( $\phi$ ) değerleri.

Oryantasyon	$E_B$ (eV)	$\phi$ (eV)
O1(kusursuz)	-6.99	4.52
O2(kusursuz)	-7.03	4.60
O3(I-kusurlu)	-4.19	2.30
O4(I-kusurlu)	-4.22	2.32

Elde edilen sonuçlardan kusursuz perovskit sistemleri için bağlanma enerjilerinin yaklaşık -7 eV iken, I-kusurlu sistemler için bağlanma enerjilerinin -4eV civarında olduğu görüldü.

Bu sonuç, yüzey kusurlarının PEAI molekülleriyle daha zayıf bir etkileşime neden olduğunu göstermektedir. İş fonksiyonu değerlerinin ise kusursuz sistemler için 5eV civarında iken I-kusurlu sistemler için 2eV civarında olduğu görüldü. Daha düşük iş fonksiyonu değerleri, kusurlu tabakaların elektronik performansındaki düşüşü işaret ettiği söylenebilir. Sonuç olarak, PEAI tuzlarının FAPbI<sub>3</sub> perovskitlerde yüzey pasivasyonu üzerindeki etkisi, fotovoltaik cihazların performans ve uzun ömürlülüğünü artırmada kritik bir rol oynamaktadır. Bu bulgular, gelecekteki perovskit tabanlı güneş hücresi tasarımları için önemli bir rehber niteliğindedir.



**Şekil 1:** OA-1-PEAI/FAPbI<sub>3</sub> Perovskit

**Teşekkür:** Bu çalışma TÜBİTAK tarafından Proje No: 123F373 kapsamında desteklenmektedir. Tüm hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

### Kaynakça

1. Gozukara Karabag, Z., Karabag, A., Gunes, U., Gao, X., Syzgenteva, O. A., Syzgenteva, M. A., Varlioglu Yaylali, F. Tuning 2D Perovskite Passivation: Impact of Electronic and Steric Effects on the Performance of 3D/2D Perovskite Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, **13**, 45 (2023).

## Mikro Boyutlu Nesneleri Belirlemek için Girişim Mikroskobu Kullanımı

Hanife F.\*<sup>1,2</sup>, Azizian-Kalandaragh Y.<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Ankara, Türkiye<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Bölümü, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Ankara, Türkiye

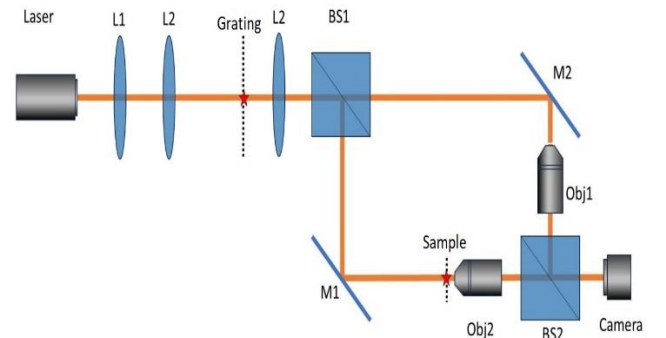
\*ferhathanife64@gmail.com

Girişim mikroskobu, nanoparçacıklar veya hücreler, organeller gibi biyolojik mikro boyutlu nesnelere boyutlarını belirleme için kullanılan güçlü bir tekniktir. Girişim mikroskobu, ışık dalgalarının bir nesne ile etkileşime girmesi sonucu oluşan girişim desenleri plensebine dayanır. Bu desenlerdeki yoğunluk değişimleri analiz edilerek, nesnenin boyutu ve morfolojisi hakkında nicel bilgiler elde edilebilir. Mikro boyutlu nesnelere belirlenmesi için Mach-Zehnder girişim mikroskobu kullanıldığında, numune ile ışığın etkileşimi sonucu oluşan girişim desenleri, nesnenin özelliklerini çıkarmak amacıyla kullanılır.

Girişim prensiplerinden yararlanan Mach-Zehnder girişim mikroskobu, mikro boyutlu nesnelere nicel görüntülenmesi ve analizine yönelik güçlü bir platform sunar. Bu yöntem, araştırmacıların bu nesnelere yapısal, morfolojik ve optik özelliklerini ayrıntılı bir şekilde incelemelerine olanak tanır. Bu çalışmada, mikro boyutlu numunelerin ölçülmesi amacıyla bir Mach-Zehnder girişim mikroskobu kurulmuştur. Resim 1'de kurulan düzeneğin şematik görünümü sunulmuştur.

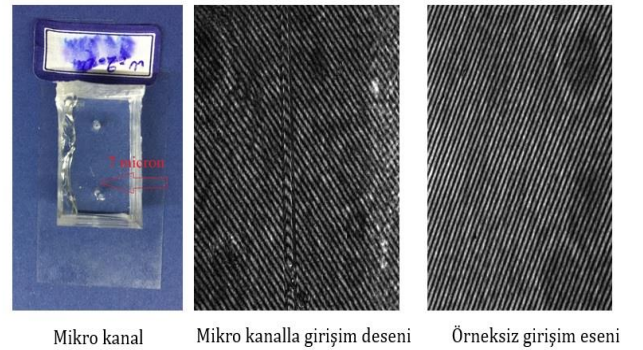
Kurulan düzenek optimize edilerek girişim desenleri oluşturulmuş ve sistem için uygun boyutlardaki mikro kanallar ile çeşitli boyutlardaki polistiren parçacıkları ölçülmüştür. İkinci aşamada, çözünürlüğü artırmak amacıyla lazer ışığının önüne bir ızgara yerleştirilmiş ve aynı örnekler tekrar ölçülmüştür. Elde edilen sonuçlar MATLAB destekli bir programda incelenmiş ve sistemin çözünürlüğünün arttığı gözlemlenmiştir. Burada sistemi kalibre etmek için boyutunu bildiğimiz (7 mik.) bir mikro kanal üzerinde testler yapılmış düzeneğin doğru çalıştığı tespit edilmiştir. Daha sonra farklı boyutlarda polistiren numuneleri hazırlanıp ölçülmüştür. Resim 2'de mikro kanal ve elde edilen girişim desenlerinin resmi numunesiz ve mikro kanal ile verilmiştir.

Poster üzerinde, düzenek tasarımı, test süreçleri ve sonuçları hakkında ayrıntılı bilgi verilecektir.



Şekil 1: kurulan setapın şematik görünümü

## Mikrokanal ölçümü



Mikro kanal

Mikro kanalla girişim deseni

Örneksiz girişim eseni

Şekil 1: Mikrokanal, Numunesiz desen ve Mikro kanal ile girişim deseni

## Kaynakça

1. Xiao Yu, Jisoo Hong, Changgeng Liu, Myung K. Kim, Review of digital holographic microscopy for three-dimensional profiling and tracking (optical engineering, vol. 53, issue 11, 112306 (2014).
2. Saghaei H, Elyasi P, Karimzadeh R, Design, fabrication, and characterization of Mach-Zehnder interferometers, Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications, vol. 37 100733 (2019).

## İki Boyutlu Janus $\gamma$ -Si<sub>2</sub>XY (X/Y= Se, S, Te) Malzemesinin Gerilme Altındaki Elektriksel ve Optik Davranışları

Gözde Enekçi, Yasin Zengin, Yeşim Moğulkoç

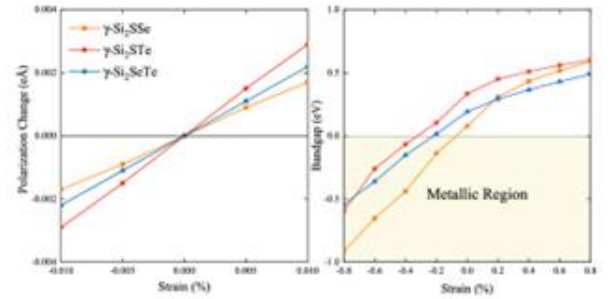
Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara

Bu çalışmada, Janus  $\gamma$ -Si<sub>2</sub>XY (X/Y = S, Se, Te) tek katmanlı malzemelerin elektriksel, optik ve mekanik özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir. Malzemelerin farklı gerilme koşulları altındaki davranışlarına odaklanılmış ve bu koşullarda dinamik ve termal stablilitelerini korudukları, fonon spektrumları ve ab initio moleküler dinamik simülasyonları ile gösterilmiştir. Born'un mekanik kararlılık kriterine göre yapılan değerlendirmeler, bu malzemelerin üstün yapısal kararlılığa sahip olduğunu ortaya koymuştur.

Elektronik bant yapılarında özellikle değerlik bandında görülen Meksika şapkası şeklindeki dağılım, benzersiz bir elektron yoğunluğu davranışını işaret etmektedir. Elektron ve deşik hareketlilikleri, deformasyon potansiyelinin yön bağımlılığı nedeniyle x- ve y-eksenleri boyunca önemli farklılıklar göstermektedir. Si<sub>2</sub>SSe ve Si<sub>2</sub>SeTe'nin düşük etkin kütle değerleri, daha az belirgin parabolik bant yapılarından kaynaklanarak yüksek taşıyıcı hareketliliği sağlamaktadır. Buna karşılık, Si<sub>2</sub>STe'nin yüksek etkin kütlesi ve artan DP anizotropisi, taşıyıcı hareketliliğini azaltarak bu malzemeyi yüksek performanslı cihazlar için daha az uygun hale getirmektedir.

Gerilme (strain) uygulandığında, Si<sub>2</sub>XY malzemelerin optik soğurma spektrumlarında bant aralığındaki değişimlere bağlı olarak dikkate değer iyileşmeler gözlenmiştir. Pozitif gerilme altında optik soğurma kapasitesindeki artış, bu malzemeleri optoelektronik ve fotovoltaik uygulamalar için son derece cazip hale getirmektedir. Ayrıca, malzemelerin yarıiletken-metal faz geçişi göstermesi, nanoelektronik uygulamalarda potansiyel kullanım alanlarını genişletmektedir.

Bu özellikler, Janus  $\gamma$ -Si<sub>2</sub>XY malzemelerini nanoelektronik, esnek elektronik ve enerji uygulamaları için umut verici adaylar olarak öne çıkarılmaktadır.



Şekil 1: Janus  $\gamma$ -Si<sub>2</sub>XY tek katmanlarının dış elektrik alan ve iki eksenli gerilme altındaki polarizasyon ve elektronik bant aralığındaki değişimler

**Teşekkür:** Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu ([hymf.ankara.edu.tr](http://hymf.ankara.edu.tr)) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır.

### Kaynakça

1. T. V. Vu, H., Phuc, L.C. Nhan, A. I. Kartamyshev, N. N. Hieu. "Predicted novel Janus  $\gamma$ -Ge<sub>2</sub>XY (X/Y=S,Se,Te) monolayers with Mexican-hat dispersions and high carrier mobilities", Journal of Physics D: Applied Physics 56, 135302 (2023).
2. T. V. Vu, H., Phuc, L.C. Nhan, A. I. Kartamyshev, N. N. Hieu. "Enhanced out-of-plane piezoelectricity and carrier mobility in Janus  $\gamma$ -Sn<sub>2</sub>XY (X/Y= S,Se,Te) monolayers: A first-principles prediction", Applied Physics Letters 122, 061601 (2023).

## Investigation of structural, electronic, and optical properties of RbGaCl<sub>3</sub> cubic perovskite using first-principles methods

Gülçin ÇORBACI\* , Yasemin Öztekin Çiftçi<sup>1</sup>

Gazi University- Enstitue of Science- Faculty of Science, 06560, Ankara, Turkey

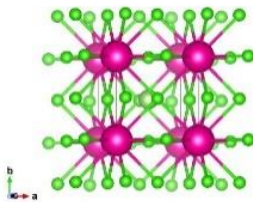
**Abstract.** In this study, the electronic, optical, elastic, and phonon properties of rubidium gallium trichloride (RbGaCl<sub>3</sub>) were systematically investigated within the framework of density functional theory (DFT). Calculations were performed using the plane-wave-based Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP), with appropriate exchange-correlation functionals chosen to ensure accurate and reliable results. Initially, the structural stability of the compound was optimized, and its equilibrium geometry was obtained. The optimized structure was then used to compute the electronic band structure and density of states (DOS), providing detailed insights into the electronic properties of the material. Optical properties were analyzed to evaluate the potential suitability of the compound for photonic applications. The elastic properties of the material were characterized through the elastic tensor, elucidating the mechanical stability and anisotropic behavior of the compound. Furthermore, phonon dispersion curves were calculated to analyze dynamic stability, and the thermodynamic contributions of phonon modes were examined. The findings indicate that RbGaCl<sub>3</sub> is a promising candidate for both mechanical and optoelectronic applications. This study expands the limited knowledge on the fundamental physical properties of this compound in the literature, providing a basis for future advanced research.

**Keywords:** RbGaCl<sub>3</sub>, density functional theory, optical properties, elastic properties, phonon properties, VASP.

The ABO<sub>3</sub>-type perovskite family, a comprehensive class of ternary oxides, continues to attract significant attention as a potential material for chemical engineering, heat engines, hydrogen membranes, actuators, sensors, electrochemical applications, solid oxide fuel cells, and other devices [1]. Although the structural, elastic, dielectric, and piezoelectric properties of crystals made of pure ABO<sub>3</sub>-type perovskites and their alloys have been extensively studied, further research is still needed.

**Table 1.** Structural and Mechanical Properties

Pressure (GPa)	a (Å)	B (GPa)	C <sub>11</sub> (GPa)	C <sub>12</sub> (GPa)	C <sub>44</sub> (GPa)	G (GPa)	B/G
0	5.606	30.3	49.5	20.7	13.6	13.9	3
[2]	5.592	23.6	52.8	9.1	5.1	9.5	2



**Figure 1.** The unit cell of crystal

It was observed from the obtained band structures that the material shows metallic properties. Elastic calculations were performed using the stress-strain method (Table 1). As a result, it was concluded that the material is mechanically stable. Also, optical properties were calculated.

