

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

İKİ BOYUTLU AĞIR MİKNATISLARDA YÜK KATKILAMA VE ZORLANMA
ETKİSİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

Muhammed Emin DEMİRCİ

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

ANKARA
2024

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

İKİ BOYUTLU AĞIR MIKNATISLARDA YÜK KATKILAMA VE ZORLANMA ETKİSİNİN YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ İLE İNCELENMESİ

Muhammed Emin DEMİRCİ

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Ana Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Mehmet KABAK
Eş Danışman: Doç. Dr. Aybey MOĞULKOÇ

Son yıllarda, iki boyutlu (2B) malzemelerin araştırılması, yoğun madde fiziği ve malzeme bilimi alanında önemli keşiflere yol açmıştır. Bu malzemeler arasında, 2021 yılında ortaya çıkan ağır 2B mıknatıslar, benzersiz elektronik ve magnetik özellikleri nedeniyle çeşitli teknolojik uygulamalar için umut verici adaylar olarak ortaya çıkmıştır. Yük katkılama ve zor etkisi gibi dış faktörlerin, bu malzemelerin davranışları üzerindeki etkisini anlamak, performanslarını incelemek ve potansiyellerini ortaya çıkarmak için çok önemlidir.

Bu tez çalışmasında, atomik seviyelerdeki malzemelerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini (YFT) baz alınarak, ağır 2B mıknatıslardaki yük katkılama, zorlanma etkilerini ve Curie sıcaklıklarını araştırmaya odaklanmaktadır. YFT, kuantum mekaniği ilkelerinden yararlanarak, malzemelerin elektronik yapısı, magnetik, optik ve daha birçok özellikleri hakkında doğru tahminler yapılmasını sağlar ve farklı koşullar altındaki davranışları ile ilgili yönelimlerini sunar.

Nanoelektronik, spintronik ve kuantum teknolojilerinde geniş bir uygulama yelpazesi bulunan oldukça potansiyel adaylar olan bu 2B Janus magnetik malzemeler, güçlü spin-yörünge eşleşmesi, büyük bant aralıkları ve ayarlanabilir magnetik özelliklerin benzersiz kombinasyonu, gelişmiş performansa sahip yeni işlevler ve cihazlar tasarlamak için yeni fırsatlar sunmaktadır. Bu tez çalışmasında, YFT simülasyonlarını kullanarak VSBr, VSI ve VSeI tek katmanlı malzemelerin; elektronik, magnetik ve yapısal özelliklerini araştırmaya odaklanıyoruz. Katkılama ve dış stresin bu malzemeler üzerindeki etkilerini inceleyerek, yeni nesil elektronik ve spintronik cihazların tasarımında pratik olarak kullanılabilmelerini sağlamak amacıyla davranışları hakkındaki bilgilerimizi derinleştirmeyi amaçlıyoruz.

Eylül 2024, 42 Sayfa

Anahtar Kelimeler: İki-Boyutlu Malzemeler, Janus Magnetik Malzemeler, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, Zor Etkisi, Yük Katkılama, Curie Sıcaklığı

ABSTRACT

Master Thesis

INVESTIGATION OF DOPING AND STRESS EFFECTS IN HEAVY TWO-DIMENSIONAL MAGNETS BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Muhammed Emin DEMİRCİ

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics Engineering

Supervisor: Prof. Dr. Mehmet KABAK
Co-Supervisor: Doç. Dr. Aybey MOĞULKOÇ

In recent years, the exploration of two-dimensional (2D) materials has led to important discoveries in the field of condensed matter physics and materials science. Among these materials, heavy 2D magnets, which emerged in 2021, have emerged as promising candidates for various technological applications due to their unique electronic and magnetic properties. Understanding the impact of external factors, such as charge doping and hard effect, on the behavior of these materials is crucial to study their performance and unlock their potential.

This thesis focuses on investigating charge doping, strain effects and Curie temperatures in heavy 2D magnets based on Density Functional Theory (DFT), which is widely used in the study of materials at the atomic level. By exploiting the principles of quantum mechanics, DFT allows accurate predictions to be made about the electronic structure, magnetic, optical, and many other properties of materials, and provides insights into their behavior under different conditions.

The unique combination of strong spin-orbit coupling, large band gaps and tunable magnetic properties in these 2D Janus magnetic materials, which are highly potential candidates for a wide range of applications in nanoelectronics, spintronics and quantum technologies, offers new opportunities to design novel functionalities and devices with enhanced performance. In this thesis, we focus on investigating the electronic, magnetic and structural properties of VSB_r, VSI and VSeI monolayer materials using DFT simulations. By finding the effects of doping and external stress on these materials, we aim to deepen our knowledge of their behavior to enable their practical use in the design of next generation electronic and spintronic devices.

September 2024, 42 pages

Key Words: Two-Dimensional Materials, Janus Magnetic Materials, Density Functional Theory, Strain, Charging, Curie Temperature

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans tezım boyunca verdiđi destek ve rehberliđi için Prof. Dr. Mehmet Kabak'a en derin teşekkürlerimi sunarım. Eő danıőmanım Doç Dr. Aybey Mođulkoç'a, mentorluđu, uzmanlıđı ve sabrıyla bana destek olduđu için, çalıőmamın birçok aőamasında bana yardımları ve ilgisi esirgemeyen Rabia Çađlayan'a, Uzun süredir akıl hocam ve ilham kaynađım olan, hayatımın her alanında bana yol gösteren deđerli hocam Doç. Dr. Yeőim Mođulkoç'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Hesaplamalı Yođun Madde Fiziđi Araőtırma Grubu'nun deđerli üyelerine iőbirliđi ve destekleri için teşekkür etmek istiyorum. Son olarak, bana olan destekleri ve güvenleri için sevgili Aileme en derin őükranlarımı borçluyum. Hepinize teşekkür ederim.

Bu tez çalıőmasında yer alan nümerik hesaplamaların bir kısmı TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında), bir diđer kısmı ise Ankara Üniversitesi AYP(Grand No. 7A0443001) aracılıđıyla Hesaplamalı Yođun Madde Fiziđi (HYMF) Grubu'na ait yüksek başarımli hesaplama sisteminde yapılmıőtır. Ayrıca bu tez çalıőması TÜBİTAK tarafından 123F012 numaralı proje kapsamında desteklenmiőtir.

Muhammed Emin DEMİRÇİ
Ankara, Eylül 2024

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
SİMGELER DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER ve KAYNAK ÖZETLERİ	4
2.1 Janus iki Boyutlu Magnetik Malzemeler	4
2.2 2 Boyutlu Magnetik Malzemelerde Yük Katkılama ve Zor Etkisi Manipülasyonu.....	6
3. MATERYAL VE YÖNTEM	9
3.1 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)	9
3.2 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)	9
3.3 Heisenberg Hamiltoniyeni	10
3.4 Curie Sıcaklığı	12
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	14
4.1 Yapısal ve Titreşimsel Özellikler	14
4.2 Elektronik Özellikler	16
4.3 Magnetik Özellikler	22
4.4 Değiş Tokuş ve Anizotropi Parametreleri	24
5. SONUÇLAR	27
KAYNAKLAR.....	29
EKLER.....	33
ÖZGEÇMİŞ.....	42

SİMGELER DİZİNİ

BKT	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless
eV	Elektron volt
E_{COH}	Kohesif Enerji
J	Değişim Etkileşimi Parametresi
K	Kelvin
K_b	Boltzmann Sabiti
M	Magnetik Moment
meV	Milielektron volt
S	Spin Kuantum Sayısı
T_C	Curie Sıcaklığı
T_{KT}	Kosterlitz-Thouless Sıcaklığı
U	Hubbard Parametresi

Kısaltmalar

2B	İki Boyutlu
3B	Üç Boyutlu
AFM	Antiferromagnetik
DMI	Dzyaloshinskii-Moriya Interaction
FM	Ferromagnetik
FET	Alan Etkili Transistörler
GGY	Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
GM	Geçiş Metali
GMD	Geçiş Metali Dikalkojenitleri
HF	Hartree-Fock Yaklaşımı
PBE	Perdew-Burke-Ernzerhof
SYÇ	Spin Yörünge Çiftlenimi
VASP	Vienna Ab-initio Simulation Package
YFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
YYY	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Curie sıcaklığı faz geçiş eğrisi (Anonymous 2024).....	6
Şekil 3.1 Spin Hamiltonyeninin parametrelerini belirlemek için kullanılan spin konfigürasyonları	10
Şekil 4.1 Tek katmanlı VXY (a) VBrS, (b) VISe (c) VIS yapılarının üstten ve yandan gösterimi	14
Şekil 4.2 Zor altında değişen atomlar arası bağ boyları.....	15
Şekil 4.3 Zor altında değişen atomlar arası bağ açıları	15
Şekil 4.4 Janus VXY yapıların yapısal zor altında bant spektrumları.....	16
Şekil 4.5 Zor altında hesaplanan bant aralıkları.....	17
Şekil 4.6 Zor altında hesaplanan vadi yarılmaları.....	18
Şekil 4.7 Janus VXY yapıların yapısal yük katkılama etkisi altında bant spektrumları	19
Şekil 4.8 Yük katkılama etkisi altında hesaplanan bant aralıkları	21
Şekil 4.9 Yük katkılama etkisi hesaplanan vadi yarılmaları	22
Şekil 4.10 Hesaplanan tek katmanlı VBrS, VIS ve VISe yapılarının kararlı 1T fazlarının Hubbard (U) parametreleri.....	23
Şekil 4.11 Janus VXY yapıların yapısal zor altında değiş-tokuş parametresi (a), anizotropi parametreleri (b), (c) ve kritik sıcaklık değişimi (d).....	24
Şekil 4.12 Janus VXY yapıların yapısal yük katkılama etkisi altında değiş-tokuş parametresi (a), anizotropi parametreleri (b), (c) ve kritik sıcaklık değişimi (d)	25

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 Janus VXY tek katmanlarının Hubbard U parametreleri (U), örgü parametreleri (a), vanadyum ve halojen (kalkojen) atomları arasındaki bağ uzunlukları (dV-X(Y)) ve kohesif enerjileri (ECoh).	24
---	----

1. GİRİŞ

İki boyutlu (2B) malzemelerin keşfi, yoğun madde fiziği ve malzeme bilimi alanlarında devrim yaratarak yeni özellikler ve potansiyel uygulamalar alanını ortaya çıkarmıştır. 2004 yılında ilk sp^2 -hibridize tek katmanlı grafenin keşfedilmesinden bu yana, 2B malzemelere olan ilgi her geçen gün artmaktadır. Genel olarak, 2B malzemeler, iki veya daha fazla kovalent bağlı elementten oluşan çeşitli elementlerin veya bileşiklerin iki boyutlu allotropları olarak adlandırılabilir (Novoselov vd. 2004). Yapılan araştırmalar sonrasında grafen, nanoelektronik cihazlar, biyosensörler, piller, süper kapasitörler ve medikal alanlarda büyük bir avantaj sağlayacak bir malzeme olduğu ortaya çıkmıştır (Bhuyan vd. 2016). Grafenin bu kadar avantajlı ve yüksek performanslı kullanımından doğan talep ile bilim insanları yeni 2B malzemeler arayışına girmişlerdir. Önerilen ve sentezlenen Silisen (Vogt vd. 2012), Germanen (Dávila vd. 2014), ve Borofen (Mannix vd. 2015) gibi malzemelerden sonra yeni arayışlar ve malzemeleri geliştirme yöntemleri gün geçtikçe devam etmektedir. Örneğin, sentezinin ardından borofen'i fonksiyonelleştirme araştırmaları da hız kazanmıştır. Yapılan araştırmalarda borafen'in sıkıştırma ve çekme gerinimleri uygulanarak ve yüzeyi farklı atomlarla kaplanarak optik tepkisinin ayarlanabileceği ve çeşitli optoelektronik cihazlar için potansiyel bir aday olarak aday gösterilmiştir (Mogulkoc vd. 2018).