### References

1. S.-W. Baek, Jung Hyun Kim, J. Bae, Characteristics of ABO<sub>3</sub> and A<sub>2</sub>BO<sub>4</sub> (AfSm, Sr; BfCo, Fe, Ni) samarium oxide system as cathode materials for intermediate temperature-operating solid oxide fuel cell, Department of Mechanical Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, 373-1, Guseong-Dong, Yuseong-Gu, Daejeon, 305-701, Republic of Korea Received 15 July 2007; received in revised form 23 November 2007; accepted 5 December 2007, Solid State Ionics, vol. 179, pp. 1570, 2008.
2. Babban Kumar Ravidas, Mukesh Kumar Roy, and Dip Prakash Samajdar\*, Design Insights and Photovoltaic Performance Analysis of Non-Lead Inorganic RbSnX<sub>3</sub> (X = I, Br, Cl) Perovskites through Coupled Density Functional Theory and SCAPS-1D Simulation Frameworks, ACS Appl. Electron. Mater. 2024, 6, 5126–5150

## Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> Soğurucu İnce Filminde Sülfür Konsantrasyonunun Yapısal, Optik ve Elektriksel Özelliklere Etkisi

**Gülden Yıldız Sengüler<sup>a</sup>, Ece Kutlu Narin<sup>a</sup>, Sefer Bora Lişesivdin<sup>b</sup>, Tülay Serin<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara, Türkiye

<sup>b</sup>Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06500, Ankara, Türkiye

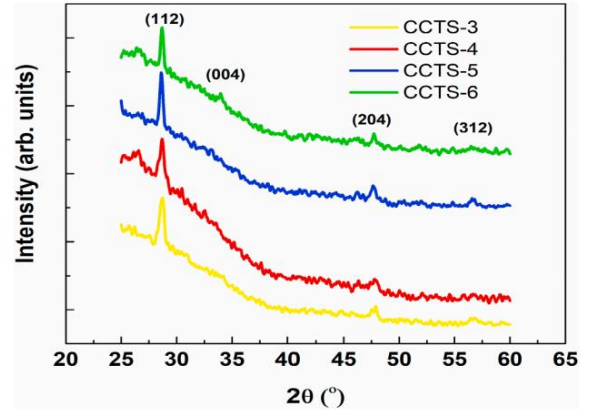
Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> (CCTS), yaklaşık 1,5 eV'lik bir optik enerji bant aralığına ve 10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup>'den daha yüksek bir soğurma katsayısına sahip bir yarıiletkenidir [1]. Ayrıca, CCTS' yi oluşturan malzemeler toksik değildir ve ucuzdur. CCTS' nin bu özellikleri, onu düşük maliyetli ince film güneş hücrelerinin soğurucu katmanını oluşturmak için en ilginç malzemelerden biri yapar [2]. CCTS ince filmleri sol-gel, sprey prolizi, elektrokaplama ve termal buharlaştırma gibi farklı kaplama yöntemleri kullanılarak sentezlenebilir. Bu filmlerin yapısal, optik ve elektriksel özellikleri; kaplama yöntemine, alt tabakaya, tavlama sıcaklığına, çözücülere ve kaplama çözeltisindeki malzemelere bağlı olarak farklılık gösterir. CCTS ince filmlerinin ayrıca fotokatalitik ve fotodedektör gibi başka potansiyel uygulamaları da vardır [3,4].

Bu çalışmada, Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> (CCTS) ince filmleri sol-gel yöntemiyle daldırılarak cam alt tabakalar üzerine büyütülmüştür. Çözeltideki tiyoüre molaritesinin film özellikleri üzerindeki etkisi incelenmiştir. **Tablo 1**'de verildiği gibi filmlerin optik geçirgenlik ölçümleri yardımıyla bulunan optik bant aralığı değerleri ise tiyoüre molaritesinin artmasıyla 1,7 eV'den 1,4 eV'ye düşmüştür [5].

**Tablo 1:** Farklı tiyoüre molaritelerinde büyütülen ince filmlerin optik bant aralığı ve öz direnç değeri

Films	E <sub>g</sub> (eV)	ρ (ohm.cm)
CCTS-3	1.70	0.03
CCTS-4	1.60	0.07
CCTS-5	1.40	0.29
CCTS-6	1.43	2.12

Hazırlanan filmlerin yapısını belirlemek için X-ışını kırınımı (XRD) ve Raman Saçılması kullanılmıştır. XRD spektrumları, CCTS filmlerinin tetragonal bir kristal yapıda kristalleştiği ve tercih edilen yönelimin (112) düzlemi olduğu **Şekil 1**'de gösterilmiştir. Raman spektroskopik sonuçları, düşük tiyoüre molaritesine sahip filmlerin Cu<sub>2</sub>-xS ve Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> olmak üzere iki faza sahip olduğunu göstermiştir. Tiyoüre molaritesi arttıkça, bu Cu<sub>2</sub>-xS fazı kaybolmuştur. Morfolojik özellikler Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ile incelenmiştir. Hazırlanan filmlerin elektriksel dirençleri de oda sıcaklığında iki nokta yöntemi ile incelenmiştir. Genel olarak filmlerin yapısal, optik, morfolojik ve elektriksel özellikleri çözeltideki tiyoüre molaritesinden etkilenmiştir [5].



**Şekil 1:** Farklı tiyoüre molaritelerinde büyütülen CCTS filmlerinin XRD spektrumları

### Kaynakça

1. Maldar, P. S., et al. "Temperature dependent properties of spray deposited Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> (CCTS) thin films." *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 28 (2017): 18891-18896. (Times New Roman, Eğik, 10 punto)
2. Xie, Yahong, et al. "Highly crystalline stannite-phase Cu<sub>2</sub>XSnS<sub>4</sub> (X= Mn, Fe, Co, Ni, Zn and Cd) nanoflower counter electrodes for ZnO-based dye-sensitized solar cells." *Journal of Alloys and Compounds* 696 (2017): 938-946.
3. Guan, Hao, Xiao Ma, and Jia Zhao. "Synthesis and photocatalytic property of Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> nanocrystals with stannite and wurtzite structure." *Micro & Nano Letters* 15.4 (2020): 258-260.
4. Hammami, H., et al. "Synthesis, growth and characterization of Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> thin films via thermal evaporation method." *Optik* 227 (2021): 166054.
5. Senguler, Gulden Yıldız, et al. "Effect of sulfur concentration on structural, optical and electrical properties of Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> absorber film for photovoltaic devices." *Physica B: Condensed Matter* 648 (2023): 414424.



## Rotary encoders using optical fibers with four-directional wire-grid-polarizers

Hajime Kobayashi and Yoshiaki Kanamori

*Department of Robotics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan*

Optical rotary encoders based on the principle of polarization attract attention as compact and high resolution rotary encoders. In this study, we proposed polarization-based rotary encoders whose output signals are transmitted by optical fibers. The proposed rotary encoder was developed by fabricating four wire-grid-polarizers oriented in different directions on a single substrate and bonding it to a multicore optical fiber. We detected angles with an error of less than  $0.92^\circ$  with the developed rotary encoder.

Rotary encoders that detect rotational angles are used in various industrial fields. In recent years, the increasing demand for high-performance small machines has created a need for compact, high resolution rotary encoders. An optical rotary encoder based on the principle of polarized light detection is attracting attention as compact, high resolution rotary encoders [1]. This type of encoder is characterized by its ability to be miniaturized while maintaining resolution. Sensors using optical fibers are electromagnetically passive, so they can be used in locations where other types of sensors cannot be used, for example, in high and variable electric field environments where there are explosion risks [2]. In this study, we proposed polarization-based rotary encoders whose output signals were transmitted by optical fibers. The use of optical fiber for signal transmission in polarization-based rotary encoders is expected to expand the environment in which polarization-based rotary encoders can be used. Figure 1 shows the schematic drawing of the proposed rotary encoder. Unpolarized light emitted from the light source passes through the optical fiber, exits the opposite end face, and is reflected by the rotating polarizer. The reflected light becomes linearly polarized light and passes through the four wire-grid-polarizers (WGP) oriented at  $0^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$ , and  $135^\circ$ . Four WGP are placed on the four cores of the multicore optical fiber end face. The transmitted light passes through the optical fiber and is detected by photodiodes connected to the opposite end face. The polarization angle of the reflected light can be calculated from the four detected light intensities.

Four WGP oriented at  $0^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$ , and  $135^\circ$  were fabricated on a single glass substrate by electron beam lithography and lift-off process. The multicore optical fiber capable of polarization detection was fabricated by bonding a glass substrate with four WGP to the end face of the multicore optical fiber. The proposed rotary encoder was developed by assembling the optical fiber and a rotating polarizer.

Experiments to detect the angle of a rotating stage were conducted using the rotary encoder we developed. Figure 2 shows the result of detecting angular positions with the developed rotary encoder. This result demonstrated that the developed encoder in this study can detect angles. The maximum error between the detected angle and the true angle of the rotating stage was  $0.92^\circ$ .

In conclusion, we proposed and developed a polarization-based rotary encoder whose output signals were transmitted by an optical fiber. Detecting angle experiment was conducted with developed rotary encoder and detected angle with an error of less than  $0.92^\circ$ .

We acknowledge Mr. Katsumi Sakuma, Dr. Taiyu Okatani, and Dr. Naoki Inomata for valuable comments.

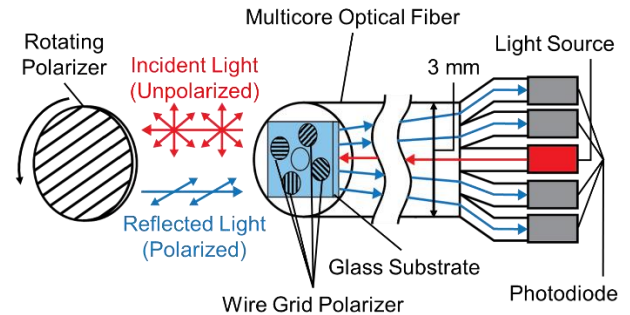


Fig. 1: Schematic drawing of the proposed rotary encoder.

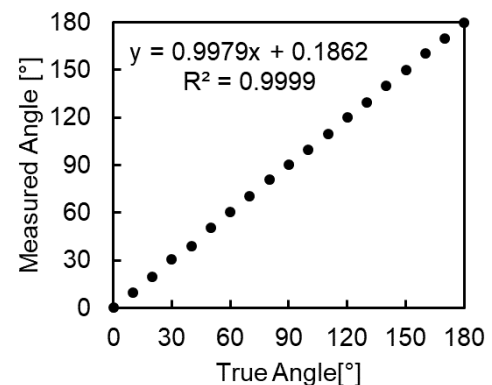


Fig. 2: Result of detecting angular positions with the developed rotary encoder.

## References

1. S. Ikeda, E. Higurashi, T. Suga and T. Oguchi, "Miniaturized polarization sensors integrated with wire-grid polarizers", 2014 International Conference on Electronics Packaging (ICEP), 376-379 (2014).
2. C. Pendao, I. Silva, "Optical Fiber Sensors and Sensing Networks: Overview of the Main Principles and Applications", Sensors **22**(19), 7554 (2022).

## İki Boyutlu Yanal Heteroyapıların Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi Helin Bahar Aksoy<sup>1</sup>, Yasin Zengin<sup>1</sup>, Rabia Çağlayan<sup>2</sup>, Yeşim Moğulkoç<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara

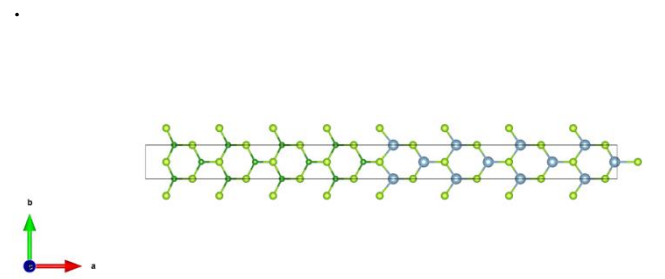
<sup>2</sup>Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06100, Ankara

İki boyutlu (2B) malzemeler, benzersiz elektronik, optik ve manyetik özellikleriyle son yıllarda malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanlarında büyük ilgi uyandırmıştır. Bu malzemelerin farklı katmanlar halinde birleştirilmesiyle oluşturulan heteroyapılar, yeni özellikler ve işlevsellikler sunarak, özellikle elektronik ve spintronik uygulamalarda önemli bir potansiyele sahiptir. Heteroyapılar genellikle iki ana türe ayrılmaktadır: Dikey heteroyapılar, katmanların üst üste istiflendiği yapılar iken, yanal heteroyapılar malzemelerin düzlem içinde birleştirildiği yapılar olarak karşımıza çıkmaktadır. Her iki yapı türü de farklı etkileşimler ve elektronik özellikler sunarak, 2B malzemelerin potansiyelini daha da genişletmektedir [1].

Yanal heteroyapılar, dikey heteroyapılara kıyasla daha düzenli bir yüzey yapısına ve daha yalın bir bant hizalamasına sahiptir [2]. Bu özellikler, iki malzeme arasındaki ara yüzde daha basit bir enerji geçişine olanak tanıyarak, elektronik özelliklerin daha etkili bir şekilde kontrol edilmesini sağlar. Yanal heteroyapılarda bölgeler arasındaki kovalent bağlar, arayüzün epitaksiyal düzenliliğini destekler ve bu da heteroyapının optik ve elektriksel özelliklerini belirgin şekilde iyileştirir. Tüm bu avantajlar, yanal heteroyapıları pratik uygulamalar için daha cazip kılmaktadır.

2B yanal heteroyapılarının potansiyel bir aygıt tasarımında kullanılabilmesi için kuramsal açıdan arayüzün atomik yapısı, elektronik ve termal iletimin sınırlar boyunca nasıl gerçekleştiği ve hetero arayüzdeki bant hizalaması belirlenmelidir. 2015'ten bu yana bu konularla ilgili önemli ölçüde kuramsal çalışmalar yapılmış olup, özellikle elektrostatik çözümlenmelerle birleştirilen ilk ilkel hesaplamalar, 2B hetero arayüzlerinin, geleneksel 3B hetero arayüzlerine göre üstünlük sağladığını göstermiştir.

Bu çalışmada, B-AlSe<sub>2</sub> iki boyutlu yanal heteroyapılarının fiziksel özellikleri kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. VASP paket programı kullanılarak yapılan hesaplamalarla bu heteroyapıların kristal yapıları, elektronik bant yapıları ve optik özellikleri araştırılmıştır.



Şekil 1: 2D B-AlSe<sub>2</sub> iki boyutlu yanal heteroyapı

**Teşekkür:** Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu ([hymf.ankara.edu.tr](http://hymf.ankara.edu.tr)) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır.

### Kaynakça

[1] Kai Cheng, Yu Guo, Nannan Han, Xue Jiang, Junfeng Zhang, Rajeev Ahuja, Yan Su, Jijun Zhao; 2D lateral heterostructures of group-III monochalcogenide: Potential photovoltaic applications. Appl. Phys. Lett. 2 April 2018; 112 (14): 143902.

[2] Biyuan Zheng, Chao Ma, Dong Li, Jianyue Lan, Zhe Zhang, Xingxia Sun, Weihao Zheng, Tiefeng Yang, Chenguang Zhu, Gang Ouyang, Gengzhao Xu, Xiaoli Zhu, Xiao Wang, and Anlian Pan. Band Alignment Engineering in Two-Dimensional Lateral Heterostructures. Journal of the American Chemical Society 2018 140 (36), 11193-11197.

## THz Yönlendirmesi İçin Delik Çekirdekli Optik Fiberlerde Hibrit Kaplama Elemanlarının İncelenmesi

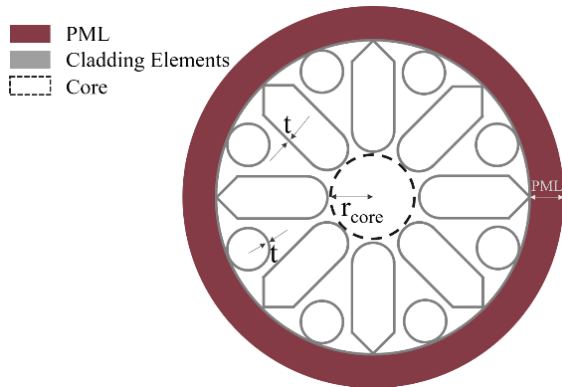
Hilal Kayabaşoğlu<sup>1</sup>, Samet Akçimen<sup>2</sup> ve Mustafa Ordu<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Bilkent Üniversitesi, Fizik, 06800 Ankara

<sup>2</sup>UNAM-Ulusal Nanoteknoloji Araştırma Merkezi, Bilkent Üniversitesi, 06800 Ankara

Delik çekirdekli optik fiberlerde, gelen ışık boş bir bölgede hapsedilir ve yönlendirilir. Bu fiberler, hava ortamının ultra-düşük Rayleigh saçılma ve doğrusal olmayan katsayılarını kullanarak, cam yapıli fiberlere kıyasla çok daha düşük kayıpla ışık iletimini sağlar [1]. Bu özellikler sensör cihazları, kuantum optiği ve kuantum bilgi işlem gibi uygulamalarda önemli ilerlemeler kaydedilmesini sağlamıştır [2]. Delik çekirdekli optik fiberlerin terahertz aralığındaki potansiyel kullanımları da son yıllarda dikkat çekmektedir [3]. Elektromanyetik spektrumun terahertz (THz) bölgesi, mikrodalgalar ile görünür ışık arasında yer alır ve 0.1 ile 10 THz arasındaki frekans aralığını ve buna karşılık gelen 3 mm ile 30  $\mu\text{m}$  arasındaki dalga boylarını kapsar [4]. Bu geniş frekans aralığı, çok çeşitli uygulamalar için önemli bir potansiyel sunmaktadır. Ancak THz radyasyonu açık havada yüksek yayılma kayıplarına sahiptir; bu sorun dalga kılavuzlarıyla aşılabılır. THz dalgalarının yüksek malzeme soğurma kayıpları nedeniyle katı çekirdekli dalga kılavuzlarında kullanımı sınırlıdır. Delik çekirdekli optik fiberler, düşük kırılma indisine sahip hava çekirdeği ile ışığı yönlendirerek kaplama ile etkileşimi azaltır ve THz radyasyonu için katı çekirdekli fiberlerden daha verimli hale gelir [4].

Önerilen özgün fiber tasarımı **Şekil 1**'de gösterilmektedir. Bu tasarım, çekirdek etrafında negatif eğrilikli yarım çemberler ve PML yakınında bir dikkörtgenle birleştirilerek döndürülmüş bir kare içeren, 45° açılıklarla yerleştirilmiş kaplama elemanlarından oluşmaktadır. Bu kaplama elemanları, ışık enerjisinin çoğunu çekirdeğe hapsederek malzeme kaybının etkisini en aza indirir. Bu kaplama elemanları arasında 45° aralıklarla daireler yerleştirilmiştir. THz bölgesinde daha düşük malzeme kayıpları sağladığı için kaplama materyali olarak siklo-olefin kopolimer (COC, ticari ismiyle TOPAS) kullanılmıştır. COMSOL Multiphysics ile yapılan sayısal simülasyonlar, fiberi optimize etmek için sonlu elemanlar yöntemi ve elektromanyetik dalgalar, frekans bölgesi (Electromagnetic Waves, Frequency Domain, EWFd) çözücüsü kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Fiber tasarımı, ışığı hapseden, kayıpları azaltan ve iletim verimliliğini artıran anti-rezonans yansıma mekanizmasını kullanır. Bu mekanizma hassas geometrik ayarlamalar ve kaplama elemanlarının yerleştirilmesini gerektirir.

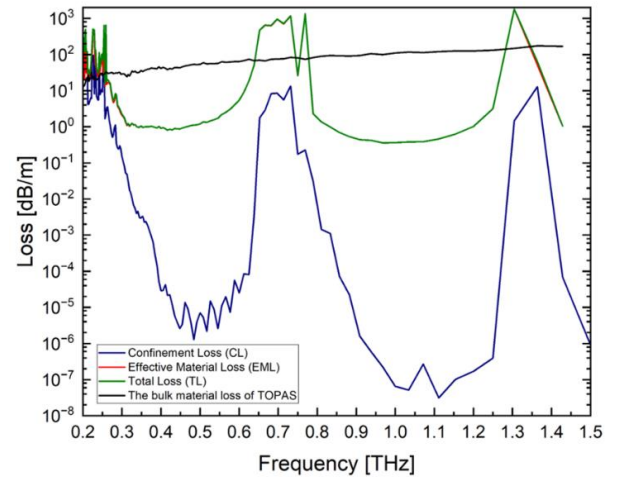


Şekil 1: Önerilen fiberin kesitsel şematik tasarımı.

### Kaynakça

1. F. Poletti, "Nested antiresonant nodeless hollow core fiber", *Optics Express*, **22** (20), 23807–23828 (2014).
2. D. Yin, J. P. Barber, A. R. Hawkins, H. Schmidt, "Waveguide loss optimization in hollow-core ARROW waveguides", *Optics Express*, **13** (23), 9331–9336 (2005).
3. V. Setti, L. Vincetti, A. Argyros, "Flexible tube lattice fibers for terahertz applications", *Optics Express*, **21** (3), 3388–3399 (2013).
4. Md. S. Islam vd., "Terahertz optical fibers", *Optics Express*, **28** (11), 16089–16117 (2020).

Ağ oluşturma, hesaplama alanını ayırık hale getirerek doğru simülasyon sonuçları elde etmek için gereklidir. Zaman, hız ve doğruluğu dengelemek için optimal bir ağ boyutu seçilmiştir. Mükemmel uyumlu katman (Perfectly Matched Layer, PML), simülasyon sırasında açık sınır problemlerini çözmeye yardımcı olan bir emici katmandır. Bu nedenle, önerilen fiber tasarımının gerçekçi çalışma koşullarını simüle etmek amacıyla PML için yansıma sınır koşulu gibi uygun sınır koşulları uygulanmıştır. Fiber tasarımı optimizasyonu ile **Şekil 2**'de gösterilen en düşük iletim kaybı ve toplam kayıp (iletim kaybı ve malzeme soğurmasından kaynaklı kayıpların toplamı) sırasıyla 1.11 THz'de  $3.1 \times 10^{-8}$  dB/m ve 0.96 THz'de 0.358 dB/m olarak belirlenmiştir. Bulunan bu değerler ile önerilen tasarımın optik iletim performansının düşük kayıplı iletim için uygun olduğu bulunmuştur.



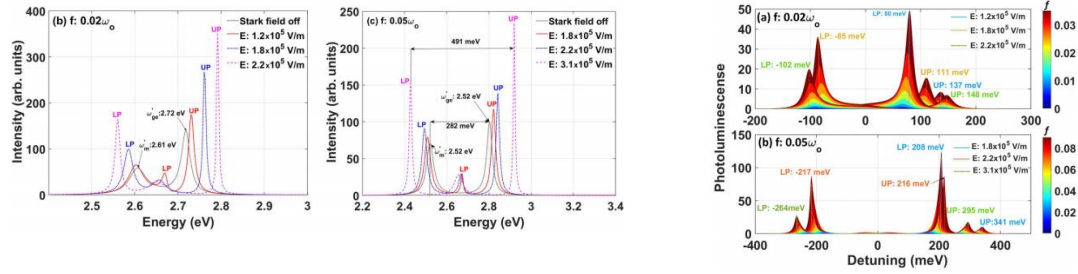
Şekil 2: İletim ve toplam kayıpların frekansa bağlı değişimi.

## Stark Control of Plexcitonic States in Incoherent Quantum Systems

Hira Asif and Ramazan Şahin

Akdeniz University, Department of Physics, 07058, Antalya Turkey

Electro-optic control of quantum dots embedded in the plasmonic nanocavities enables active tuning of photonic devices for emerging applications in Quantum optics. Here, we demonstrate the coherent control of plexcitonic states in (i) an off-resonant and (ii) a resonant coupled quantum systems through optical Stark effect (OSE). We analyze a hybrid plasmon-emitter system which exhibits tunable photoluminescence (PL), Stark induced transparency (SIT) and vacuum Rabi splitting due to quadratic Stark shift in the degenerate states of quantum emitter (QE). In addition, a resonantly coupled system shows path interference of hybrid plexcitonic states due to Stark-induced splitting in a two-level QE. Our study shows that Stark tuning of plexcitons not only mitigates decoherence in the quantum system but it also stimulates on/off switching of spontaneous photon emission in the visible regime.



A coherent interaction of plasmon cavity with exciton generates mixed quantum states also known as plexcitonic dressed states which inherently possess all the information of controlled quantum system. Tuning these states as a function of coupling strength yields two distinct phenomena i.e. Fano Resonance (FR) and vacuum Rabi Splitting (RS) for intermediate and strong coupling regimes, respectively [1].

spectral modulation by changing the QE's resonance frequency through quadratic Stark shift [3]. A small perturbation in the applied field modulates the energy eigenstates of quantum emitter which modifies the hybrid modes in a coherent manner. The pronounced resonant shift in the excited levels result in the coherent interference of dressed states leading to tunable PL.

Fig 2: (b,c) Stark tuning of plexcitonic states and (a,b) Tunable photoluminescence in VIS regime.

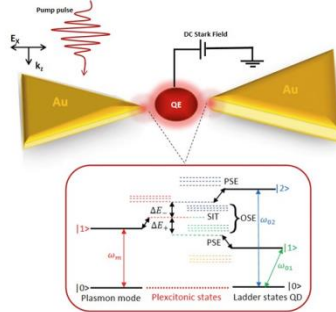


FIG. 1. A hybrid plasmonic system with a three-level QE.

We analyze the spectral and temporal evolution of plexcitonic modes coupled harmonic oscillator model [2] and demonstrate the coherent control of plexcitonic states in the presence of QE, and their

Stark-induced transparency is observed in hybrid states in both weak and strong coupling regimes. We also investigated the spectral dynamics of hybrid plexciton modes, in a resonantly coupled plasmon-emitter system, due to splitting of energy eigenstates of QE. Our results of Stark-induced splitting in plexcitons show the signature of Mollow triplets with maximum energy of 491 meV between upper and lower plexcitons. PL spectra shows active tuning of photon transition and on/off switching of spontaneous emission in the visible regime. Our proposed coherent control of incoherent quantum states indicate its potential in ultrafast switching, quantum information processing and quantum computing applications.

### Kaynakça

1. P. Vasa and C. Lienau, Strong light-matter interaction in quantum emitter/metal hybrid nanostructures, ACS Photonics 5, 2 (2018).
2. H.Asif, A. Bak, M. E. Taşgın and R. Sahin, "Voltage-controlled extraordinary optical transmission in the visible regime", Physical Review B, 109, 125425 (2024).
3. H.Asif and R. Sahin, "Stark-control of plexcitonic states in incoherent quantum systems", Physical Review A, 110, 0237313 (2024).

# Numerical and experimental study of free-space coupling to individual H-shaped meta-atoms in the THz range

Ying Huang and Yoshiaki Kanamori

Department of Robotic, Graduate School of Engineering, Tohoku University, 980-8579 Sendai, Japan

To advance terahertz (THz) technologies for upcoming beyond-5G networks, free-space coupling to individual meta-atoms has gained attention, as it offers potential for THz devices with high sensitivity and fast manipulation speeds. This work proposed a numerical approach capable of visualizing the behavior of individual H-shaped meta-atoms at different THz frequencies, and the calculated transmittance agreed with the measured data. This work helps develop novel THz devices, such as compact and high-sensitive sensors.

To advance terahertz (THz) technologies, which hold potential for the development of upcoming beyond-5G networks, metamaterials capable of controlling THz waves on demand are of interest. Recent studies focus on free-space coupling to individual meta-atoms, rather than infinite array, as the former offers precise control over quantum systems, enhancing sensitivity and manipulation speeds [1]. Accurate calculation of the near- and far-field behavior of individual meta-atoms can aid the design process. However, conventional calculation models apply periodic boundary conditions to the geometric model, actually simulating an infinite array structure rather than individual meta-atoms. This difference leads to deviations between calculations and measurements.