2B malzemelerin güçlü elektronik, magnetik, optik vb özellikleri nedeniyle bu alanlardaki kullanımlarına yönelik potansiyelleri, araştırmaları daha da arttırmıştır. Literatürde önerilen sayısız malzemelerin yanısıra 2015 ve 2017'de araştırılan ve sentezlenen ve CrI_3 (Huang vd. 2017) ve $Cr_2Ge_6Te_6$ (Gong vd. 2017), iki boyutlu ferromagnetik ve spintronik tabanlı teknolojilerin gelişmesindeki rol oynayacak en önemli buluşlardan biri olmuşlardır.

Önceki çalışmalar, elektronik, optik ve magnetik özelliklerdeki önemli değişiklikleri vurgulayarak, harici uyarılar yoluyla 2B malzemelerin ayarlanabilirliğini göstermiştir (Xu vd. 2018, Nha vd. 2024). Ancak düzlem dışı asimetri ile karakterize edilen 2B Janus malzemeler, yeni umut verici adaylar olarak ortaya çıkmaktadır. Adını iki yüzlü Roma tanrısı Janus'tan alan bu malzemeler, tek katmanlarının her iki tarafında farklı atomlara

sahiptir ve bu da içsel elektrik dipol momentlerine ve değişik fiziksel davranışlara yol açar. Janus 2B malzemelerinin gelişimi, MoS₂'deki bir sülfür katmanının selenyum ile değiştirilerek içsel bir dipol momentini oluşturduğu MoSSe'nin başarılı sentezi ile başlamıştır (Lu vd. 2017). Bu buluş, düzlem dışı asimetrisi nedeniyle yeni elektronik ve magnetik davranışlar sergileyen Janus WSSe ve WSTe gibi diğer Janus geçiş metal dikalkojenitleri (GMD'ler) üzerine kapsamlı araştırmaları teşvik etmiştir. (Zhang vd. 2018). Araştırmalar, Janus 2B GMD'lerin gelişmiş magnetik özellikler sergileyebileceğini göstermiştir. Örneğin, Janus MoSSe ve WSSe'nin, simetrik muadillerinde gözlenmeyen, katkılındığında veya gerilmeye maruz kaldığında ferromagnetik düzene sahip olduğu teorik olarak belirlenmiştir (Li vd. 2018). Ayrıca, ilk-ilk hesaplamalar Janus 2B malzemelerinin özelliklerinin anlaşılmasında önemli bir rol oynamıştır. Bu hesaplama çalışmaları, Janus yapıların harici elektrik alanlar, katkılama ve heteroyapı oluşturma yoluyla elektronik ve magnetik özelliklerinde önemli ölçüde ayarlanabilirlik elde edebileceğini önermektedir (Yagmurcukardes vd. 2020). Teorik çalışmalar, Janus malzemelerindeki içsel dipol momentlerinin, çok işlevli cihazlarda kullanılacak yeni magnetoelektrik etkilere yol açtığını göstermektedir (Guo vd. 2018).

Son yıllarda atomların özel düzeni ve uygulanan dış koşullara bağlı olarak güçlü magnetik fazlar sergileyen VSeS, VSeTe gibi vanadyum tabanlı yapılar malzeme biliminde önemli bir yer tutmaktadır (Wang vd. 2020, Guan ve Ni. 2020, He ve Li. 2018). Özellikle 2B Janus yapıları şeklindeki vanadyum bazlı malzemeler, magnetik, elektronik ve katalitik özellikleri nedeniyle büyük ilgi görmüştür. Bir geçiş metali olan vanadyum, çeşitli oksidasyon durumları sergiler ve bu da onu çok sayıda uygulama için çok yönlü hale getirir. VSe₂, VTe₂ gibi Vanadyum dikalkojenitler ve VSeTe gibi Janus tek tabakalı yapılar gibi vanadyum bazlı 2B malzemeler, içsel ferromagnetizma, yüksek elektron hareketliliği ve güçlü spin-yörünge etkileşimleri gibi önemli özelliklere sahiptir. Bu özellikler spintronik, enerji depolama ve kataliz uygulamaları için önemli özelliklerdir. Örneğin, vanadyum bazlı Janus tek katmanlarının ayarlanabilir magnetik fazları, magnetik durumlar üzerinde hassas kontrolün veri depolama ve işleme için gerekli olduğu gelişmiş spintronik cihazların tasarlanması için çok önemlidir (Smaili vd. 202, Jiang ve Mi. 2023). Ayrıca, vanadyum bazlı malzemeler, yüksek katalitik aktiviteleri ve

kararlılıkları nedeniyle katalizde, özellikle oksidatif ve elektrokimyasal reaksiyonlarda araştırılmaktadır. Bu malzemelerin sentezi genellikle kimyasal buhar biriktirme (CVD), moleküler ışın epitaksisi (MBE) ve kimyasal fonksiyonelleştirmeyi içerir, bu da bileşimleri ve yapıları üzerinde hassas kontrol sağlar. Bilim insanları tarafından zor etkisi, elektrik alanları ve katkılama gibi harici koşulları ayarlayarak vanadyum bazlı malzemelerin özelliklerine çeşitli ayarlamalar yapılabilir ve onları çeşitli teknolojik uygulamalar için istenilen koşullara uygun olmasını sağlanabilir.

Bu tez çalışmasında bu kaynaklardan edinilen bilgilerle literatürde önerilen vanadyum tabanlı kalkojenit ve halojenitten oluşan VXY (X=Br, I , Y=S, Se,) malzemelerinin (Caglayan vd. 2024) zor etkisi ve yük katkılama etkisi altındaki davranışları incelenmiştir. Yapılan araştırmalar sonucu VXY malzemelerinin malzemelerinin de gelecek teknolojilerde ve varolan malzemelerin geliştirilmesinde önemli rol oynayacakları düşünülmektedir. Ayrıca vanadyum tabanlı birçok yapı da farklı fazlarda incelenip dinamik olarak kararsız bulunan VXY yapıları EK 1’de verilmiştir.

2. KURAMSAL TEMELLER ve KAYNAK ÖZETLERİ

2.1 Janus iki Boyutlu Magnetik Malzemeler

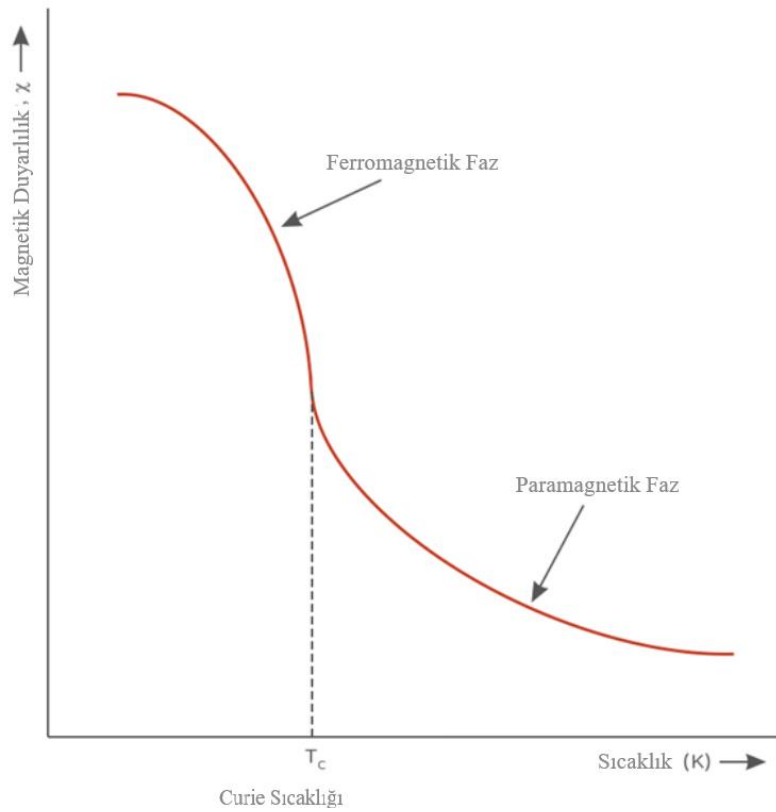
2B yapılarda magnetik düzen, üç boyutlu (3B) malzemelerdekinden temelde farklıdır. Balk ferromagnetlerde magnetik düzen, Ising veya Heisenberg modelleri gibi modeller kullanılarak tanımlanabilen komşu spinler arasındaki deęiş tokuş etkileşimleri tarafından yönlendirilir (Kittel 2005). Bununla birlikte, 2B sistemlerde, bu etkileşimler bir düzlemlle sınırlıdır. Magnetik anizotropiye baęlı olan magnetik düzenin varlığı, deęiş-tokuş etkileşimlerinin gücü ve termal dalgalanmalar gibi faktörlere baęlıdır (Mermin ve Wagner, 1966). 2B malzemelerdeki atomik magnetizmayı anlamak, atomik ölçekte magnetik olayların anlaşılmasında önemli bir ilerlemedir, böylece tipik olarak balk ferromagnetlerde görülenleri tek katmanlara ve çok ince filmlere genelleştirir. Balk malzemelerde, deęiş-tokuş etkileşimleri, Ising (1925) ve Heisenberg (1928) modelleri tarafından ifade edildięi gibi elektron spinlerinin birbirleriyle kolinear hizalanmasını saęlayan magnetik bir düzenle sonuçlanır. Ising (1925) modeli bunu iki duruma - yukarı veya aşıęı - ve bunların en yakın komşularıyla etkileşimlerine indirgeyerek daha uygun açıklamalar yapar. Bu model düşük sıcaklıklarda ferromagnetik düzenin varlığını öngörür (Ising, 1925).

2B magnetizma alanında, Ising teorisi, XY modelinin Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) teorisi ve Mermin-Wagner teoremi dahil olmak üzere çeşitli temel teorik çerçeveler ortaya çıkmıştır. Mermin-Wagner teoremi, 2B izotropik Heisenberg modeli gibi düşük boyutlu sistemlerde, kısa erimli izotropik etkileşimlerin, artan iki boyutlu dalgalanmalar nedeniyle uzun menzilli sürekli rotasyonel simetriyi sürdüremeyeceğini, düzen ve simetrisinin bozulmasına yol açacağını öne sürer. Bununla birlikte, anizotropinin tanıtılması, simetriyi azaltmak için kusurlar getirerek harici etkiler, örneğin harici bir magnetik alan gerektirir (Huang vd. 2017, Gong vd. 2017). Anizotropik spin modeli, anizotropi getirerek düşük bir enerji boşluğu yaratmayı önermekte, böylece iki boyutlu malzemelerde uzun erimli düzenin kurulmasını kolaylaştırmaktadır. Bu, düşük boyutlu sistemlerde ferromagnetizma ortaya çıkarmak için iki boyutlu malzemelerde düşük simetrisinin gerekliliğinin altını çizmektedir (He vd. 2022).

Bir Heisenberg modelini düşünülürde bu ayrık simetrisini içermese de, diğerslerinin yanı sıra CrI_3 ve $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ gibi ferromagnetik özelliklerini koruyan tek katmanların keşfedilmesine yol açmıştır. Balk CrI_3 için Curie sıcaklığı yaklaşık 61 K'dir (McGuire vd. 2015), ancak magnetizma, değış-tokuş etkileşimlerinin ve magnetik anizotropinin ferromagnetik durumu stabilize ettiğı bir tek katmana kadar varlığını sürdürür. 2B magnetik düzen, kristal alan etkilerinin yanı sıra spin-yörünge çiftleniminden kaynaklanan magnetik anizotropi ile stabilize edilir (Kittel, 2005). Ayrıca, katkılama ve elektrik alanları gibi dış etkiler magnetik malzemelerin davranışını değıştirebilir. Örneğın, gerilme, değış-tokuş etkileşimlerinde farklılık gösterebilirken, elektrik alanları spin-polarize durumları değıştirebilir (Bi vd. 2023). 2B magnetik malzemelerin uygulamaları, düşük güçlü yüksek yoğunluklu bellek ve mantık cihazlarına yol açan elektron spin durumlarının manipölasyonunu içeren spintronikte (Haugstad 2012) ve bu malzemeler kullanılarak kararlı kübitlerin yapılabildiğı kuantum hesaplamada (Loss ve DiVincenzo, 1998) araştırılmıştır. Bunlar, daha yüksek Curie sıcaklıklarına ve pratikte potansiyel kullanıma sahip yeni malzemelere yönelik araştırmalar için hala motive edici faktörlerdir (Zhu vd. 2020).