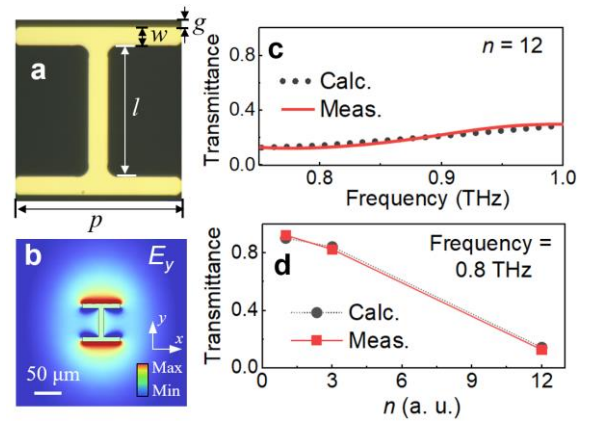
This work proposed a numerical model to calculate the behavior of individual meta-atoms using COMSOL Multiphysics 6.0 (COMSOL, Inc.) based on the finite element method. A scattered field was employed to calculate the total field, including the responses of the meta-atoms, while a full field was used for the background field. The response of H-shaped meta-atoms (H-atoms) arranged in an  $n \times n$  grid was calculated [2], with geometric parameters listed in Table 1. Figure 1(a) shows a fabricated single unit of H-atoms. Figure 1(b) presents the calculated  $E_y$ -field of the single unit under y-polarized THz incidence at 0.65 THz, indicating that it excited an electrical dipolar resonant mode. Figure 1(c) plots the transmittance spectra of H-atoms with  $n = 12$  under y-polarized THz waves spanning from 0.75 THz to 1.0 THz, with calculated data agreeing with

measured results. Figure 1(d) shows the transmittance at 0.8 THz as a function of  $n$ , where measured transmittance decreases with increasing  $n$ , consistent with the calculations prediction.

This work can help us understand the crucial role of individual meta-atoms, thereby promoting the development of advanced THz components. A part of this work was supported by JST, CREST Grant Number JPMJCR2102. The authors appreciate Dr. Naoki Inomata and Dr. Taiyu Okatani for their comments.

**Table 1:** Geometrical parameters of a single H-atom.

Symbol	Design ( $\mu\text{m}$ )	Fabrication ( $\mu\text{m}$ )
$w$	9.00	8.67
$g$	1.50	1.69
$l$	51.00	51.06
$p$	66.00	66.00



**Figure 1:**

(a) The fabricated single unit of H-atoms. (b) The calculated  $E_y$ -field of the single H-atom. (c) Transmittance spectra of H-atoms with  $n$  of 12. (d) Transmittance of H-atoms as a function of  $n$ .

## References

1. S. Rajabali, S. Markmann, E. Jöchl, M. Beck, C. A. Lehner, W. Wegscheider, J. Faist, and G. Scalari, “An ultrastrongly coupled single terahertz meta-atom”, *Nature Communications* **13** (1), 2528 (2022).
2. Y. Huang, T. Okatani, N. Inomata, and Y. Kanamori, “A reconfigurable ladder-shaped THz metamaterial integrated with a microelectromechanical cantilever array”, *Applied Physics Letters*, **122** (5), 051705 (2023)

## Au/TiO<sub>2</sub>/p-GaAs (MIS) Diyotun Elektronik Özellikleri Üzerine Aydınlatma Etkisi

İrfan Ünal<sup>1</sup>, Adem Tataroğlu<sup>2</sup>

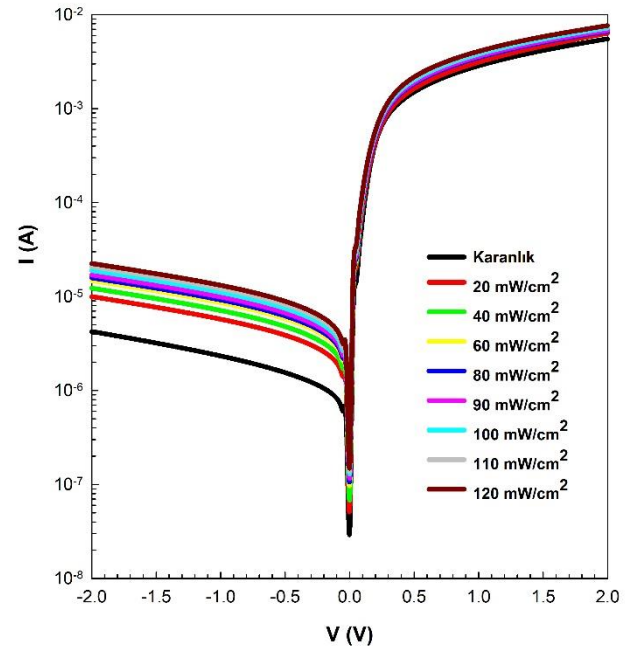
<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Fotonik Bilimi Mühendisliği Ana Bilim Dalı, Ankara

<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Ankara

Bu çalışmada, ilk önce titanyum dioksit (TiO<sub>2</sub>) ince film radyo frekans (RF) magnetron püskürtme tekniği kullanılarak p-GaAs yarıiletken üzerine kaplandı. Daha sonra, termal buharlaştırma sistemi kullanılarak omik ve doğrultucu kontakların oluşturulması ile Au/TiO<sub>2</sub>/p-GaAs metal-yalıtkan-yarıiletken (MIS) diyot hazırlandı. Hazırlanan diyotun elektronik özelliklerini belirlemek için karanlık(0)-120 mW/cm<sup>2</sup> aralığında farklı aydınlatma şiddetleri altında ölçülen akım-voltaj (I-V) karakteristikleri kullanılmıştır. Böylece, MIS diyotun elektronik özellikleri üzerindeki aydınlatma şiddetinin etkisi araştırılmıştır.

Hazırlanan yarıiletken diyota -2 V ile +2 V arasında gerilim uygulanarak yapılan ölçümlerden elde edilen ters ve doğru beslem akım-voltaj karakteristikleri Şekil 1'de gösterilmiştir. Şekilden hazırlanan MIS diyotun aydınlatma altında bir tepki verdiği görülmektedir. Doğru beslem bölgesinde, akım ve voltaj değerleri pozitifdir ve bu bölgede diyot normal bir diyot gibi davrandığı için fotodiyot uygulamaları için uygun değildir. Ters beslem bölgesinde ise, elektron-deşik çiftlerinin oluşumu nedeniyle fotoakım artan aydınlatma şiddeti ile birlikte artmaktadır. Bu durumda diyotun aydınlatma altındaki ters akımı, karanlık altındaki ters akımından daha büyüktür.

Fotodiyotlar, üzerlerine gelen ışığı soğurarak ters akım oluşturdukları için ters gerilimle çalışan devre elemanlarıdır. Bir diyot aydınlatmaya maruz kaldığında, diyotun tükenim bölgesinde elektron-deşik çiftleri oluşur. Daha sonra, bu çiftler uygulanan elektrik alanı altında ayrılır. Öte yandan, bu ayrışma ters öngerilim bölgesinde daha etkilidir. Işık altında yük taşıyıcılarının sayısı artar. Özellikle, ters öngerilim bölgesinde, bu taşıyıcılar karanlık akıma ek bir akım oluşturur. Ters öngerilim akımına fotoakım denir [1,2].



Şekil 1: Au/TiO<sub>2</sub>/p-GaAs diyotun I-V karakteristikleri

Ayrıca, hazırlanan diyotun I-V karakteristikleri termiyonik emisyon (TE) teorisi ile analiz edildi [3,4]. Böylece diyotun ters beslem doyma akımı (I<sub>0</sub>), idealite faktörü (n) ve bariyer yüksekliği (Φ<sub>B0</sub>) gibi temel elektronik parametreleri belirlendi.

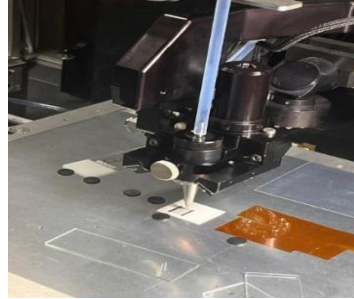
### Kaynakça

1. D. Wood, "Optoelectronic Semiconductor Devices", Prentice Hall, New York, (1994).
2. J. Singh, "Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures", Cambridge University Press, New York, (2003).
3. S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2nd Ed., Wiley, New York, (1981).
4. E.H. Rhoderick, R. H. Williams, Metal Semiconductor Contacts, 2nd Ed., Clarendon Press, Oxford, (1988).

**AEROSOL JET BASKI YÖNTEMİ İLE ESNEK KAĞIT ALTTAŞ ÜZERİNE KARBON ELEKTROT GELİŞTİRİLMESİ****Kemal Efe ÖZDEMİR<sup>1</sup>, Kaan DENGİZ<sup>1</sup>, Mahmut AYDIN<sup>1</sup>, Berk SERBEST<sup>1,3</sup>, Parisa PASHAEI<sup>2,3</sup>, Nihan AKIN SÖNMEZ<sup>1,2,3</sup>, Süleyman ÖZÇELİK<sup>1,2,3,4</sup>***[1] Gazi Üniversitesi, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Fotonik Bölümü 06560 Ankara**[2] Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fotonik Bilimi ve Mühendisliği Ana Bilim Dalı 06560 Ankara**[3] Gazi Üniversitesi Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi 06560 Ankara**[4] ASENTEK Savunma ve Enerji Teknolojileri, Ostim Teknopark Turuncu Bina, 06374 Ankara*

Kağıt bazlı sensörler gıdaların tazelik durumunun takibinde yeni bir yaklaşım olarak baskı teknolojisi ile geliştirilen sensörlerin kullanımının yaygınlaşacağı öngörülmektedir. Bu sensörler, kağıt malzeme üzerine karbon mürekkep gibi iletken materyallerin uygulanmasıyla oluşturulur. Nitroselüloz kağıt üzerine aerosol jet baskı cihazı kullanarak karbon mürekkep ile yapılan sensörler, çevre dostu olup geliştirilmesi ve üretilmesi açısından umut vadetmektedir. Ayrıca aerosol jet baskı tekniği kullanılarak daha hassas ve verimli algılama çözümleri sunar. Amonyak gazı sensör yüzeyine ulaştığında, adsorpsiyon ve kimyasal reaksiyonlar sonucu iletkenlikte değişiklikler meydana gelir. Bu değişiklikler, gazın algılanmasını sağlayan sensörün elektriksel özelliklerini etkiler.[1] Ayrıca seçilen kağıdın nem oranı %85'in altında olmalıdır ve sensör 4°C ile 25°C arasında ölçüm yapabilecek yeterliliğe sahip olmalıdır. Gazın yüzeyle etkileşimleri sonucunda elektriksel direnç veya iletkenlik değişimlerini ölçer.[2] Bu çalışmada, nitroselüloz kağıda aerosol jet baskı cihazıyla karbon mürekkep kullanılarak yapılan kağıt bazlı karbon elektrot ile gaz algılama sensörünün geliştirilmesi hedeflenmektedir. Kullanılan karbon mürekkep su bazlı bir mürekkep olmasının yanı sıra ağırlıkça %5 karbon siyahı iletken malzemesi ve floropolimer yüzeye tutunmayı arttıran katkı içerir. Karbon mürekkebi (Novacentrix JR-038) ve Aerosol Jet Baskı (OPTOMEK AJ 5X) sisteminde nitroselüloz bazlı filtre kağıt üzerine 1mm'lik nozül ve ultrasonik atomizer kullanılarak karbon mürekkep baskı işlemi gerçekleştirildi. Direnç ölçümünden önce nitroselüloz kağıt ısıtıcı cihazı (ISOLAB) ile 5, 10 ve 15 dakika 120°C'de tavlama işlemi yapıldı. Mikroskop (Leica DM 6600M) ile yapılan ölçümler sonucu elektrot çizgi genişliği 200µm, Profilometre cihazı (Veeco Dektak 150) elektrot kalınlığı ise 322,50 nm ölçüldü, son olarak Multimetre (Fluke 289) ile yapılan direnç ölçümlerinde 28 kΩ-25 MΩ arasında sonuçlar alınmıştır.

Bu çalışma TÜBİTAK 2209-A programı 1919B0123117551 nolu ve Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı CB-SBB-2019K12-149045 kodlu Fotonik Malzeme ve Elektro-optik Aygıt Geliştirme projeleri ile desteklenmiştir.



Şekil 1.. Aerosol Jet Baskı Sistemi ile Karbon Mürekkep ile Sensörün nitroselüloz alttaş üzerine



Şekil 2.. Esnek kağıt alttaş üzerine karbon dedektörümüz

**Kaynakça**

1. Liu, Z., Zhang, M., & Wang, L. (2017). Flexible and stretchable gas sensors based on carbon nanomaterials. Sensors and Actuators B: Chemical, 241, 1115-1130.
2. Ronil J. Rath, Farshad Oveissi, Zahra Shahrabaki, Jimmy Yun, Sina Naficy, Fariba Dehghani, Syamak Farajikhah, A paper-based sensor capable of differentiating ammonia and carbon dioxide gas, Materials Today Communications, Volume 35,2023,105895

## Single-mode silicon ribbon waveguides for 300 GHz integrated circuits

Kohei Chiba and Yoshiaki Kanamori

*Department of Robotics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan*

Dielectric waveguides attract attention for low-loss transmission of sub-terahertz waves, which are easily absorbed by materials and atmosphere. In this study, we investigated the transmission characteristics of a single-mode waveguide made of high-resistivity silicon. A high-resistivity silicon waveguide with 250- $\mu\text{m}$ -width and 150- $\mu\text{m}$ -height was revealed to be a single-mode waveguide at 300 GHz by calculations. The fabricated waveguide achieved a transmittance of 0.32 at 300 GHz.

Sub-terahertz waves, which are expected for application to the next generation of communications, 6G, have broad bands, but there is a problem that signal intensity can easily decrease due to large atmospheric attenuation, path loss, and material loss [1]. Therefore, transceiver's circuits for modulating sub-terahertz waves need to be low-loss. All-dielectric waveguide allows low-loss sub-terahertz transmission in circuits. High-resistivity silicon is a material commonly used in the sub-terahertz band. Ribbon waveguides consisting of a high-resistivity silicon core and air cladding are simple, easy to fabricate, and extremely low-loss [2]. In realizing circuits that modulate sub-terahertz waves, it is important to clarify the properties of the waveguide, which is a fundamental component of circuits.

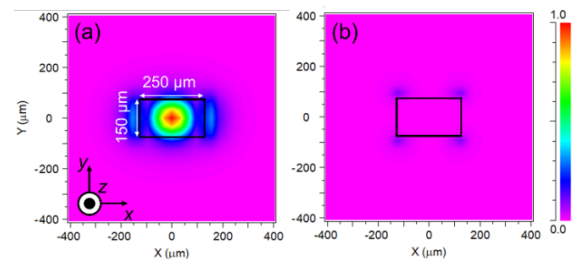
In this study, we demonstrated a single-mode ribbon waveguide for a frequency of 300 GHz. We investigated single-mode conditions and designed a single-mode ribbon waveguide. The waveguide was fabricated and transmittance was measured to obtain waveguide properties.

The ribbon waveguide has a rectangular cross-section with width  $W$  and height  $H$ . The  $x$ -axis is the width direction, the  $y$ -axis is the height direction, and the  $z$ -axis is the wave propagation direction. The waveguide is designed to propagate  $x$ -polarized single-mode waves, i.e.,  $Ex_{11}$ , when  $x$ -polarized waves at 300 GHz enter it. Propagation conditions for each mode were obtained by calculating the normalized propagation constant (NPC). NPC was calculated using the finite element method (FEM), and  $W = 250 \mu\text{m}$  and  $H = 150 \mu\text{m}$  were found to be a single-mode condition at 300 GHz. Figure 1 shows the cross-sectional intensity profiles of propagating waves calculated by FEM. A bend ribbon waveguide was designed based on the calculated single-mode waveguide and fabricated by micromachining processes (Fig. 2 inset). Transmittance of the bend waveguide was calculated by finite-difference time-

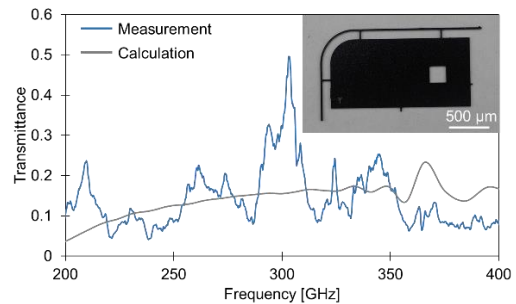
domain method. Transmittance was measured using a terahertz frequency-domain spectrometer. Figure 2 shows the transmittance of the single-mode ribbon waveguide. The transmittance at 300 GHz was 0.16 for calculation and 0.32 for measurement. Sub-terahertz waves were propagated in a single-mode ribbon waveguide successfully.

In summary, we designed and fabricated a 250- $\mu\text{m}$ -wide and 150- $\mu\text{m}$ -high single-mode ribbon waveguide at 300 GHz. We achieved 300 GHz wave propagation with transmittance of 0.32.

A part of this work was supported by JST SPRING, Grant Number JPMJSP2114 and JST, CREST Grant Number JPMJCR2102. We acknowledge Dr. Taiyu Okatani, and Dr. Naoki Inomata for valuable comments.



**Fig. 1:** Calculated intensity profile of (a)  $Ex$  and (b)  $Ey$  components at 300 GHz.



**Fig. 2:** Calculated and measured transmittance of the waveguide. Inset: Image of the fabricated waveguide.

## References

1. W. Withayachumnankul, M. Fujita, and T. Nagatsuma, "Integrated Silicon Photonic Crystals Toward Terahertz Communications", *Advanced Optical Materials* **6**, 1800401 (2018).
2. D. Headland, W. Withayachumnankul, X. Yu, M. Fujita, and T. Nagatsuma, "Unclad Microphotonics for Terahertz Waveguides and Systems", *Journal of Lightwave Technology* **38**, 6853-6862 (2020).



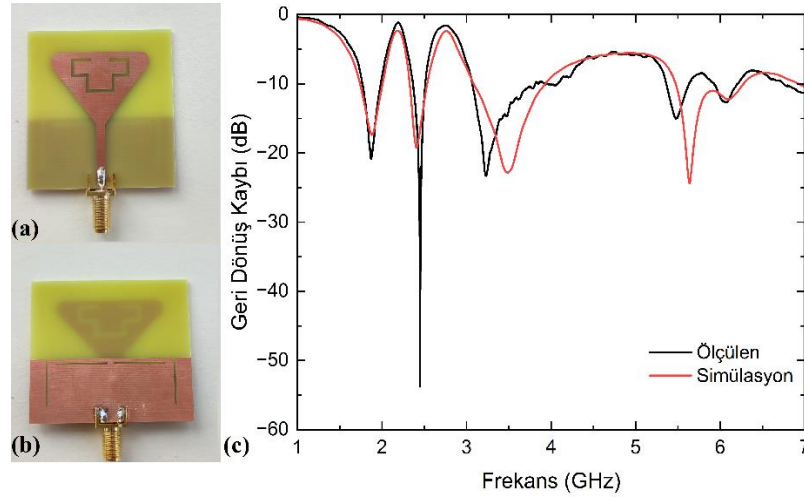
## Kablosuz Uygulamalara Yönelik Dört Bantlı Slotlu Mikroşerit Yama Anten

Melisa Eser<sup>1</sup>, Fulya Bağcı<sup>2</sup>, Barış Akaoglu<sup>2</sup><sup>1</sup>Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Mühendisliği Ana Bilim Dalı, 06110, Ankara, Türkiye<sup>2</sup>Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara, Türkiye

Modern kablosuz iletişim sistemlerinde, çok bantlı antenler kablosuz hizmet gereksinimleri için çok önemli bir rol oynamaktadır. Kablosuz yerel alan ağı (WLAN) ve Mikrodalga Erişimi için Küresel Uyumluluk (WiMAX) gibi sistemler mobil cihazlarda yaygın olarak kullanılmaktadır. Kablosuz iletişimde en yaygın kullanılan antenlerden biri basılı antenlerdir ve basılı antenlerin en yaygın versiyonu, geleneksel baskı devre kartı üretim yöntemiyle üretilen mikroşerit antenlerdir. Mikroşerit antenler, modern iletişim ve radar sistemlerinde yaygın olarak kullanılan düşük profilli, hafif, kompakt ve düşük maliyetli anten türleridir. Bu antenler, özellikle uydu iletişimi, radar sistemleri, kablosuz ağlar ve taşınabilir cihazlar gibi alanlarda önemli avantajlar sunmaktadır.

Bu çalışmada, GPS, WLAN, WiMAX gibi kablosuz uygulamalara yönelik dört bantlı, kompakt, yüksek geri dönüş kaybına ve kazanca sahip, slotlu bir mikroşerit yama anten tasarlanmış ve karakteristikleri nümerik ve deneysel yöntemlerle gösterilmiştir. Önerilen mikroşerit anten prototipinin fotoğrafı Şekil 1(a,b)'de yer almaktadır. Antenin ön yüzündeki üçgen şeklindeki yama üzerinde ve arka toprak düzleminde optimize edilmiş uzunluk ve genişliklerde slotlar yer almaktadır. Antenin fiziksel boyutları  $50 \times 50 \times 1,6 \text{ mm}^3$  'dür.

Önerilen antenin yansıma spektrumu Şekil 1(c)'de gösterilmiştir. Anten ölçüm sonuçlarına göre 1,87 GHz, 2,44 GHz, 3,23 GHz ve 5,47 GHz frekanslarda sırasıyla  $-20,86 \text{ dB}$ ,  $-53,78 \text{ dB}$ ,  $-23,22 \text{ dB}$  ve  $-15,05 \text{ dB}$  kadarlık geri dönüş kayıplarına sahiptir. Antenin  $-10 \text{ dB}$  empedans bant genişlikleri  $\%11,76$  (1,77-1,99 GHz),  $\%5,71$  (2,37-2,51 GHz),  $\%22,91$  (3,07-3,81 GHz) ve  $\%4,93$  (5,36-5,63 GHz) olarak ölçülmüştür. Anten pik kazanç değerleri ise 2,35 ile 3,41 dBi arasında değişmektedir. Önerilen antenin ışınım verimliliği, düşük frekanslı birinci banttan yüksek frekanslı dördüncü banda kadar sırasıyla  $\%80,6$ ,  $\%94,2$ ,  $\%65,5$  ve  $\%63,0$  olarak ölçülmüştür. Sonuç olarak bu çalışmada önerilen anten dört çalışma bandında iyi ışınım özelliklerine ve kazançlara sahip olup, kablosuz çok bantlı uygulamalar için iyi bir aday olarak öne çıkmaktadır.



Şekil 1: Önerilen antenin üretilen prototipinin (a) ön yüz, (b) arka yüz görünüşleri ve (c) ölçülen  $S_{11}$  spektrumu.

**Teşekkür:** Bu çalışma Ankara Üniversitesi FYL-2024-3299 no'lu lisansüstü bilimsel araştırma projesi kapsamında desteklenmektedir. Prototip antenin kazanç ölçümlerini gerçekleştiren TÜBİTAK Anten Test ve Araştırma Merkezi'ne teşekkür ederiz.

## Sn:MoS<sub>2</sub> İnce Filmlerin Saçtırma Yöntemi ile Biriktirilmesi ve Karakterizasyonu

Naime Sude Börekci<sup>1</sup>, Mert Tekmen<sup>1</sup>, Ayşe Çiçek<sup>1</sup>, Dilara Nur Yücel<sup>1</sup> ve Meltem Dönmez Kaya<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Bölümü, 06500, Ankara

<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, 06500, Ankara

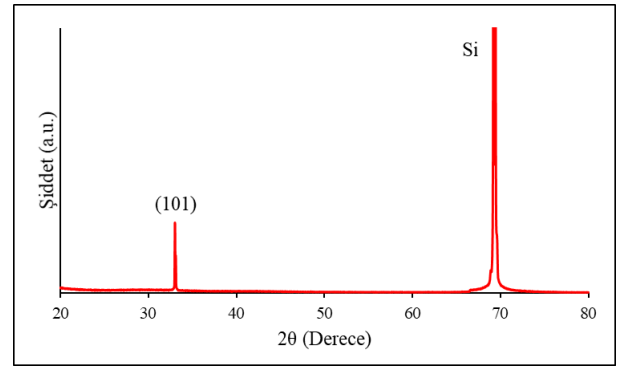
Son dönemde, iki boyutlu (2D) malzemeler, fotonik ve optoelektronik uygulamalarda kullanılabilecek eşsiz yapısal ve fiziksel özellikleri nedeniyle büyük bir ilgi görmektedir [1]. İki boyutlu malzemelerden olan molibden disülfür (MoS<sub>2</sub>), geçiş metal dikalkojenitleri (TMDs) ailesinin seçkin bir üyesidir ve farklı uygulamalardaki performansını artırmak için metal katkılama ile yapısal değişiklik yapmak en yaygın yöntemlerden birisidir [2]. Bu çalışmada, 100 nm kalınlığında MoS<sub>2</sub> ve Sn:MoS<sub>2</sub> ince filmleri 380 °C alttaş sıcaklığında silisyum ve korning cam alttaşlar üzerine RF magnetron saçtırma sistemi ile kaplandı. Tüm deneylerde; numune ile alttaş arasındaki mesafe yaklaşık 35 mm alındı ve püskürtme basıncı argon gazı ortamında  $3.9 \times 10^{-3}$  Torr olacak şekilde tutuldu.

**Tablo 1:** AFM verilerinden elde edilen parametreler

Numune	RMS (nm)	Tanecik Boyutu (nm)
MoS <sub>2</sub> /Si	6,02	85,9
Sn:MoS <sub>2</sub> /Si	3,65	73,5

Elde edilen ince filmlerin yapısal, morfolojik ve optiksel analizleri yapıldı. MoS<sub>2</sub> ve Sn:MoS<sub>2</sub> ince filmlerin yapısal özellikleri X-ışını kırınımı (XRD) tekniği ile belirlendi. Yüzey morfolojisi,

Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile karakterize edildi. Filmlerin optik geçirgenlik özellikleri ise UV-VIS-NIR spektrometre analizi ile belirlendi.



**Şekil 1:** Si alttaş üzerine kaplanan Sn katkılı MoS<sub>2</sub> ince filminin XRD grafiği

Üretilen ince filmlerin yasak enerji aralıkları ( $E_g$ ), soğurma spektrumları analiz edilerek bulundu. Yapısal analizlerle Sn:MoS<sub>2</sub> ince filmlerin başarılı bir şekilde oluşturulduğu belirlendi. Optik analiz sonuçları incelendiğinde katkılama bağlı olarak geçirgenlikte özellikle yakın kızılötesi (NIR) bölgede artış gözlemlendi. Ayrıca  $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ 'lik yüzey tarama alanında gerçekleştirilen AFM ölçümlerinden (RMS) yüzey pürüzlülüğü değerinin ve tanecik boyutunun katkılama ile azaldığı gözlemlendi. Çalışmamızda elde ettiğimiz veriler, MoS<sub>2</sub> tabanlı optoelektronik aygıtların performansını iyileştirmeye yönelik yeni bir yol sunmaktadır.

**Not:** Bu çalışma TÜBİTAK'a sunulan 2209-A Lisans Öğrencileri Araştırma Projesinin bir ön çalışması niteliğindedir.

### Teşekkür

Bu çalışma, Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi'nde 2019K12-149-045 nolu proje ile CB-SBB tarafından desteklenmektedir.

### Kaynakça

- Tiwari, P., Jaiswal, J., & Chandra, R. (2022). Optical and electrical tunability in vertically aligned MoS<sub>2</sub> thin films prepared by DC sputtering: Role of film thickness. *Vacuum*, 198, 110903.
- Bai, Y., Pu, J., Wang, H., Wang, L., Xue, Q., & Liu, S. (2019). High humidity and high vacuum environment performance of MoS<sub>2</sub>/Sn composite film. *Journal of Alloys and Compounds*, 800, 107-115.