2B magnetik yapılarıdaki magnetizasyon esas olarak, farklı simetrisine sahip periyodik örgüler oluşturan geçiş metallerinin (GM) kısmen dolu 3d orbitallerinden kaynaklanır. GM iyonlarının örgü simetrisine göre, keşfedilen iki boyutlu mıknaatılar bal peteğı, üçgen, kare ve dikdörtgen örgüler olarak sınıflandırılabilir. Magnetik momentlerin hareketleri, magnetik faz geçişi sıcaklığına bağılı olarak değışkenlik gösterir. Sıcaklık arttıkça, malzeme ferromagnetik düzeni bozularak kritik sıcaklığına ulaşmış olur. Bu kritik sıcaklık değıerine Curie Sıcaklığı (T_C) denir. Curie sıcaklığının üzerinde ferromagnetik malzeme paramagnetik faza geçer. İlk olarak 19. yüzyılın sonlarında Pierre Curie (Curie, 1895) tarafından ortaya atılan bu kavram, magnetik faz geçişlerinin anlaşılmasında temel öneme sahiptir. Örneğın, balk malzemelerde Curie sıcaklığı, ardışık momentlerin aralarındaki değış tokuş etkileşimleriyle ne kadar güçlü bir şekilde çiftlendiğıne bağılıdır. Ancak, 2B malzemeler için durumu böyle değıildir. Tek katmanlı CrI_3 , 45 K'ye yakın T_C 'ye sahipken, balk analogu, artan katmanlar arası etkileşimler nedeniyle yüksek T_C 'yi korur (Huang vd. 2017). Aynı davranış $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ve Fe_3GeTe_2 gibi diğers 2B magnetik malzemelerde de görülür; Bu tür olaylar, iki boyutlu magnetik

düzenin stabilizasyonu için anizotropi ve spin-yörünge çiftleniminin önemini gösteren Ising ve Heisenberg modelleri tarafından teorik olarak tanımlanmıştır. Bunun dışında, zor etkileri, katkılama ve elektriksel alanlar gibi diğer dış etkenlerin 2B sistemler için T_c 'yi değiştirdiği bilinmektedir. Böylece magnetik özelliklerinin günlük hayatta kullanımı için tasarlanabileceği ve geliştirilebileceği yapılar sunmaktadır (Zhu vd. 2020, Jiang vd. 2018). Devam eden araştırmalar, spintronik cihazlarda ve diğer ileri teknolojilerde kullanımları için bir gereklilik olan oda sıcaklığında yüksek T_c değerlerine sahip yeni 2B malzemeler bulmayı amaçlamaktadır (Gong ve Zhang 2019).



Şekil 2.1 Curie sıcaklığı faz geçiş eğrisi (Anonymous 2024)

2.2 2 Boyutlu Magnetik Malzemelerde Yük Katkılama ve Zor Etkisi Manipülasyonu

Zor etkisi manipülasyonunda germe ve sıkıştırma etkileri gibi çeşitli formlar, malzeme özelliklerini farklı şekillerde etkiler. Belirli bir malzeme içindeki atomların bağ uzaması genellikle çekme gerilmeleri altında gerçekleşir. Bu elektronik bant yapısında ve hatta magnetik özelliklerinde değişikliklere yol açabilir. Bazı örnekler arasında gerilimin MoS₂

gibi GMD'ler direkt bant aralığı durumlarından indirekt bant aralığı durumlarına geçirdiği, böylece optik özelliklerini etkilediği ve optoelektronik için önemli hale getirdiği gösterilmiştir (He vd. 2013, Conley vd. 2013).Magnetik olaylar açısından bakıldığında, zor etkisi 2B Janus sistemlerinde Curie sıcaklığı (magnetik düzen) üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. $\text{Cr}(\text{X}_3, \text{X} = \text{I, Br, Cl})$ gibi (McGuire vd. 2015, McGuire vd. 2017, Huang vd. 2017) Janus tek katmanlarına gerilme uygulamanın yüksek yoğunluklu veri depolama ve spintronikte potansiyel uygulamaları olan topolojik olarak korunan magnetik yapıları stabilize etmek için çok önemli bir faktör olan Dzyaloshinskii-Moriya etkileşimini (DMI) artırabileceğini göstermiştir (Liang vd. 2020).

Sıkıştırıcı zor etkisi etkisi ise malzeme içindeki atomlar arası bağları kısaltma eğiliminde olup, katmanlar arası etkileşimi ve magnetik etkileşimleri değiştirebilir. $\text{MnBi}_2(\text{Se, Te})_4$ gibi 2B Janus malzemelerinde, sıkıştırıcı gerilmenin magnetik anizotropiyi değiştirdiği ve böylece momentlerin kararlılığını ve yönelimini etkilediği bildirilmiştir (Jiang vd. 2021). Bu durumun, Janus sistemlerinde zor etkisi üzerine yeni fiziksel olaylara ve fazlara yol açabilir. Örneğin, Janus VSeS tek katmanlılarında uygulanan gerilme etkisi gibi, içsel ferromagnetik ve anizotropik özelliklerini değiştirdiği ve onları esnek ve giyilebilir magnetik cihazlardaki uygulamalar için umut verici adaylar haline getirdiği bildirilmiştir (Abdollahi vd. 2020).

2B Janus magnetik malzemelerde yük katkılama uygulaması, bu malzemelerin elektronik, magnetik ve optik özellikleri üzerindeki derin etkisi nedeniyle giderek artan bir ilgi konusu olmuştur. Kimyasal doping veya elektrik alanı gibi yollarla yapılan yük katkılama uygulamaları, 2B Janus malzemelerinin davranışlarında ve işlevselliğinde ciddi değişikliklere yol açabilecek taşıyıcı yoğunluğunun değişmesine izin verir. İçsel asimetri ve inversion simetrisi, yük taşıyıcıları ekleyerek veya çıkararak hassas bir şekilde ayarlanabilen elektronik ve magnetik özelliklerle sonuçlanır. Örneğin, MoSSe gibi Janus geçiş metal dikalkojenitlerinde, elektrik alan uygulaması bant kenarlarında kaymaya ve farklı elektronik durumlar arasında geçişe neden olur. Bu ayarlanabilirlik, bant aralığı ve taşıyıcı yoğunluğu üzerinde hassas kontrolün gerekli olduğu optoelektronik ve fotodetektörlerdeki uygulamalar için önemlidir (Zhang vd., 2017). Ek olarak, yük katkılama 2B Janus malzemelerinin magnetik özelliklerinden sorumludur. $\text{Cr}(\text{X}_3, \text{X} = \text{I, Br, Cl})$

Br, Cl) bazlı elektrik yüklü magnetik tek katmanlarda, harici bir elektrik alan tarafından indüklenirse magnetik anizotropiyi deęiřtirebilme durumu vardır. Bu da spinlerin ve magnetik alanların kontrolüne dayanan spintronik cihazlar için gerekli olan magnetik durumların deęiřtirilmesini saęlar (Jiang vd. 2018).

Özet olarak, 2B Janus magnetik malzemelerde zor etkisi etkisi ve yük katkılama uygulamaları, çeřitli alanlarda malzemelerin özelliklerini uyarlamak için çok yönlü bir yaklaşım sunar. Zor etkisi etkilerini hassas bir şekilde kontrol ederek malzemenin yapısını ve yük katkılama yaparak bu malzemelerin elektronik, optik ve magnetik işlevlerini geliřtirebilir ve optoelektronik, spintronik ve esnek elektronik alanlarındaki yeniliklerin önünü açılabilir. İřsel asimetri, yük yoğunluęu ve zor etkisi yoluyla ayarlanabilen özelliklerin kombinasyonu, Janus malzemeleri gelecekteki arařtırma ve teknolojik geliřmeler için bir odak noktası haline getirmektedir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT), başta atomlar, moleküller ve yoğunlaştırılmış fazlar olmak üzere çok cisimli sistemlerin elektronik yapısını araştırmak için kullanılan bir kuantum mekaniksel modelleme yöntemidir. Çok elektronlu bir sistemin temel durum özelliklerinin, çok cisim dalga fonksiyonundan ziyade elektron yoğunluğu tarafından benzersiz bir şekilde belirlendiği ilkesine dayanır. YFT'nin ana fikri, bir sistemin temel durum enerjisinin elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olduğunu ve bu fonksiyonun tam temel durum enerjisini ve yoğunluğunu vermek için minimize edilebileceğini iddia eden Hohenberg-Kohn teoremlerinde özetlenmiştir (Hohenberg ve Kohn, 1964). YFT, Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (YYY) veya Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGY) gibi değişim-korelasyon fonksiyonu için yaklaşımlar kullanarak, elektronik özelliklerin pratik olarak hesaplanmasına izin verir ve hem malzeme bilminde hem de kimyada kullanışlı bir araç haline getirmiştir (Kohn & Sham, 1965).

3.2 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), potansiyelimsi veya projektör artırılmış dalga yöntemi veya temel düzlem dalga seti kullanarak ab-initio kuantum mekaniksel moleküler dinamikleri simüle etmek için kullanılan bir simülasyondur. VASP'de kullanılan teori, değişken enerji olarak serbest enerji ve moleküler dinamik zaman aralığında anlık elektronik temel durumun kesin bir değerlendirmesi ile yerel yoğunluk yaklaşımına dayanmaktadır. VASP, YFT'de Kohn-Sham denklemlerini çözerek veya Hartree-Fock (HF) yaklaşımında Roothaan denklemlerini çözerek çok fonksiyonlu Schrödinger denkleminin yaklaşık bir çözümünü hesaplar. Hartree-Fock yaklaşımını YFT ile karıştıran hibrit fonksiyoneller de uygulanmaktadır.

Ayrıca, Green fonksiyonu yöntemleri (GW quasiparticles ve ACFDT-RPA) ve çok cisimli pertürbasyon teorisi (2. derece Møller-Plesset) VASP'ta mevcuttur. VASP'de tek

elektron orbitalleri, elektronik yük yoğunluğu ve yerel potansiyel gibi merkezi nicelikler düzlem dalga temel kümelerinde ifade edilir.

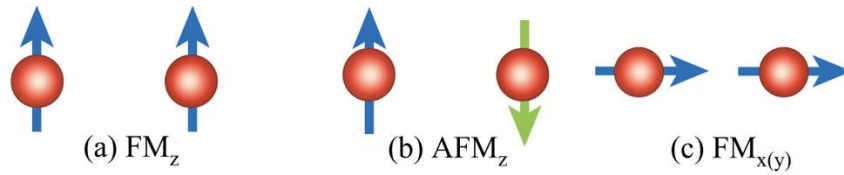
Elektronik temel durumu belirlemek için VASP, tekrarlayan alt uzayın doğrudan ters çevrilmesiyle minimizasyon yöntemi (RMM-DIIS) veya engellenmiş Davidson algoritmaları gibi verimli iteratif matris köşegenleştirme tekniklerini kullanır. Bunlar, öz tutarlılık döngüsünü hızlandırmak için yüksek verimli Broyden ve Pulay yoğunluk karıştırma şemalarına bağlanmıştır VASP programı, DFT hesaplamalarında INCAR, K-POINTS, POSCAR ve POTCAR girdi dosyalarıyla çalıştırılır.

3.3 Heisenberg Hamiltoniyeni

VBrS, VIS ve VISE tek tabakalarının magnetik özellikleri karakterize edebilmek için YFT sonuçları Denklem 3.1'de sunulan anizotropik spin Hamiltonyenine iz düşürülmüştür (mapped).