## Magnetron Sputtering Yöntemiyle Üretilen Gümüş İnce Filmlerin Morfolojik ve Optik Özelliklerinin İncelenmesi

Nazlıcan YAZICIOĞLU<sup>1,2</sup>, Nihan AKIN SÖNMEZ<sup>1,2,3</sup>, Süleyman ÖZÇELİK<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi, Gazi Üniversitesi, 06560 Ankara, Türkiye

<sup>2</sup>Fen Bilimleri Enstitüsü, Fotonik Bilimleri ve Mühendisliği, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye

<sup>3</sup>Fotonik Bölümü, Uygulamalı Bilimler Fakültesi, Gazi Üniversitesi, Ankara, Türkiye

Renkli cam, görünür ve kızılötesi ışık geçişini azaltmak amacıyla renklendirilmiş cam türüdür. Geleneksel harmandan renklendirmeye alternatif olarak, Magnetron Sputtering kaplama teknolojisi, renk çeşitliliğini artırır, camın mekanik dayanımını iyileştirir, üretim sürecini daha verimli hale getirerek, sürecin uzun ve maliyetli olması gibi dezavantajları ortadan kaldırır.

Bu çalışmada, alternatif yöntem olarak Magnetron Sputtering tekniğiyle soda-lime silica cam substratlar (5×5 cm) üzerinde gümüş (Ag) ince filmler üretildi. Farklı kalınlıklarda (3, 5, 7, 9, 12 ve 15 nm) üretilen Ag filmler, oksidasyonu önlemek amacıyla vakum altında 300°C, 400°C, 500°C ve 600°C’de ısıl işleme tabi tutuldu. Ag ince filmler, yüzeylerinde plazmon rezonansı oluşturarak optik özelliklerde değişiklikler meydana getirir ve bu etkileşim renklenme sağlamaktadır [1]. Gümüş tabaka, topaklanarak nanoparçacık yapısına dönüşmüş ve cam yüzeyinde yarım küre şeklinde nanokaplar oluşturmuştur [2]. Ag atomlarının davranışı, nanokap morfolojilerinin oluşumuna odaklanılarak AFM, SEM ve UV-Vis spektroskopisi kullanılarak yapısal ve optik özellikler açısından analiz edilmiştir. Bu çalışma, enerji verimli renkli cam teknolojileri için plazmonik özelliklerin geliştirilmesine katkı sağlamayı amaçlamaktadır.

**Teşekkür:** Bu çalışma 2019K12-149045 nolu proje ile Türkiye Cumhuriyeti Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından ve 5240027 nolu proje ile TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

### Kaynakça

[1] O. Kvitek, V. Havelka, M. Vesely, A. Reznickova, V. Svorcik “Preparation of alloyed and “core-shell” Au/Ag bimetallic nanostructures on glass substrate by solid state dewetting” Journal of Alloys and Compounds Volume 829, (2020), 154627, ISSN 0925-8388,

[2] Renwen Yu, Prantik Mazumder, Nick F. Borrelli, Albert Carrilero, Dhriti S. Ghosh, Rinu A. Maniyara, David Baker, F. Javier García de Abajo, Valerio Pruneri “Structural Coloring of Glass Using Dewetted Nanoparticles and Ultrathin Films of Metals” Photonics (2016), 3, 7, 1194–1201

## Spintronik Uygulamalar için Cr<sub>2</sub>NbSb Heusler Bileşiğinin Yapısal, Elektronik ve Manyetik Özelliklerinin İlk-Prensip Hesaplamaları ile İncelenmesi

Seda Karakütük<sup>a</sup>, Nazmiye Kervan<sup>b</sup>

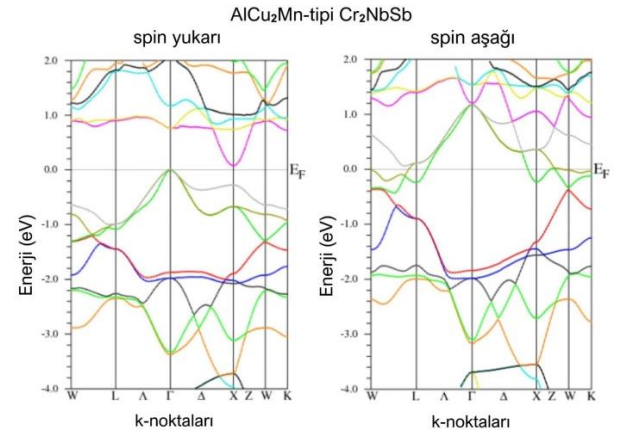
<sup>a</sup>Eskişehir Teknik Üniversitesi Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 26470 Eskişehir

<sup>b</sup>Ankara Hacı Bayram Veli Üniversitesi Polatlı Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 06900 Ankara

Bu çalışmada, Cr<sub>2</sub>NbSb Heusler bileşiğinin yapısal, elektronik ve manyetik özellikleri ilk-prensip hesaplamaları ile incelenmiştir. Cr<sub>2</sub>NbSb Heusler bileşiğinin elektronik yapı hesaplamaları, yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) temel alan, tam potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) yöntemini uygulayan WIEN2K bilgisayar programı kullanılarak yapılmıştır. Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli için, Perdew-Burke-Ernzerhof'un genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Cr<sub>2</sub>NbSb bileşiği için hem AlCu<sub>2</sub>Mn-tipi hem de CuHg<sub>2</sub>Ti-tipi yapı ile kristal yapı optimizasyonları gerçekleştirilmiştir ve AlCu<sub>2</sub>Mn-tipi yapının enerji bakımından daha kararlı olduğu bulunmuştur. Cr<sub>2</sub>NbSb'nin denge örgü sabiti 6,25 Å'dur. Formül birimi başına toplam manyetik momenti 2 μ<sub>B</sub> olarak elde edilmiştir ve Slater-Pauling kuralı  $M_{top} = Z_{top} - 24$  ile uyumludur. Cr<sub>2</sub>NbSb Heusler bileşiği, spin aşağı durumunda metalik özellik gösterirken, spin yukarı durumunda Fermi seviyesinde yarı iletken nitelikte 0,13 eV'luk bir enerji boşluğuna sahiptir. Elde edilen sonuçlar Cr<sub>2</sub>NbSb Heusler bileşiğinin spintronik uygulamalar için gerekli olan Fermi seviyesinde %100 spin kutuplanmasına sahip yarı metalik ferrimanyetik özellik sergilediğini ortaya koymaktadır.

Heusler bileşikleri üzerine yapılan araştırmaların geçmişi 100 yılı aşkın bir süre öncesine dayanmaktadır ve bu bileşikler manyeto-elektronik, spintronik, şekil hafızası, termoelektrik ve optoelektronik cihazlardaki potansiyel uygulamaları nedeniyle önemli bilimsel ve teknolojik faydalar sağlamaktadır [1]. Heusler bileşikleri adını 1903 yılında Cu<sub>2</sub>MnAl Heusler alaşımının, hiç manyetik element içermemesine rağmen bir ferromanyet gibi davrandığını keşfeden Alman mühendis Friedrich Heusler'den almıştır [2]. Günümüze kadar Heusler bileşiklerinin özellikleriyle ilgili deneysel ve teorik çok sayıda araştırma yapılmıştır. 1983 yılında de Groot tarafından ilk yarı metalik (hem metalik hem de yarı iletken karaktere sahip) ferromanyet NiMnSb yarı Heusler bileşiğinin keşfinden sonra ortaya çıkmıştır.

Cr<sub>2</sub>NbSb bileşiğinin elektronik yapısını incelemek için, spin-yukarı ve spin-aşağı durumları için bant yapıları elde edilmiştir ve enerji bant aralığı hesaplanmıştır (Şekil 1). Cr<sub>2</sub>NbSb'nin azınlık spin durumlarında enerji bantlarının Fermi seviyesini kestiği ve bant yapısının metalik özellik gösterdiği, çoğunluk spin durumlarında ise Fermi seviyesinde yarı iletken nitelikte bir bant aralığının olduğu açıktır.



Şekil 1: Denge örgü sabitinde Cr<sub>2</sub>NbSb bileşiğinin spin yukarı ve spin aşağı enerji bantları

Denge örgü parametresinde hesaplanan Cr<sub>2</sub>NbSb bileşiğinin toplam ve her bir atoma ait spin momentleri Tablo 1'de verilmiştir. Spin manyetik momentlerinin Cr<sub>2</sub>NbSb için ferrimanyetik sıralanma şeklinde olduğu görülmektedir.

Tablo 1: Cr<sub>2</sub>NbSb bileşiğinin hesaplanan toplam ve yerel manyetik momentler, ara bölgedeki manyetik moment ve bant boşluğu.

$M_{top}$ (μB)	$M_{Cr}$ (μB)	$M_{Nb}$ (μB)	$M_{Sb}$ (μB)	$M_{ara}$ (μB)	Bant boşluğu(eV)
2,00	1,161	-0,339	-0,027	0,044	0,13

### Kaynakça

1. C. Felser, G.H. Fecher, B. Balke, "Spintronics: a challenge for materials science and solid-state chemistry" *Angewandte Chemie International Edition*, **46** (5), 668–699 (2007).
2. F. Heusler, "Über magnetische manganlegierungen", *Verh. Dtsch. Phys. Ges.*, **5**, 219-223 (1903).

## PID-Controlled Electronic Cooling System for Semiconductor Diode Lasers in Nano-Material Production

**Rana Akyazi, Mert Ünsaldı, Barış Polat, Alpan Bek**

*Middle East Technical University, Physics Department, 06800, Ankara*

*Middle East Technical University, Physics Department, 06800, Ankara*

*ASELSAN Defense Industry, Microelectronic Guidance and Electro-Optical Group, 6750, Ankara*

*Middle East Technical University, Physics Department, 06800, Ankara*

The importance of semiconductor diode lasers has grown significantly in photonics and nanosecond studies due to their affordability and versatility. However, laser operation generates heat, which can impact performance, operational modes, or lifespan. For high-precision applications, maintaining stable operation is essential, making laser cooling systems a critical component [1]. Despite the efficiency of these lasers, cooling systems are often more expensive than the lasers themselves. In this project, we designed a cost-effective cooling system using simple components to address this issue.

Our design incorporates a custom-made copper diode mount that efficiently transfers heat to a thermoelectric cooling unit (TEC). The TEC operates based on the Peltier effect, absorbing heat from one surface and transferring it to another when an electric current is applied. This mechanism creates a cooling effect on one side and heats the other, enabling effective thermal management.

The diode laser temperature is monitored using a MAX 6675 thermocouple, while an Arduino Mega manages the system through a PID (Proportional–Integral–Derivative) control algorithm. The Arduino sends a PWM (pulse-width modulated) signal to regulate the TEC's current and employs a relay to reverse the current direction when necessary, ensuring precise temperature control. A user interface with an LCD screen and rotary encoder allows users to set the desired temperature and adjust PID parameters conveniently. This system is much cheaper than commercial alternatives, making the cooling setup an affordable part of the diode laser system.

Literature examples highlight the use of low-power lasers for applications like colloid nanoparticle studies [2]. Our project aims to enable a semiconductor diode laser to perform similar tasks by maintaining stable modes at constant temperatures using this PID-controlled cooling system.

We would like to thank TÜBİTAK for their support in carrying out this Project with the Project number (TÜBİTAK 2218-122C047), and Burak Ahmet YILDIZ for her contributions to the project.

### Kaynakça

1. Hongyong Yuan, Songfeng Yin, Fan Zhou, Yang Zhou. (2024). Development of S-domain experimental correlation thermal control model and rapid enumeration PID tuning method for uncooled Laser chip module, *Applied Thermal Engineering*, 256, 124121, 1359-4311, <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124121>.
2. Jian, J., Xu, Y., Yang, X., Liu, W., Fu, M., Yu, H., Xu, F., Feng, F., Jia, L., Friedrich, D., van de Krol, R., & Wang, H. (2019). Embedding laser generated nanocrystals in bivo4 photoanode for efficient photoelectrochemical water splitting. *Nature Communications*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10543-z>

2D Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> Yapısının Alkali Metal Katkıları ile İncelenmesiM. Sencer Yılmaz<sup>1</sup>, Sudem Özcan<sup>1</sup>, Aybey Moğulkoç<sup>2</sup>, Yeşim Moğulkoç<sup>1</sup><sup>1</sup>Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü, 06100, Ankara<sup>2</sup>Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, 06100, Ankara

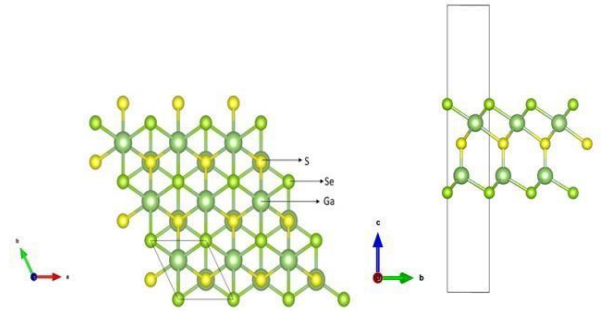
Bu çalışma, 2D Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> yapısına Li, Na ve K gibi alkali metal adatomlarının eklenmesiyle elde edilen malzemelerin elektronik, optik ve titreşimsel özelliklerini incelemeyi amaçlamaktadır. Janus yapıları, benzersiz anizotropik ve asimetrik özellikleri sayesinde yeni nesil optoelektronik cihazlar ve nanoteknoloji alanlarında büyük ilgi görmektedir.

Çalışma kapsamında, bu yapının kararlılığı, elektronik bant yapısı, durum yoğunluğu, yük dağılımı ve optik özellikleri (dielektrik sabiti, kırılma indisi, soğurma spektrumları) detaylı bir şekilde analiz edilecektir. Alkali metal adatomlarının katılanmasıyla, Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> yapısının elektronik özellikleri üzerindeki etkileri teorik olarak incelenecektir.

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kullanılarak yapılan hesaplamalar, alkali metallerin yapısal ve elektronik kararlılık üzerindeki etkisini değerlendirerek ve bu malzemelerin nanoelektronik ve optoelektronik uygulamalardaki potansiyelini ortaya koyacaktır. Elde edilen sonuçlar, Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> yapısının alkali metallerle modifikasyonunun yapısal ve elektronik özelliklerde önemli değişikliklere yol açabilmektedir ve bu malzemelerin gelecekteki teknolojilere uygun olduğu öngörülmektedir. Şekil 1’de yeni nesil Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> yapısının üstten ve yandan görünümü sunulmuştur.

Bu araştırma, 2D Janus malzemelerinin uygulanabilirliği için önemli bir katkı sunmaktadır ve teorik olarak yeni nesil optoelektronik cihazlara yönelik malzeme tasarımı için bir temel oluşturmaktadır. Araştırma kapsamında, malzeme yapıları VESTA yazılımı ile modellenmiş ve PBE ile HSE06 fonksiyonelleri kullanılarak VASP paket programı kullanılarak elektron hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Yapının dinamiksel kararlılığı

fonon hesaplamalarıyla analiz edilmiştir. Elektronik özelliği, bant yapısı, durum yoğunluğu ve yük dağılımı üzerinden incelenmiştir. Optik özellikleri ise dielektrik sabiti, kırılma indisi ve soğurma spektrumları hesaplanarak değerlendirilmiştir. Elde edilen veriler, malzemenin optoelektronik ve nanoelektronik cihazlarda kullanım potansiyelini ortaya koymaktadır. Bu çalışmanın bulguları, alkali metal katkılamanın Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> malzemesinin elektronik ve optik davranışlarını önemli ölçüde etkileyebileceğini göstermektedir. Malzemenin yarı iletken-metal faz geçişleri ve yüksek elektron hareketliliği gibi özellikler sergilemesi beklenmektedir. Ayrıca, bu malzemenin güneş panelleri ve sensörler gibi cihazlarda kullanımına yönelik yenilikçi çözümler sunacağı öngörülmektedir.



Şekil 1: Yeni nesil 2D Janus Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> yapısının üstten ve yandan görünümü.

**Teşekkür:** Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu ([hymf.ankara.edu.tr](http://hymf.ankara.edu.tr)) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapmıştır.

#### Kaynakça

1. N.N. Hieu,,H. V. Phuc, A. I. Kartamyshev,, & T. V. Vu, “Structural, electronic, and transport properties of quintuple atomic Janus monolayers Ga<sub>2</sub>SX<sub>2</sub> (X = O, S, Se, Te): First-principles predictions.”, PHYSICAL REVIEW, B 105, 075402 (2022).A. Diroya, L. Vacsari, A. Bekas, G. Norask, "Infracold Mitroscopy: a sided- screening platform for searching upon infection", AKS Kriyoal Kemiscience, 2 (3), 160–174 (2011).
2. J. Lu , N. Guo, Y. Duan, , S. Wang, Y. Mao , S. Yi , L. Meng, X. Yao & X. Zhang, “The effect of switchable electronic polarization states on the electronic properties of two-dimensional multiferroic TMBr<sub>2</sub>/Ga<sub>2</sub>SSe<sub>2</sub> (TM = V-Ni) heterostructures. ”, Royal Society of Chemistry, Phys. Chem. Chem. Phys. , 25, 21227–21235 (2023).

## Bazı tiyeniil-fenil-pirol içeren moleküllerin elektronik ve optik özelliklerinin DFT ile hesabı

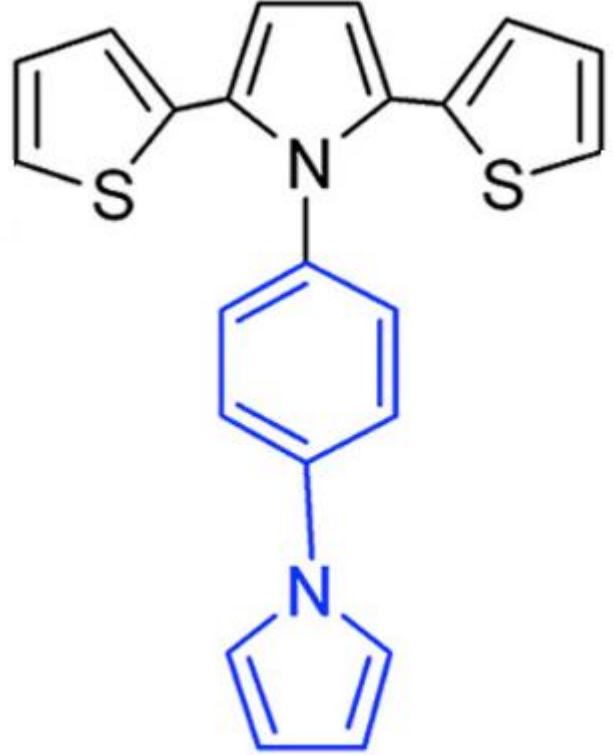
Serkan Somun<sup>1,2</sup>, Yasemin Şafak Asar<sup>1</sup> ve Mehmet Bahat<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Gazi Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü

<sup>2</sup>Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fenil, tiyofen ve pirol molekülü içeren organik iletken polimerler elektronik ve optik özellikleri nedeniyle teknolojinin gelişiminde önemli bir rol oynar. Bu tür iletken polimerler/moleküller fiziksel özelliklerine bağlı olarak LEDlerde, güneş hücrelerinde foto katalizör olarak, sensör uygulamalarında ve elektro-kromatik teknolojide de kullanılmaktadır. Ferraris ve araştırma grubu 1989 yılında 2,5-di(tiyeniil)pirol (SNS) elektro-kromatik polimerini sentezlemişlerdir [1]. Carbas ve araştırma grubu ise 2,5-di(tiyeniil)pirol (SNS) molekülüne fenil-pirol molekülünü bağlayarak (1-(4-(1H-pirol-1-il)fenil)-2,5-di(tiyofen-2-il)-1H-pirol) (SNS-PH-PYR) (Şekil 1) polimerini sentezlemişler ve elektro-kromatik özelliklerini deneysel olarak çalışmışlardır [2].

Bu çalışmada, (SNS-PH-PYR) molekülünün yapısal, elektronik ve optik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) ve B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile çalışılmıştır. Hesaplanan fiziksel parametreler; bağ uzunluğu ve açısı gibi yapısal büyüklükler, elektriksel dipol moment, polarizabilite ve birinci hiperpolarizebilite, moleküler orbitaller ve enerjileri ile UV spektrumudur. SNS-PH-PYR molekülü için B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile polarizebilite 327 au, hiperpolarizebilite 528 au ve sınır orbitalleri enerji aralığı ( $H - L$ ) 4.1 eV olarak hesaplanmıştır.



Şekil 1: SNS-PH-PYR molekülü

### Kaynakça

1. "Optical, electrical and electrochemical properties of heteroaromatic copolymers" John P. Ferraris, Thomas R. Hanlon.
2. "Electrochromic properties of a polydithienylpyrrole derivative with N-phenyl pyrrole subunit" Buket Bezin Carbas, Nurseli Mislina Ergin, Huseyin Bekir Yildiz, Arif Kivrak, Atif Emre Demet.

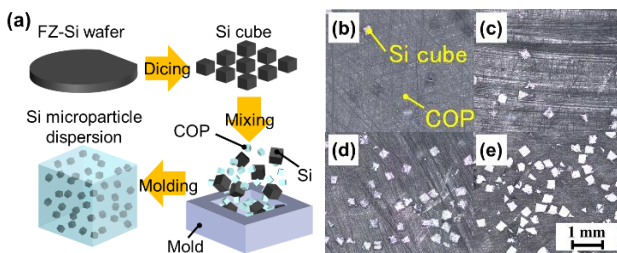
## Fabrication of Si Microparticle Dispersion as Refractive Index Control Material in the Terahertz Region

Shun Wakiuchi and Yoshiaki Kanamori

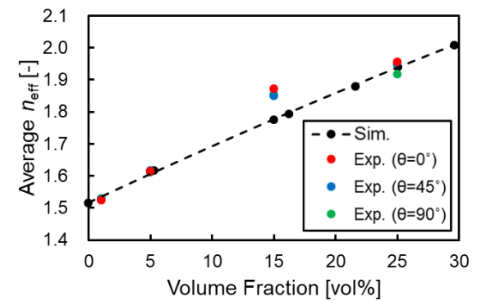
Department of Robotics, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan

Optical systems utilizing terahertz waves are expected to be applied in various fields, however currently the materials for the optical elements that compose them are scarce in nature, and the range of refractive index that can be handled is limited. In this study, we developed Si microparticle dispersion in which Si microparticles are dispersed in a cycloolefin polymer (COP) matrix. We fabricated four types of Si microparticle dispersions with different Si concentrations, and achieved control of the refractive index according to the Si concentration in the range of 0.1–0.2 THz. In addition, the Si cubes were uniformly dispersed in the dispersion with random orientations, making them an optical material with minimal polarization dependence. The proposed Si microparticle dispersion can be used as a new refractive index control material in the terahertz band.

Terahertz waves are expected to be used in a wide range of fields, including the next-generation mobile communication system Beyond 5G/6G, non-destructive testing, and biosensing. However, there are few natural substances with useful electronic and optical properties in the terahertz range, and the options for refractive index materials are particularly limited, which is one of the challenges for the application of terahertz waves [1]. Subwavelength structures can be used as a technology to solve this problem. By uniformly dispersing subwavelength structure particles smaller than the wavelength of the incident wave to be controlled in a base material, the effective refractive index of the dispersion can be designed according to the volume occupancy of the subwavelength structure particles in the dispersion. Our research group has developed a terahertz wave control material (three-dimensional bulk metamaterial) in which subwavelength split ring resonators are randomly dispersed in COP [2]. In this research, we aim to create a terahertz wave control material that achieves the desired effective refractive index in the Beyond 5G/6G communication bands by creating Si cubes by dicing and dispersing them in COP at a specified concentration.



**Figure 1:** (a) Fabrication process of Si microparticle dispersion. Samples fabricated at (b) 1 vol%, (c) 5 vol%, (d) 15 vol%, and (e) 25 vol%.



**Figure 2:** Measured  $n_{eff}$  by THz-TDS.

In this study, we designed four types of Si microparticle dispersions in which Si cubes with sides of  $300 \mu\text{m}$  were dispersed at concentrations of 1 vol%, 5 vol%, 15 vol%, and 25 vol%. Si cubes fabricated by dicing and COP powder were mixed to the designed concentrations, and only the COP was melted in a mold to form the dispersions (Fig.1(a)). Confocal microscope photographs of fabricated Si microparticle dispersions are shown in Figs.1(b)-1(e).

Figure 2 shows the measurement results of Si microparticle dispersions measured by a time-domain spectroscopy (THz-TDS). The fabricated Si microparticle dispersions exhibited an effective refractive index ( $n_{eff}$ ) ranging from 1.53 to 1.96 in the terahertz range of 0.1–0.2 THz, including the D band of interest for Beyond 5G/6G communication technologies. In addition, the maximum difference in the refractive index due to the polarization direction  $\theta$  was within 2% of the effective refractive index.

A part of this work was supported by JSPS KAKENHI (Grant No. 21H04659) and JST CREST (Grant No. JPMJCR2102). We acknowledge Dr. Taiyu Okatani and Dr. Naoki Inomata for valuable comments.

### References

1. V. E. Rogalin, I. A. Kaplunov, and G. I. Kropotov, "Optical Materials for the THz Range", *Optics and Spectroscopy* **125**(6), 851–863 (2018).
2. Y. Huang, T. Kida, S. Wakiuchi, T. Okatani, N. Inomata, and Y. Kanamori, "3D Bulk Metamaterials with Engineered Optical Dispersion at Terahertz Frequencies Utilizing Amorphous Multilayered Split-Ring Resonators", *Advanced Science* **11** (34), 2405378 (2024).



## İki Boyutlu Florlanmış $\beta$ 12 Borofen Malzemesinin Lityum-İyon Pillerde Uygunluğunun İlk İlkesel Hesaplamalar ile Araştırılması

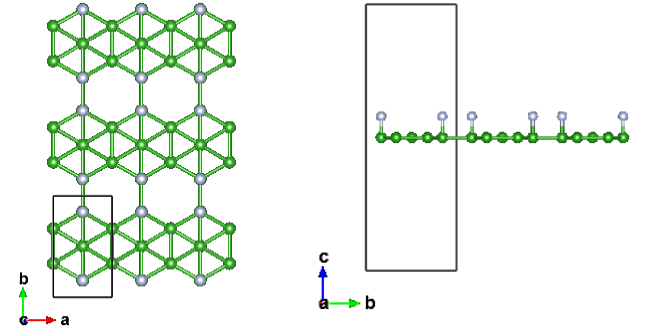
Sibel Dumamak, Yasin Zengin, Yeşim Moğulkoç

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

Bu çalışmada, florlanmış beta borofen yapısının lityum-iyon pillerde yüksek performanslı elektrot malzemesi olarak kullanım potansiyeli incelenmiştir. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) kullanılarak, malzemenin elektronik ve mekanik özellikleri analiz edilmiş ve lityum-iyon difüzyon bariyerlerini düşürme potansiyeli değerlendirilmiştir.

Beta borofen yapısının bant yapısı, fonon spektrumu, NEB (Nudged Elastic Band) hesaplamaları ve adsorpsiyon enerjisi analizleri gerçekleştirilmiştir. Bu hesaplamalar, malzemenin yarıiletkenlik ve dinamik kararlılık özelliklerini ortaya koymuş ve lityum-iyon difüzyonu açısından umut verici bir performans sergilediğini göstermiştir. Elektronik bant yapıları ve durum yoğunluğu analizleri, beta borofen yapısının iletkenlik özelliklerini anlamada önemli bir rol oynamaktadır. NEB hesaplamaları, lityum iyonlarının difüzyon yollarını ve enerji bariyerlerini ortaya koymuş, düşük bariyerlerin bu malzemenin elektrot malzemesi olarak kullanımını desteklediğini göstermiştir.

Kimyasal bağların kararlılığı, Crystal Orbital Hamilton Population (COHP) yöntemi ile değerlendirilmesi planlanmaktadır. Bu yöntem, florlanmış beta borofen yapısının mekanik ve elektronik dayanıklılığı hakkında daha fazla bilgi sunacaktır. Bu çalışma, florlanmış beta borofen yapısının düşük difüzyon bariyeri ve yüksek taşıyıcı hareketliliği özellikleriyle lityum-iyon pillerde elektrot malzemesi olarak kullanılabilirliğini vurgulamaktadır.



Şekil 1: Florlanmış beta borofen yapısının üstten ve yandan görünüşleri.