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - A \sum_i (S_i^z)^2 - E \sum_i [(S_i^y)^2 - (S_i^x)^2] \quad 3.1$$

Burada J, en yakın komşuluktaki S_i ve S_j spinleri arasındaki izotropik değiş-tokuş etkileşimini, A ve E magnetik tek-iyon anizotropi parametrelerini göstermektedir.



Şekil 3.1 Spin Hamiltonyeninin parametrelerini belirlemek için kullanılan spin konfigürasyonları (Caglayan vd. 2024)

(a) Düzlem dışı ferromagnetik (FMz), (b) düzlem dışı antiferromagnetik (AFMz) ve (c) düzlem içi ferromagnetik (Fmx(y))

Denklem 3.1'de sunulan Hamiltoniyenindeki parametreler Şekil 3.1 (a)-(c)'de gösterilen farklı magnetik konfigürasyonlar göz önünde bulundurularak toplam enerji iz düşürme

yöntemi (total energy mapping) yöntemiyle Denklem 3.2'deki ifadeler kullanılarak hesaplanmıştır.

$$\begin{aligned}
J &= (E_{AFM_z} - E_{FM_z})/16S^2 \\
A &= (E_{FM_x} + E_{FM_y} - 2E_{FM_z})/2S^2 \\
E &= 9(E_{FM_y} - E_{FM_x})/2S^2
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Burada, E 'deki 9 faktörü örgünün dönme simetrisinden kaynaklanmaktadır. Özellikle, düzlem içi magnetizasyon için Hamiltonyen'in açısall bağımlılığı Denklem 3.3'deki gibi verilmektedir.

$$\begin{aligned}
E' \sum_i S_i^2 [\cos^2(3\phi) - \sin^2(3\phi)] &\simeq 9E' \sum_i [(S_i^y)^2 - (S_i^x)^2] \\
S_i^x &= S_i \cos(\phi) , S_i^y = S_i \sin(\phi)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Burada VBrS, VIS ve VISE tek tabakalarındaki $S = 1$ durumundan dolayı spin operatörlerinin yüksek dereceli terimleri göz ardı edilmiştir. Magnon dağılım bağıntısı, siteler arası (inter-site) spin operatörleri için Tyablikov ayrışması (decoupling) ve yerleşik (on-site) spin operatörleri için Anderson-Callen ayrışmasını temel alan Green fonksiyonu yaklaşımı ile belirlenmiştir (Tyablikov, 1967, Hu vd. 1999). Bu yaklaşım altında magnon spektrumu Denklem 3.4'deki gibi ifade edilir. Burada tanımlanan $\omega_0(\mathbf{q})$ ve Φ sırasıyla sıfır sıcaklıktaki magnon dağılım bağıntısındaki izotropik katkı ve Anderson-Callen ayrıştırma fonksiyonunu (decoupling function) temsil etmektedir.

$$\begin{aligned}
E(\mathbf{q}) &= \sqrt{[F_1(\mathbf{q})]^2 - [F_2(\mathbf{q})]^2} \\
F_1(\mathbf{q}) &= \frac{\langle S \rangle}{S} \omega_0(\mathbf{q}) - 2A\Phi \langle S \rangle \\
F_2(\mathbf{q}) &= -2E\Phi \langle S \rangle
\end{aligned} \tag{3.4}$$

3.4 Curie Sıcaklığı

YFT kullanılarak magnetik malzemelerin Curie sıcaklığının (T_C) hesaplanması, bir malzeme içindeki elektronik yapının ve magnetik etkileşimlerin değerlendirilmesini içeren ayrıntılı bir yaklaşımdır. Curie sıcaklığı, bir malzemenin ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçtiği sıcaklığı temsil eden kritik bir parametredir.

Magnetik düzenin kritik sıcaklığı, uzun menzilli spin dalgalanmalarını hesaba katan minimal bir yaklaşım olan rastgele faz yaklaşımı (RPA) (J. Ruzs vd. 2005) dahilinde hesaplanabilir. Bir magnetik alt örgüye sahip bir ferromagnetik durumda, Curie sıcaklığı şu şekilde ifade edilebilir

$$k_B T_c = \frac{2 S(S+1)}{3 \langle S^z \rangle} \left\{ \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{q} [N^{-1}(\mathbf{q})] \right\}^{-1} \quad (3.5)$$

Burada $\Omega = 8\pi^2/\sqrt{3}a^2$ Brillouin bölgesi alanı, $N(\mathbf{q}) = (D + J(0) - J(\mathbf{q})) \langle S^z \rangle$ boşluklu bir ferromagnetin spin dalgası spektrumu ve $J(\mathbf{q}) = J(\mathbf{R}_{ij})$ 'nin Fourier dönüşümüdür (J. Ruzs vd. 2005), A. Narath vd. 1965). Curie sıcaklığı, çok ince bir Brillouin Zone örnekleme kullanılarak Eşitlik (3.5)'teki integralin sayısal değerlendirmesi ile hesaplanır. 2B'da Eşitlik (3.5), Mermin-Wagner-Hohenberg teoremine uygun olarak $T_c \sim J/\ln(J/D)$ (M. Modarresi vd. 2019) bağıntısına yol açar (Mogulkoc A. Vd. 2020).

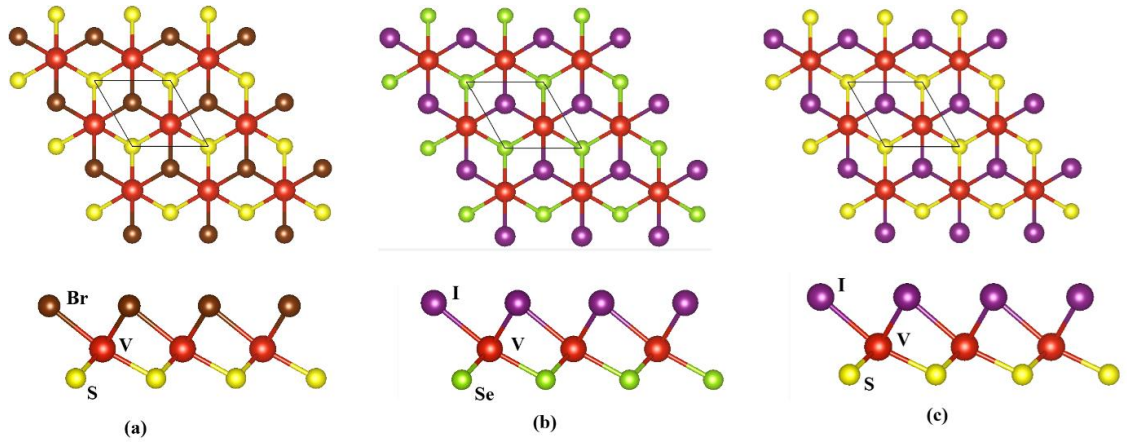
YFT hesaplamaları, Curie sıcaklıklarını tahmin etmek için çeşitli malzemelere başarıyla uygulanmıştır. Örneğin, Liechtenstein vd. (1987) tarafından yapılan çalışmada, ferromagnetik metaller ve alaşımlardaki değişim etkileşimlerini hesaplamak için YFT kullanmış ve T_c 'nin doğru tahminlerini elde etmişlerdir. Benzer şekilde YFT, geçiş metali dikalkojenitleri gibi iki boyutlu malzemelere, katkılama ve zor etkisinin magnetik özellikleri ve Curie sıcaklıkları üzerindeki etkilerini anlamak için uygulanmıştır (Cococcioni ve de Gironcoli, 2005).

Özetle, Curie sıcaklığının hesaplanmasında YFT'nin uygulanması, elektronik yapıdan magnetik deęişim etkileşimlerinin belirlenmesini ve Heisenberg Hamiltonyeni ve ortalama alan yaklaşımı gibi teorik modellerin kullanılmasını içerir. Bu yaklaşım, malzemelerdeki magnetik özelliklerin ve faz geçişlerinin ayrıntılı bir şekilde anlaşılmasını sağlar.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

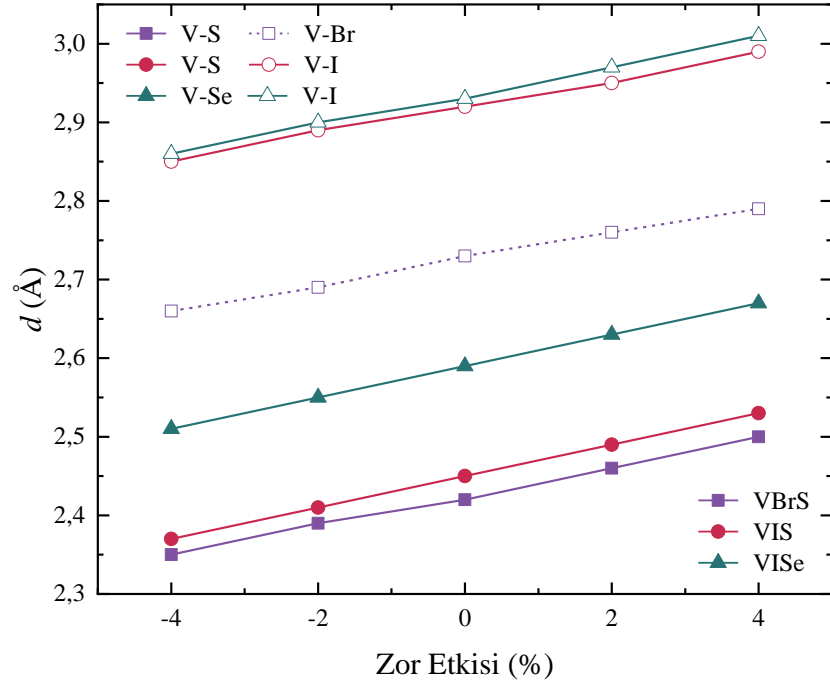
4.1 Yapısal ve Titreşimsel Özellikler

Önerilen VXY yapılarına optimizasyon ve dinamik kararlılık testleri hesaplamaları yapıp, malzemelerin kararlılıkları gözlemlenmiştir. Hesaplamalar sonucu kararlı olan yapılan Şekil 4.1’de gösterilmiştir.

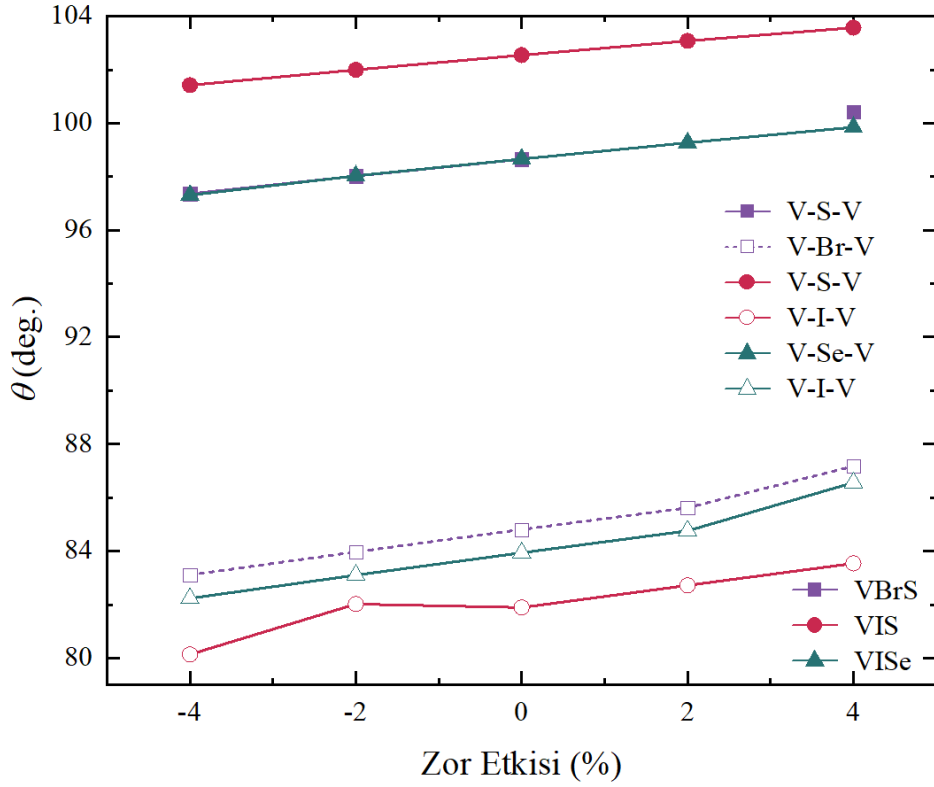


Şekil 4.1 Tek katmanlı VXY (a) VBrS, (b) VSe (c) VIS yapılarının üstten ve yandan gösterimi (Caglayan vd. 2024)

VBrS, VSe ve VIS yapılarına zor etkisi uygulanarak gözlemlenen yapısal değişiklikler aşağıdaki Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’de grafikleştirilmiştir.

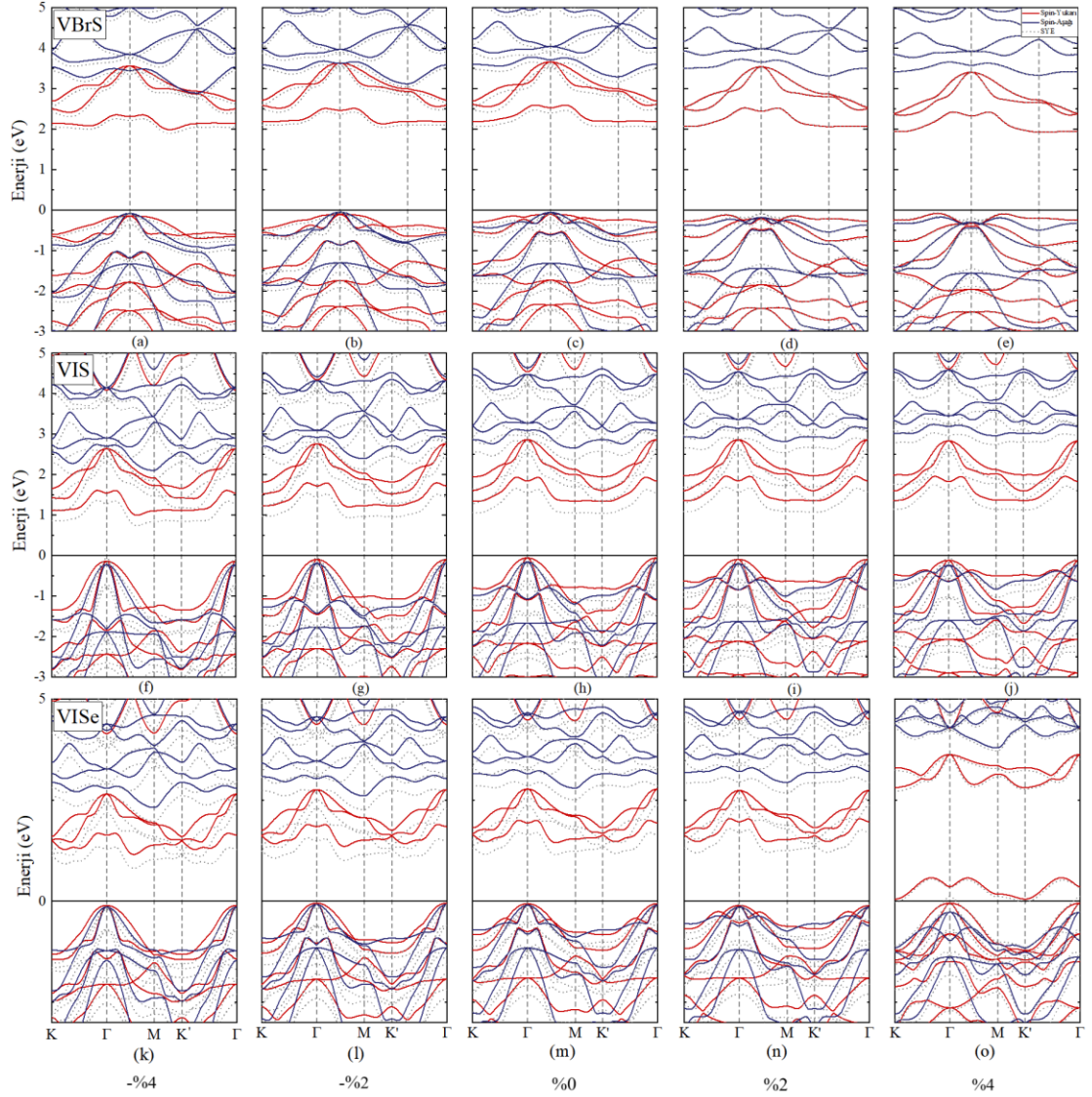


Şekil 4.2 Zor altında değişen atomlar arası bağ boyları



Şekil 4.3 Zor altında değişen atomlar arası bağ açıları

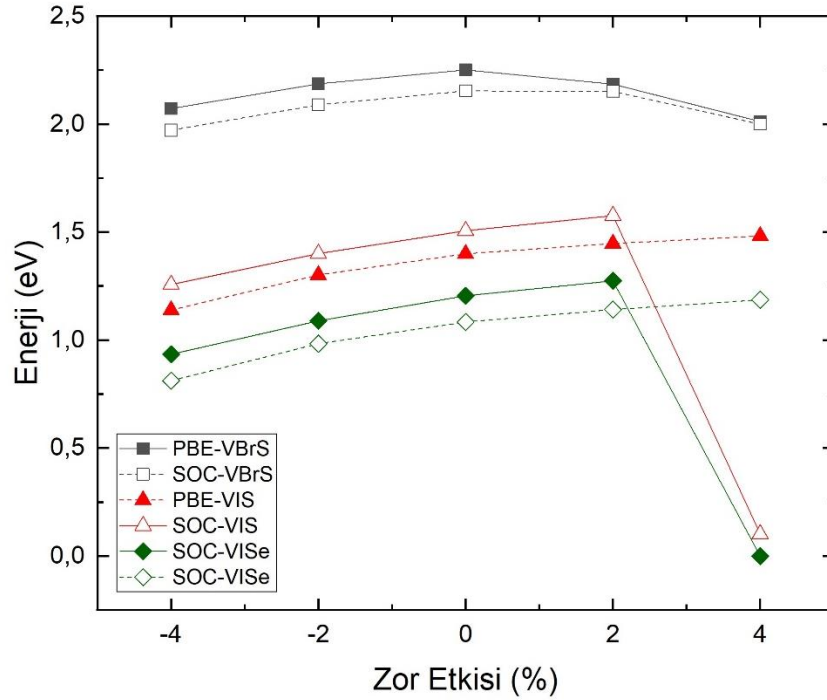
4.2 Elektronik Özellikler



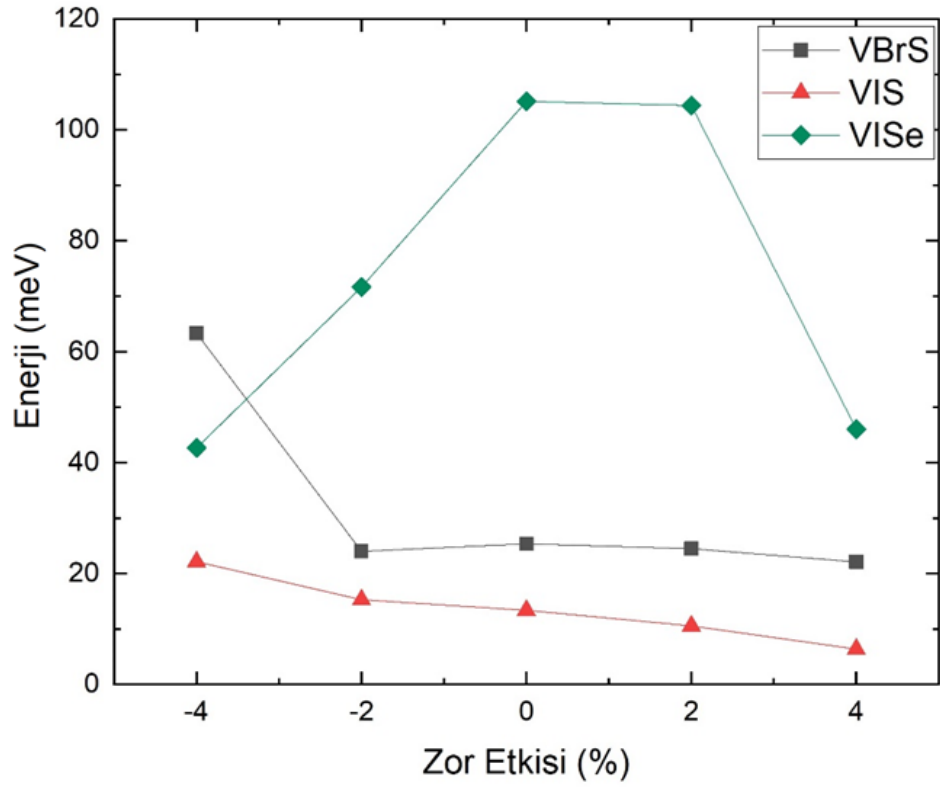
Şekil 4.4 Janus VXY yapıların yapısal zor altında bant spektrumları

Şekil 4.4'den görüldüğü gibi YFT-PBE yaklaşımı altında tüm yapılar gerek germe gerekse sıkıştırma zor etkisi altında yarıiletken davranışı korumuşlardır. Spin yörünge çiftlenimi (SYÇ) etkisi dikkate alındığında ise bantlarda yarılmalar gözlemlendiği gibi VSe için %4'lük germe zor etkisinde metalik davranışa geçiş gözlemlenmiştir. Her iki yaklaşım altında bant aralıkları ve SYÇ'den kaynaklı vadi polarizasyonları (yarılmaları) Şekil 4.5'de verilmiştir. Her iki yaklaşım altında VBrS'nin bant aralıkları hem sıkıştırıcı zor hem de germe zoru altında azalmıştır. Benzer şekilde vadi yarılmaları da -%4 durumu