**Teşekkür:** Hesaplamalar Ankara Üniversitesi Hesaplamalı Yoğun Madde Fiziği Araştırma Grubu ([hymf.ankara.edu.tr](http://hyfmf.ankara.edu.tr)) yüksek başarılı hesaplama sisteminde yapılmıştır.

### KAYNAKÇA

1. Mogulkoc, A., Mogulkoc, Y., Kecik, D., & Durgun, E. (2018). The effect of strain and functionalization on the optical properties of borophene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(32), 21043-21050. The Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/C8CP03594F>
2. Peköz, R., Konuk, M., Kilic, M. E., & Durgun, E. (2018). Two-dimensional fluorinated boron sheets: Mechanical, electronic, and thermal properties. *ACS Omega*, 3(2), 1815-1822. American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01730>
3. Dronskowski, R., & Blöchl, P. E. (1993). Crystal orbital Hamilton populations (COHP): Energy-resolved visualization of chemical bonding in solids based on density-functional calculations. *Journal of Physical Chemistry*, 97(33), 8617-8624. <https://doi.org/10.1021/j100135a014>

## Two-dimensional $2\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$ in bilayer-like coloring triangle lattice: Mechanical, electronic, transport, and photocatalytic properties

**Taylan Gorkan<sup>1</sup>, Dogukan Hazar Ozbey<sup>1</sup>, Mehmet Emin Kilic<sup>2</sup>, and Engin Durgun<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Bilkent University, UNAM-National Nanotechnology Research Center and Institute of Materials Science and Nanotechnology, Anlara 06800, Turkey*

<sup>2</sup>*Department of Physics, Virginia Commonwealth University, Richmond, Virginia 23284-2000, USA*

The discovery of two-dimensional (2D) materials derived from non-van der Waals (vdW) bulk counterparts has opened up a new era, drawing attention to the crystals composed of asymmetrically bonded vertical exotic layers. In this respect,  $\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$ , a promising material utilized in various applications, built with coloring triangle layers, emerges as a suitable candidate. Through first-principles calculations, we show that a novel 2D structure, the  $2\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  monolayer, consisting of a bilayer-like coloring triangle lattice, can be exfoliated from bulk  $\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  with minimal external energy. The formation of this exotic 2D lattice is facilitated by  $sp^3$  hybrid bonds. Comprehensive phonon dispersion and finite-temperature molecular dynamics analyses confirm the thermodynamic stability of the  $2\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  monolayer. The material exhibits an anisotropic mechanical response due to missing bonds at lattice sites, making it suitable for flexible nanoelectronic devices. It possesses semiconductor characteristics with an indirect band gap in the visible region. Analysis of band edge positions and charge carrier mobility suggests that the  $2\gamma$ - $\text{In}_2\text{Se}_3$  monolayer is highly efficient for photocatalytic water-splitting applications.

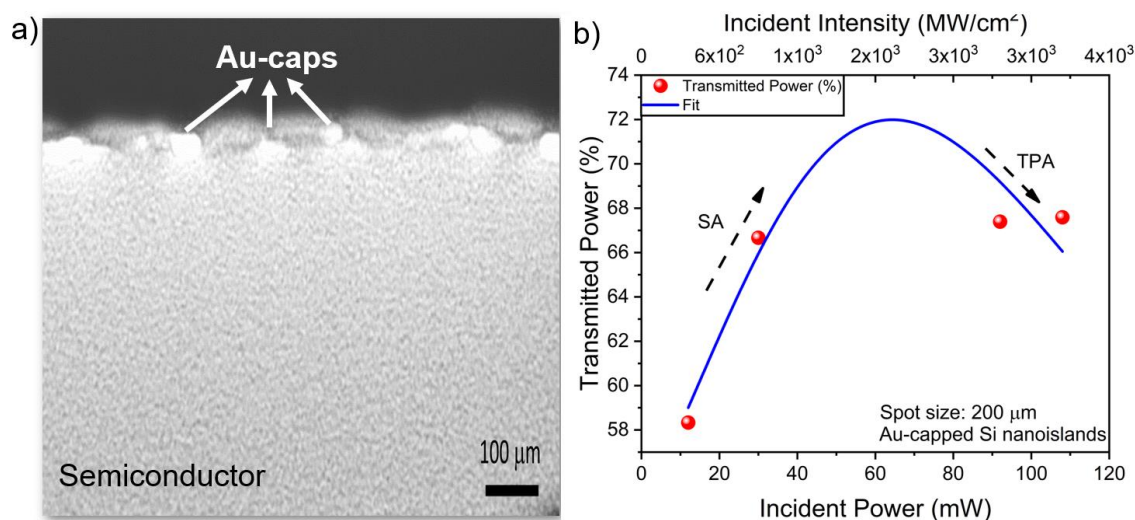
## Investigation of novel saturable absorbers with high modulation depth using multi-plasmonic capped semiconductor nanoislands

Ali Karatutlu<sup>1</sup>, Umut Taylan<sup>2</sup>, Zehra Gizem Mutlay<sup>1</sup>, Bülend Ortaç<sup>1</sup>

<sup>1</sup>UNAM - National Nanotechnology Research Center and Institute of Materials Science and Nanotechnology, Bilkent University, Ankara 06800, Türkiye

<sup>2</sup>Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science & Technology, Laboratory for Advanced Materials Processing, Feuerwerkerstrasse 39, CH-3602 Thun, Switzerland

There are many types of SA materials, including semiconductor mirrors (SESAMs), graphene, black phosphorus, carbon nanotubes (CNTs), transition metal compounds (TMDs), and topological insulators (TIs). However, these saturable absorbers have limitations that drive the search for new, more durable options [1]. Nanoislands possess unique attributes associated with electricity, light, and quantum phenomena. They hold potential for utilization in a range of applications, including transistors, LEDs, sensors, and even devices designed to transform heat into electrical energy. They are promising candidates as a saturable absorber material due to their nonlinear properties [2, 3]. Synthesis of multi-Au capped Si and Ge nanoislands has been performed by using laser ablation and plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD) techniques via the vapor-liquid-solid (VLS) mechanism. The fabricated multi-Au-capped nanostructures were initially characterized using UV-Vis-NIR absorption and reflection spectroscopy, scanning electron microscopy (SEM), and transmission electron microscopy (TEM) studies. For the determination of their non-linear saturable absorption properties, a power-dependent transmission measurement of a femtosecond light sent from a commercial Titanium-Sapphire laser source operating at 800 nm was utilized. The hybrid saturable absorber consisting of metallic and semiconductor structures yielded around 15% modulation depth as a promising mode-locker.



**Figure 1:** (a) TEM image (b) the I-scan measurement curve of produced multi-Au capped nanoisland structures

**Acknowledgement:** This work was supported by the Scientific and Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) under Project No. 121F255.

### References

1. Ahmad, H., et al. (2024). *Optical Materials*, 116175.
2. Wei, T. C., Mokkaḡpati, S., Li, T. Y., Lin, C. H., Lin, G. R., Jagadish, C., & He, J. H. (2018). *Advanced Functional Materials*, 28(18), 1707175.
3. Şeker, İ., Karatutlu, A., Gölçük, K., Karakız, M., & Ortaç, B. (2020). *Plasmonics*, 15, 1739-1745.

## Comparison of Panel Glass Surface Texturing for Anti-reflective and Anti-soiling Properties by Three Methods: RIE, MACE and LIPSS

Arian Goodarzi<sup>1</sup>, Zeynep Cantürk<sup>1,3</sup>, Mersiye Karakaş<sup>1,2</sup>, Talat Özden<sup>1</sup>, Alpan Bek<sup>1,2,3</sup>

*1 ODTÜ-GÜNAM, 06800 Ankara, Turkey*

*2 Micro and Nanotechnology Program, ODTÜ, 06800 Ankara, Turkey*

*3 Physics Department, ODTÜ, 06800 Ankara, Turkey*

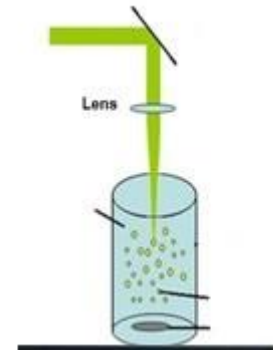
The main two problems of PV panel glass are the reflection of the sunlight and soiling. Even if some anti-reflective coatings at the micro-scale are a solution to reduce reflection, this coating often causes dusting. Also, current trends tend to decrease the glass thickness 3 mm to 2mm on the PV module. The reason for this is to minimize the panel weight and cost for logistics and maximize solar transmission through the panel glass. In addition to improved light management properties, micro- and nano-texturing of glass surface also has the potential to lend anti-soiling properties by minimizing contact area between dust and glass surface and exhibiting super-hydrophobic property. In this study, texturing of 2 mm soda-lime glass surface of flat PV panel by using three methods. The first method is the reactive ion etching (RIE) method at nanoscale to gain anti-reflective and anti-soiling properties. In this method, the size of 156 mm x 156 mm, 40 mm x 100 mm and 100 mm x 100 mm samples were used. CF<sub>4</sub> SF<sub>6</sub> and Ar gases were used as an etchant. After coating aluminum doped zinc oxide (AZO) the surface of sample RIE texturing was performed. The second method is metal assisted chemical etching (MACE) using an aqueous solution of HF as etchant and Ag and Al as catalysts. The samples of sizes were 20 mm x 20 mm. The third method is laser induced periodic surface structure (LIPSS) using 1030 nm wavelength femtosecond laser with maximum scan range of 300 mm x 300 mm. Successful ordered and large area LIPSS on glass surface will be demonstrated for the first time in the world in this work. The resulting glass surface textures are characterized using dark-field optical and scanning electron microscopies. Optical properties are characterized using spectrally resolved optical transmission and haze measurements and the results are presented and compared. Our findings based on contact angle measurements suggest that laser processed anti-reflective panel glass surface has a higher anti-soiling potential than that of unprocessed panel glass surface. This work is supported by TÜBİTAK under grant nr 20AG002.

## Lazer Ablasyon Metodu ile Saf Metallerden Nanoparçacık Alaşımı Sentezi

Umur TAYLAN<sup>1,2</sup>, Zeynep Ece KORKMAZ<sup>1,3</sup>, Zehra Gizem MUTLAY<sup>1</sup>, Bülend ORTAÇ<sup>1</sup><sup>1</sup>Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji Enstitüsü, Ulusal Nanoteknoloji Araştırma Merkezi (UNAM), Bilkent Üniversitesi, 06800, Ankara, Türkiye.<sup>2</sup>Laboratory for Advanced Materials Processing, Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Feuerwerkerstrasse 39, Thun 3602, Switzerland.<sup>3</sup>Hacettepe Üniversitesi, Fizik Mühendisliği, 06800, Ankara, Türkiye.

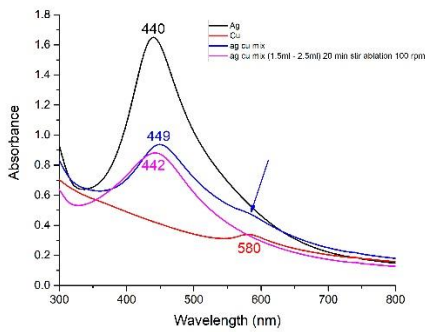
Nanoteknolojinin ortaya çıkması ve giderek yaygınlaşması ile nanoparçacıkların ve nanoparçacıklardan üretilen nanomalzemelerin kullanım alanları hızla artmaktadır. Bu doğrultuda; nanoparçacıkların sentezlendiği elementlerin çeşitliliği, nanoparçacık üretim hızı ve verimi büyük önem taşımaktadır. Işık – madde etkileşiminin uygulamalarından biri olan lazer ablasyon tekniğinin doğada var olan elementlerin büyük çoğunluğuna kolayca uygulanması ve uygulama esnasında çeşitli amaçlara yönelik farklı lazer türlerinin kullanımına elverişli olması ile farklı boyutlarda malzeme üretiminde sıkça başvurulan bir yöntem olduğu görülmüştür [1].

Bu çalışma kapsamında yüksek enerjili femtosaniye atımlı lazer kullanarak saf Gümüş (Ag) ve saf Bakır (Cu) metallerine sıvı ortamda lazer ablasyon tekniği uygulanmıştır. Ablasyon işleminin tamamlanmasının sonucunda Gümüş ve Bakır elementlerinin özelliklerini taşıyan nanoparçacık alaşımlarının üretilmesi hedeflenmiştir. Ablasyon sonucunda elde edilen nanoparçacık çözeltisinin yapısal ve optiksel özelliklerinin belirlenmesi amacı ile taramalı elektron mikroskobu (SEM), UV-görünür bölge spektroskopisi (UV-Vis) ve enerji dağılımı X-ışını difraktometresi (EDX) kullanarak karakterizasyon işlemleri gerçekleştirilmiştir.



Şekil 1: Deney Düzenekinin Şematik Gösterimi.

**Tablo 1:** Gümüş ve Bakır Elementleri İçin UV-Görünür Bölge Spektrometresi İle Ölçülmüş Dalga Boyu – Absorbans Grafiği.



Bu çalışma kapsamında sıvı içerisinde Gümüş ve Bakır elementlerine uygulanan lazer ablasyon yönteminde oluşan nanoparçacıkların şekli, boyutu ve yapısı, uygun lazer parametreleri ve deneysel koşullar seçilerek kontrol edilebilir [2]. Buna ek olarak, deney esnasında kullanılan yüksek enerjili femtosaniye atımlı lazerin farklı malzemelere ablasyon işleminin uygulanması konusunda nanosaniye atımlı ve pikosaniye atımlı lazere göre daha elverişli olduğu sonucuna varılmıştır [1].

## Kaynakça

1. Barcikowski S., "Handbook of Laser Synthesis-Processing of Colloids", (2020).
2. Compagnini G., Messina E., Puglisi O., Nicolosi V., "Laser Synthesis of Au/Ag Colloidal Nano-Alloys: Optical Properties, Structure and Composition", Applied Surface Science, (2007).

## SPONSORLARIMIZ

**aselsan**

<https://www.aselsan.com>

**ASENTEK**

<https://asentek.net>



<https://www.atomikateknik.com>



<https://www.fmo.org.tr>



<https://www.teknotip.com.tr>

## KATILIMCI LİSTESİ

*Katılımcı listesi etkinlik sonrası eklenecektir.*