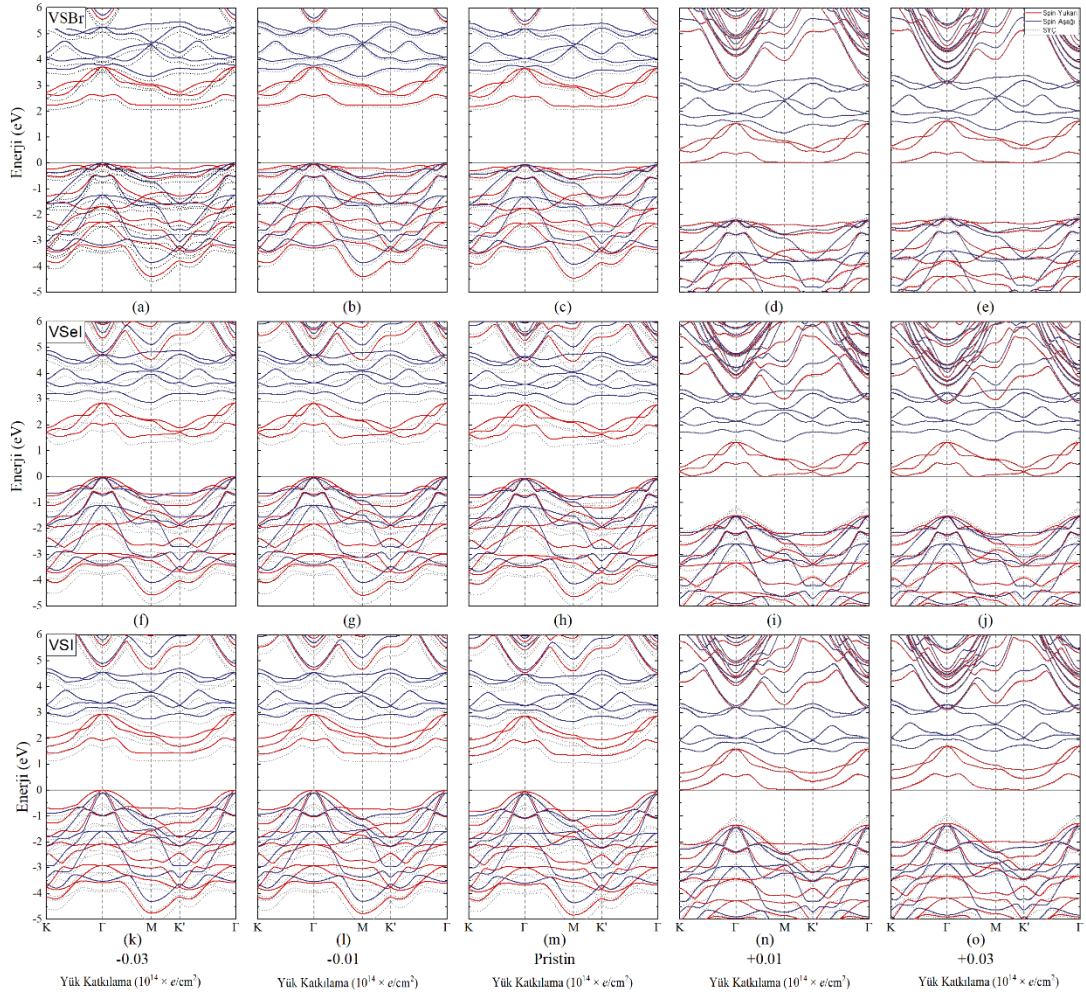
hariç pristin duruma göre az miktarda azaldığı gözlenmiştir. VIS yapısında ise vadi polarizasyonu sıkıştırıcı zor ile artış gösterirken germe zoru ile azaldığı gözlenmiştir. Benzer bir davranış hem YFT-PBE hem de YFT-SYÇ bant aralıklarında gözlenmektedir. En yüksek SYÇ'ye sahip VISE beklenildiği gibi diğer yapılara kıyasla daha yüksek vadi polarizasyonun sahiptir. Sıkıştırıcı zor ve germe zoru altında VISE için vadi yarılması azalmıştır. Zor bağlı bant aralıkları değişimi de etkisine benzer bir davranış sergilemiştir. Ancak %4'lük çekme zor etkisinde VISE yapısı, SYÇ'nin varlığında yarıiletken metale geçiş göstermiştir. Bu geçiş YFT-PBE hesaplarında gözlenmemiş olmasına karşın genel eğilim daha yüksek zor değerlerinde bu geçişin YFT-PBE sonuçlarına da yansıtacağını göstermektedir.



Şekil 4.5 Zor altında hesaplanan bant aralıkları



Şekil 4.6 Zor altında hesaplanan vadi yarılmaları



Şekil 4.7 Janus VXI yapıların yapısal yük katkılama etkisi altında bant spektrumları

Şekil 4.7 de, yük katkılamanın etkileri gösterilmektedir: VBrS, VIS ve VISE, de analiz edilen yük katkılama seviyeleri -0.03, -0.01, pristin (0.00), +0.01 ve +0.03 olup elektron çekilmesi veya eklenmesine karşılık gelmektedir. Bu katkılama seviyeleri elektronik yapıyı, özellikle de iletkenlik, bant aralığı ve manyetik davranış gibi malzeme özelliklerindeki değişiklikleri anlamak için kritik olan valans ve iletim bantlarının konumunu ve şeklini etkiler.

Pristin (c) durumunda, VBrS malzemesi küçük bir bant aralığı ile yarı iletken bir davranış sergilemektedir ve Fermi seviyesi bant kenarına yakındır, bu da dar bant aralıklı bir yarı iletken özellikte olduğunu gösterir. Pozitif katkılama da (d) ve (e), iletim bandını aşağı doğru kaydırarak bant aralığını küçültür ve sistemi metalik bir duruma yaklaştırır. Bu,

sistemde elektron yoğunluğunun artmasıyla iletim bandının dolması ve Fermi seviyesine yaklaşmasıyla olur.

Negatif katkılama ise (a) ve (b), elektronların çıkarılması anlamına gelir ve bu durum iletim ve valans bandını yukarı kaydırarak bant aralığını genişletir. Bant aralığının büyümesi, malzemenin iletkenliğinin azalmasına ve daha belirgin bir yarı iletken davranış sergilemesine yol açar. (a) katkılama seviyesinde, bant aralığı oldukça genişler, bu da sistemin daha düşük iletkenlik ve artan yarı iletken özellikler göstermesi anlamına gelir.

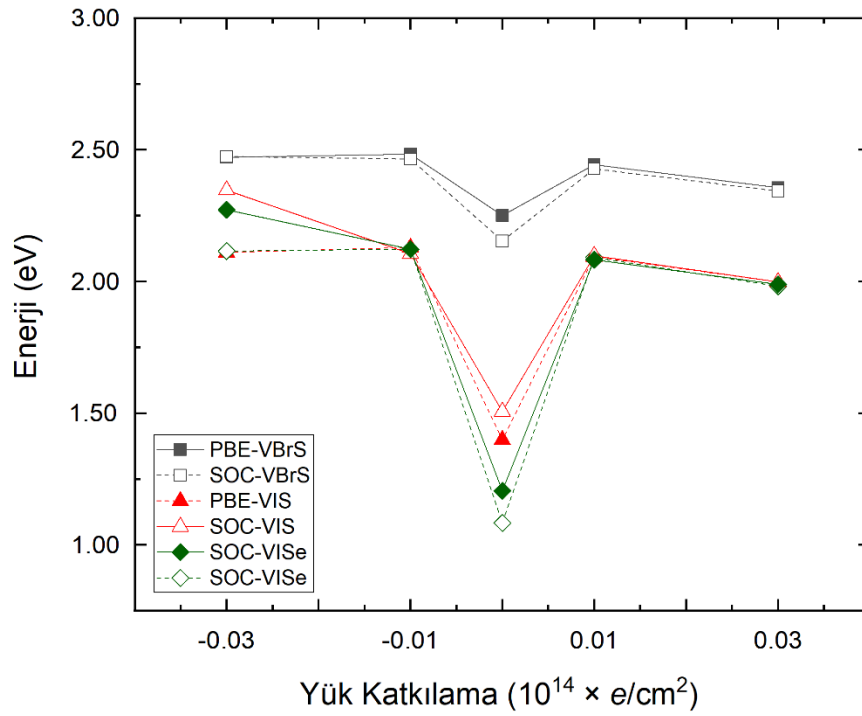
Pristin durumda (h), VIS malzemesi daha belirgin bir bant aralığına sahiptir, bu da güçlü bir yarı iletken karakter gösterir. Pozitif doping ile (i) ve (j), iletim bandı Fermi seviyesine doğru çekilerek bant aralığını daraltır ve metalik özellikler artar. (i) ve (j) pozitif doping seviyesinde, dar bant aralığı yarı iletken davranış göstermeye devam eder.

Negatif katkılama ile valans bandı yukarı kayar ve bant aralığı azalır. Bu durumda VIS, pozitif katkılamada olduğu kadar belirgin bir metalik özellik göstermez, daha çok yarı iletken özelliklerini korur ve büyük bir bant aralığına sahip olur. (f) katkılama seviyesi, sistemi daha az iletken hale getirir ve yarı iletken özellik göstermeye devam eder.

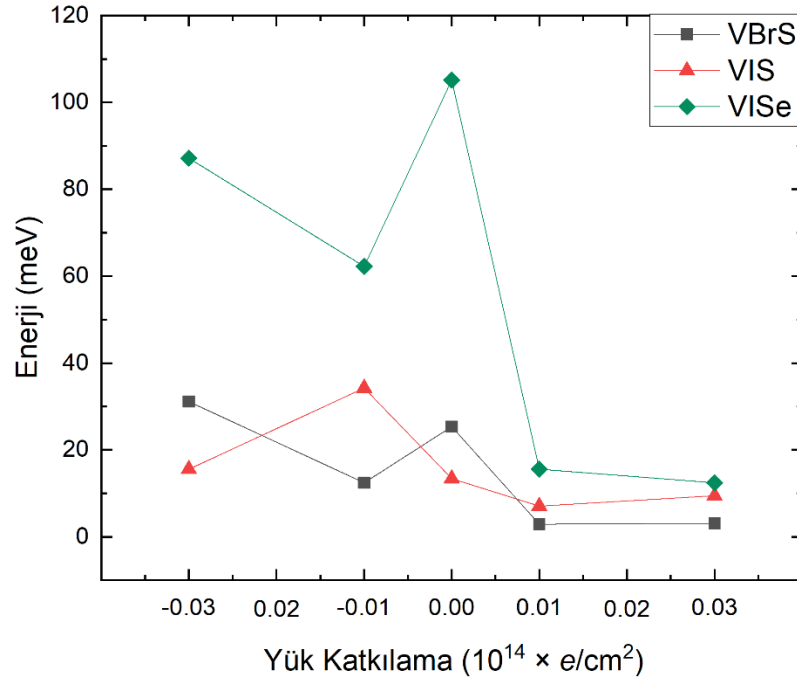
VISE, pristin durumda daha geniş bir bant aralığına sahiptir, bu da malzemenin güçlü yarı iletken özellikler sergilediğini gösterir. (n) ve (o) pozitif katkılamada, iletim bandı Fermi seviyesine yaklaşır ve bant aralığı daralır. Ancak, yüksek pozitif katkılama seviyesinde bile (o), bant aralığı tamamen kapanmaz; bu da VISE'nin hala yarı iletken özelliklerini koruduğunu ve metalik bir geçişe tamamen ulaşmadığını gösterir.

Negatif katkılama ile valans bandı çok az da olsa yukarı doğru kayar ve bant aralığı daralır, ancak malzeme yarı iletken özelliklerini korur. Diğer iki malzeme ile karşılaştırıldığında, VISE'nin yük katkılaması altında yarı iletken doğasını daha iyi koruduğu ve daha geniş bir katkılama aralığında stabil kaldığı görülmektedir.

Malzemelerin yük katkılama altında fiziksel özelliklerinin incelenmesi, alttaş üzerindeki davranışlarının daha iyi kavranması ve gelecekteki olası kullanım alanlarının belirlenmesi açısından büyük bir öneme sahiptir. Tüm yapıların artan değerleri için iletim bandı ve değerlik bandı (hem spin yukarı hem de spin aşağı durumlar) daha düşük enerjilere kaymıştır. Azalan değerler incelendiğinde ise band durumları pristin durumdan önemli bir farklılık göstermez. Azalan durumda değerlik bandları nerdeyse değişmezken, iletim bandları miktarı az da olsa daha yüksek enerjilere kayar. Vakum civarında yük varlığını kontrol etmek ve düzlem dalga tasvirinin neden olacağı olası hatalardan kaçınmak için yük katkılama miktarı ± 0.3 e/hücre ile sınırlandırılmıştır.



Şekil 4.8 Yük katkılama etkisi altında hesaplanan bant aralıkları



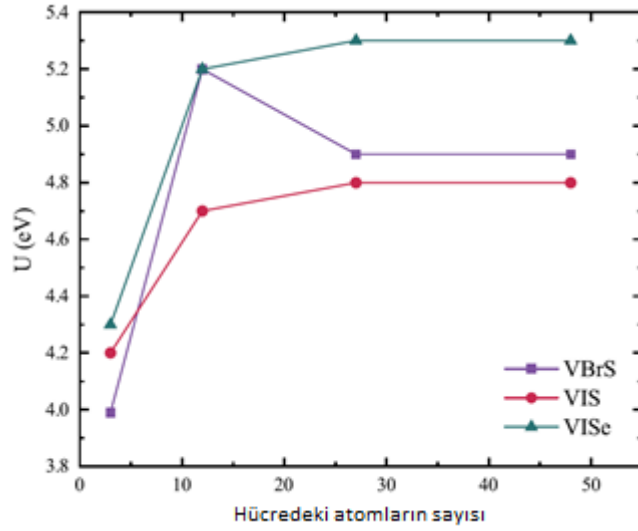
Şekil 4.9 Yük katkılama etkisi hesaplanan vadi yarılmaları

Şekil 4.9'da, VBrS, VIS ve VISE yapıların vadi yarılmaları değerlerinin yük katkılamasıyla nasıl değiştiği görülmektedir. Genel olarak, yük katkılaması yapılar üzerinde farklı etkiler yaratmakta, negatif doping genellikle vadi yarılmasını artırırken, pozitif doping ile yarılma belirgin şekilde azalmaktadır. Her bir yapı farklı katkılama seviyelerine duyarlı olup, en büyük yarılma genellikle pristin ya da negatif katkılama durumunda gözlemlenmektedir. VISE yapısı diğerlerine göre daha güçlü bir SYÇ sergilerken, pozitif katkılama etkisi tüm yapılarda vadi yarılmasını azaltan bir faktör olarak ortaya çıkmaktadır. Bu, yapının elektronik özelliklerinin katkılama ile nasıl hassas bir şekilde ayarlanabileceğini ve SYÇ'nin bu malzemelerde vadi polarizasyonu açısından kritik bir rol oynadığını göstermektedir.

4.3 Magnetik Özellikler

Yerel yoğunluk yaklaşımı (YYY) veya genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGY) şeklindeki standart YFT yöntemleri, güçlü korelasyonlu 3d ve 4f elektronları olan sistemlerde ihmal edilemez hale gelen öz etkileşim (self-interaction) sorunu nedeniyle

malzemelerin elektronik ve magnetik özelliklerini doğru bir şekilde tanımlayamamaktadır. Bu öz etkileşim hatasını düzeltmek için ele alınan yöntemlerden biri YFT+U yöntemidir. Burada etkin U_{eff} parametresi ($U_{\text{eff}} = U - J$), malzemelere göre farklılık göstermektedir, bundan dolayı incelenecek her bir malzemenin U_{eff} değerini belirlemek hesaplamaların deneysel veriler ile daha uyumlu olmasını sağlamaktadır. VBrS, VIS ve VISE tek tabakalarının U_{eff} değerleri Cococcioni ve Gironcoli (Cococcioni ve Gironcoli. 2005) tarafından önerilen lineer tepki yaklaşımı ile yapılmıştır. Burada hücre U parametresi yakınsayana kadar kademeli olarak büyütülmüştür ve sonuçlar Şekil 6'da sunulmuştur (Çağlayan vd. 2024)



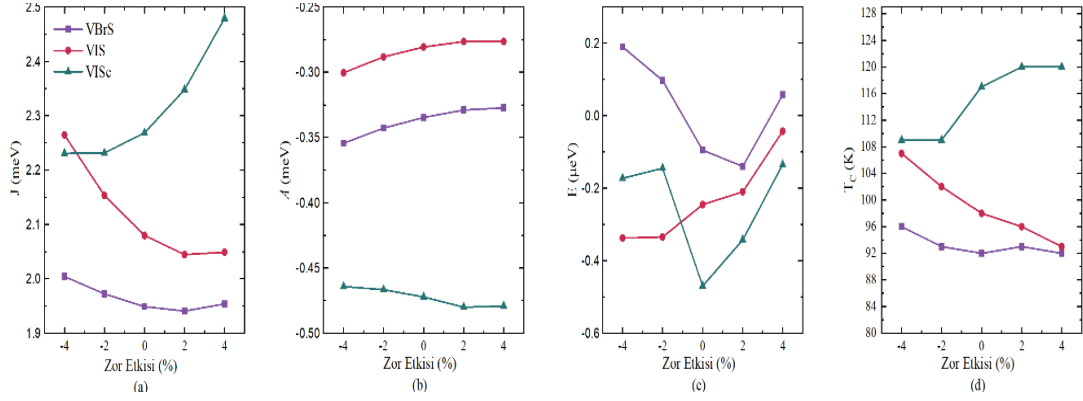
Şekil 4.10 Hesaplanan tek katmanlı VBrS, VIS ve VISE yapılarının kararlı 1T fazlarının Hubbard (U) parametreleri (Çağlayan vd. 2024)

Lineer tepki yaklaşımı ile elde edilen U parametreleri Tablo 4.5'de özetlenmiştir. Burada U parametresinin değişimini anlamak amacıyla VBrS-VIS ve VIS-VISE olarak gruplandırılmıştır. Hubbard parametresinin değerinin VBrS-VIS (VIS-VISE) tek tabakaları içindeki halojen (kalkojen) atomlarının artan atomik kütlesi ile arttığı (azaldığı) gözlenmiştir (Çağlayan vd. 2024)

Çizelge 4.1 Janus VXY tek katmanlarının Hubbard U parametreleri (U), örgü parametreleri (a), vanadyum ve halojen (kalkojen) atomları arasındaki bağ uzunlukları ($d_{V-X(Y)}$) ve kohesif enerjileri (E_{Coh}). (Çağlayan vd. 2024)

	U (eV)	a (Å)	d_{V-X} (Å)	d_{V-Y} (Å)	E_{Coh} (eV/atom)
VBrS	4.90	3.69	2.73	2.43	3.04
VIS	4.80	3.83	2.99	2.46	2.99
VISe	5.30	3.93	2.94	2.59	2.53

4.4 Değiş Tokuş ve Anizotropi Parametreleri

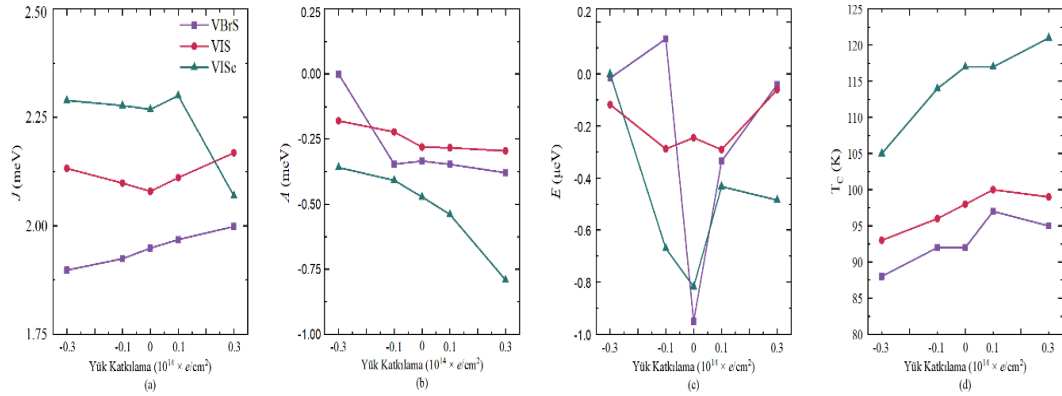


Şekil 4.11 Janus VXY yapıların yapısal zor altında değiş-tokuş parametresi (a), anizotropi parametreleri (b), (c) ve kritik sıcaklık değişimi (d)

Janus VXY yapıların zor altındaki elektronik özelliklerinin ve vadi polarizasyonlarının incelenmesinin yanı sıra hedeflendiği gibi magnetik özellikleri de incelenmiştir. Bunun için pristin durumdaki magnetik düzenler dikkate alınarak değiş-tokuş ve anizotropi parametreleri hesaplanmıştır ve bu parametrelerin zor etkisi altında değişimi Şekil 4.10'de gösterilmektedir.

Şekil 4.10 (a) incelendiğinde değiş-tokuş parametresinin (J), VBrS ve VIS için sıkıştırıcı zor altında artış gösterirken germe zorunda neredeyse hiç değişmediği gözlenmiştir. Öte yandan, VISe'de J 'nin germe zoru altında arttığı fakat sıkıştırıcı zor altında fazla değişim göstermediği anlaşılmıştır. Bu farklılıkların sebebi uzun erimli magnetik düzeni tesis eden

süper deęiş-tokuş mekanizması ile ilişkilendirilebilir. Uygulanan zor ile baę boyları ve açıları deęişim gösterir ve bu deęişim ligand atomlarının aracılık yaptığı deęiş-tokuş etkileşmesi olan süper deęiş-tokuş mekanizmasını da modifiye eder. Öte yandan, tek-iyon anizotropi parametrelerinin zor ile deęişimi incelenmiştir ((b), (c)). A'nın zor ile deęişiminin önemsiz olduęu deęerlendirilebilir. Öyle ki, tüm yapılar her iki zor yönünde de nerdeyse pristin A deęerini korumuştur. E'de ise zor altında deęişim daha keskin ve düzensiz görölmesine karşın mertebesinin düşük olması bu deęişimin önemsiz olduęunu düşündürmektedir. Bu parametreler kullanılarak, rastgele faz yaklaşımı altında Curie sıcaklığı hesabı gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.8 (d)'de görüldüğü üzere Curie sıcaklıklarının zor altında deęişimi J'nin deęişimine benzerlik göstermektedir. VISE'de germe zoru ile artış gösterirken, sıkıştırma zorundaki azalış önemsiz görünmektedir. VBrS ve VIS için ise sıkıştırma zoru ile Curie sıcaklığında bir artış görünürken, germe zoru altında nerdeyse deęişim göstermemiştir. Zor altında hesaplamaların yanı sıra aynı yapılar için yük katkılama probu ile de hesaplamalar yapılmıştır.



Şekil 4.12 Janus VXY yapıların yapısal yük katkılama etkisi altında deęiş-tokuş parametresi (a), anizotropi parametreleri (b), (c) ve kritik sıcaklık deęişimi (d)

Gerçekte, deneysel olarak sentezlenen örnekler üzerindeki içsel (örneğin, kusurlar, safsızlıklar, sınırlar) ya da dışsal (örneğin, yüzey kirlilięi, alttaşlar, kaplama bölgeleri) etkiler, yük dengesizliklerine yol açabilir ve bu durum, tek bir tabakada elektron ya da boşluk katkılanmasıyla sonuçlanabilir. Bu bağlamda, yük katkılama miktarları Şekil 4.11'da elektron ve deşik konsantrasyonları cinsinden verilmiştir. Yük taşıyıcılarının konsantrasyonu yüklenme miktarının yüzey alanına oranı olarak tanımlanmıştır. Deęiş-

tokuş terimlerinin elektron ve deşik konsantrasyonuna bađlı deđişimi (a)'da verilmiştir. Deđiş-tokuş terimi taşıyıcı konsantrasyonu ile önemli bir deđişim göstermemektedir. Sadece VİSe yapısı için artan elektron konsantrasyonu ile deđiş-tokuş terimi azalmıştır. Tek-iyon anizotropi terimlerinin katkılama konsantrasyonuna göre deđişimi (b) ve (c)'de verilmiştir. A terimi de taşıyıcı konsantrasyonu önemli bir deđişiklik göstermemekle birlikte VİSe için elektron konsantrasyonu ile azalış sergilemektedir. Öte yandan, VBrS için artan deşik konsantrasyonu ile düzlem içi ve düzlem dışı yönelimler arasındaki enerji bariyerinin azaldığı gözlenmektedir. Taşıyıcı konsantrasyonu ile E teriminin deđişimi belirgin bir eğilim sergilememekle birlikte, bu davranış makul kabul edilebilir. Öyle ki, E spinlerin x ve y yönelimleri arasındaki enerji bariyerini temsil etmektedir ve bu enerji bariyerinin mertebesi $\sim \mu\text{eV}$ mertebesindedir. Bu mertebelerde YFT hesaplamalarındaki toplam enerji farkları arasındaki nümerik hataların dışarlanması çok mümkün değildir. Son olarak, Curie sıcaklığının katkılama konsantrasyonuna göre deđişimi (d)'de incelenmiştir. Ferromagnetik fazın paramagnetik faza geçme sıcaklığı olan T_c elektron konsantrasyonu ile artarken, deşik konsantrasyonu ile azalmıştır. Yine de kritik sıcaklıkların taşıyıcı konsantrasyonuna bađımlılıkları sınırlıdır, önemli deđişim görülmemektedir.

5. SONUÇLAR

2B malzeme dünyası gün geçtikçe genişlemeye ve yeni kuramlar geliştirmeye devam etmektedir. GMD, Janus magnetik malzemeleri, geçiş metali karbürleri, geçiş metali nitrürleri (MXene) ve daha araştırılan çok çeşitli malzemeler ayarlanabilir elektronik, magnetik ve optik özellikler göstermektedir. Bu malzemelere yapılan katkılama, zor etkisi ve elektrik alan gibi harici etkiler yapıların işlevselliğini daha da artırmaktadır.

2B Janus magnetik malzemelerin özelliklerini zor etkisi ve yük katkılama gibi harici yollarla manipüle etme yeteneği, çok yönlülüklerini ve uygulama kapsamalarını genişletmektedir. Çekme (tensile) ve sıkıştırma (compressive) gibi mekanik zor etkilerinin uygulanması, malzemenin elektronik bant yapısının, magnetik düzeninin ve anizotropisinin hassas bir şekilde ayarlanmasına olanak tanır. Çekme etkisi, optik geçişler için enerji boşluğunu düşürür, dolayısıyla optoelektronik cihazlarda kullanılan elektronik iletkenliği destekler. Diğer taraftan sıkıştırıcı etki, enerji bant aralığını artırır. Böylece spintronik cihazlarda geniş uygulama alanı bulan yeni bir magnetizma türüne yol açabilecek magnetik fazları stabilize edebilir. Bu nedenle bu yöntemler malzemeleri özel işlemler için ayarlayabilir, farklı elektronik ve nano boyutlu cihazlardaki performanslarını ve kalitelerini artırabilir.

2B Janus magnetik malzemelerin özelliklerini değiştirmenin bir başka yolu da harici elektrik alan veya yük katkılama gibi yöntemler kullanarak onları geliştirmektir. Malzemelerin elektronik ve magnetik özellikleri kolaylıkla değiştirilebilir. Katkılama, yapının Fermi seviyesini kaydırabilir, durum yoğunluğunu değiştirebilir, magnetik değiş-tokuş etkileşimlerini değiştirerek magnetik anizotropi ve Curie sıcaklığı üzerinde kontrol edilebilir özellikler sağlayabilir. Bu ayarlanabilirlik, elektronik ve magnetik özellikler üzerinde hassas kontrol gerektiren elektronik ve spintronik cihazların geliştirilmesi için çok önemlidir.

Yük katkılama ve zor etkilerinin birlikte kullanımı, 2B Janus magnetik malzemeleri optimize etmek için avantajlar sunar. Bu yöntemler, özel elektronik, optik ve magnetik özelliklere sahip malzemelerin tasarlanmasını sağlayarak veri depolama, kuantum

hesaplama ve magnetik algılama teknolojilerindeki yeniliklerin önünü açmaktadır. Bu dış faktörlerin ayarlanması, daha önce mümkün olmayan malzeme performanslarına izin verir ve bu nedenle 2B malzeme biliminde yeni araştırma alanlarının açılmasına sebep olur.

Bu tez çalışmasında YFT kullanılarak yük katkılama ve zor etkilerinin ağır 2B Janus magnetik malzemeler üzerindeki etkileri araştırılmıştır. Katkılama ve zor etkisi modifikasyonlarının 2B malzemelerin elektronik, magnetik ve yapısal özelliklerine nasıl ayarlamalar yapabileceğine dair bilgiler sağlamış ve böylece çeşitli ileri teknolojik alanlarda uygulanabilirliklerini vurgulamıştır. VBrS, VIS ve VISE yapılarının farklı koşullar altındaki davranışlarını sistematik bir şekilde incelenerek, bu malzemelerin Curie sıcaklığı, mıknatıslanma ve genel kararlılığın mühendislik potansiyelinin önemi anlatılmıştır. Ayrıca araştırılan VXY malzemelerinin farklı fazlardaki yapıları da araştırılmış ancak yapılar dinamik olarak kararsız bulunduğundan ilerleyen aşamalara dahil edilmemiştir. Dinamik olarak kararsız bulunan VXY yapıları ve fonon hesapları ekteedir.

KAYNAKLAR

- Abdollahi, M., & Tagani, M. B. (2020). Tuning intrinsic ferromagnetic and anisotropic properties of the Janus VSeS monolayer. *Journal of Materials Chemistry C*, 8(38), 13286-13296.
- Anonymous (2024) <https://www.sciencefacts.net/curie-temperature.html> (Erişim Tarihi:05.04.2024)
- A. Narath, Zero-field Cr nuclear magnetic resonance in ferromagnetic CrI₃ : Renormalized spin-wave and Green's-function analysis, *Phys. Rev.* 140, A854 (1965)
- Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston.
- Bhuyan, M. S. A., Uddin, M. N., Islam, M. M., Bipasha, F. A., & Hossain, S. S. (2016). Synthesis of graphene. *International Nano Letters*, 6(2), 65-83. <https://doi.org/10.1007/s40089-015-0176-1>
- Bi, X., Qiu, C., Qin, F., Huang, J., & Yuan, H. (2023). Controlling exchange interactions and emergent magnetic phenomena in layered 3d-orbital ferromagnets. *Advanced Physics Research*, 2(3), 123-130.
- Caglayan, R., Mogulkoc, A., Mogulkoc, Y., Modarresi, M., & Rudenko, A. N. (2024). Unveiling Dzyaloshinskii-Moriya Interaction and Nontrivial Spin Textures in Novel Semiconductor Janus VX₂Y (X= Cl, Br, I; Y= S, Se, Te) Monolayers. *Physical Review B*. (Kabul edildi)
- Cococcioni, M., & de Gironcoli, S. (2005). Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method. *Physical Review B*, 71(3), 035105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.035105>
- Conley, H. J., Wang, B., Ziegler, J. I., Haglund, R. F., Pantelides, S. T., & Bolotin, K. I. (2013). Bandgap engineering of strained monolayer and bilayer MoS₂. *Nano Letters*, 13(8), 3626-3630.
- Curie, P. (1895). Propriétés magnétiques des corps à diverses températures. *Annales de Chimie et de Physique*, 5(7), 289-405.
- Dávila, M. E., Xian, L., Cahangirov, S., Rubio, A., & Le Lay, G. (2014). Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene. *New Journal of Physics*, 16(9), 095002.
- Dolgov, Sergey & Savostyanov, Dmitry. (2019). Parallel cross interpolation for high-precision calculation of high-dimensional integrals. *Computer Physics Communications*. 246. 106869. [10.1016/j.cpc.2019.106869](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.106869).
- Fang, X., Zhou, B., Sun, N., Fu, L., & Wang, X. (2019). Valley splitting and magnetic anisotropy in two-dimensional VI₃/MSe₂ (M = W, Mo) heterostructures. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(29), 17440-17450. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05436>
- Fang, X., Zhou, B., Sun, N., Fu, L., & Wang, X. (2022). Valley splitting and magnetic anisotropy in two-dimensional VI₃/MSe₂ (M = W, Mo) heterostructures.

Physical Chemistry Chemical Physics, 24(8), 4374-4381.
<https://doi.org/10.1039/D1CP05135K>

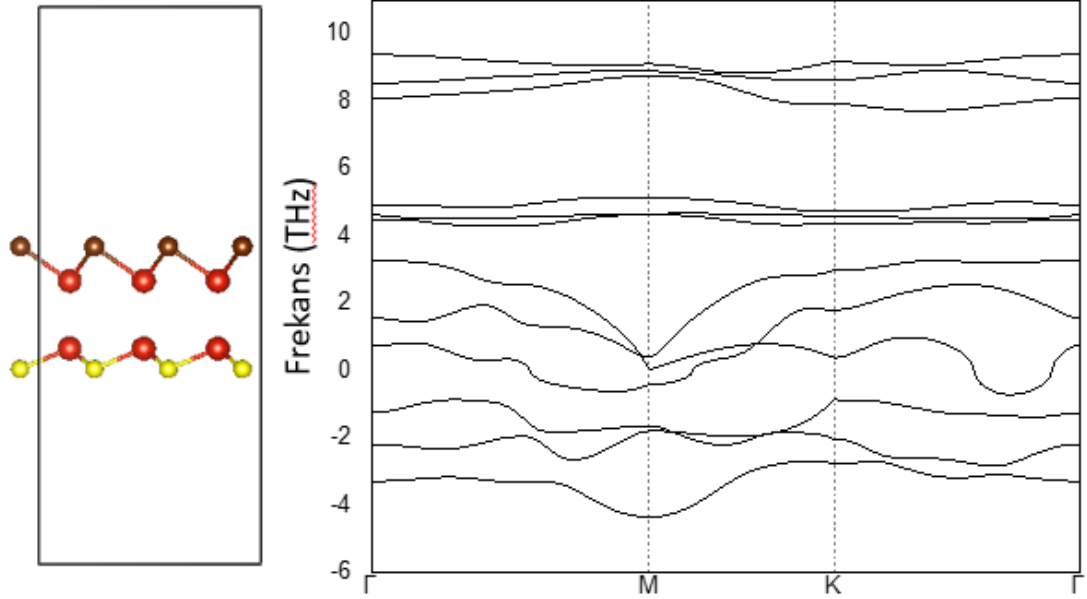
- Garcia, J. H., Schwingenschlögl, U., Roche, S., & Manchon, A. (2021). Janus monolayers of magnetic transition metal dichalcogenides as an all-in-one platform for spin-orbit torque. *Physical Review B*, 104(10), 104415. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104415>
- Gong, C., Li, L., Li, Z., Ji, H., Stern, A., Xia, Y., Cao, T., Bao, W., Wang, C., Wang, Y., Wang, Y., Qiu, Z. Q., Cava, R. J., Louie, S. G., Xia, J., & Zhang, X. (2017). Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature*, 546(7657), 265–269. <https://doi.org/10.1038/nature22060>
- Guo, Y., Sun, D., Ouyang, T., & Yang, K. (2018). Electric-field control of magnetism in two-dimensional Janus MoSSe monolayers. *Journal of Applied Physics*, 123(19), 194302. <https://doi.org/10.1063/1.5026865>
- Guan, Z., & Ni, S. (2020). Predicted 2D ferromagnetic Janus VSeTe monolayer with high Curie temperature, large valley polarization, and magnetic crystal anisotropy. *Nanoscale*, 12(44), 22735-22742.
- Haugstad, G. (2012). *Atomic Force Microscopy: Understanding Basic Modes and Advanced Applications*. Wiley.
- He, J., & Li, S. (2018). Two-dimensional Janus transition-metal dichalcogenides with intrinsic ferromagnetism and half-metallicity. *Computational Materials Science*, 152, 151-157.
- He, K., Poole, C., Mak, K. F., & Shan, J. (2013). Experimental demonstration of continuous electronic structure tuning via strain in atomically thin MoS₂. *Nano Letters*, 13(6), 2931-2936.
- He W, Kong L, Zhao W, Yu P. Atomically Thin 2D van der Waals Magnetic Materials: Fabrications, Structure, Magnetic Properties and Applications. *Coatings*. 2022; 12(2):122. <https://doi.org/10.3390/coatings12020122>
- Heisenberg, W. (1928). Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49(7-8), 619-636.
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Hu, L., Li, H., & Tao, R. (1999). Effects of interplay of dipole-dipole interactions and single-ion easy-plane anisotropy on two-dimensional ferromagnets. *Physical Review B*, 60(14), 10222. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.10222>
- Hu, T., Zhao, G., Gao, H., Wu, Y., Hong, J., Stroppa, A., & Ren, W. (2020). Manipulation of valley pseudospin in WSe₂/CrI₃ heterostructures by the magnetic proximity effect. *Physical Review B*, 101(12), 125401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.125401>
- Huang, B., Clark, G., Navarro-Moratalla, E., Klein, D. R., Cheng, R., Seyler, K. L., Zhong, D., Schmidgall, E., McGuire, M. A., Cobden, D. H., Yao, W., Xiao, D., Jarillo-Herrero, P., & Xu, X. (2017). Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*, 546(7657), 270–273. <https://doi.org/10.1038/nature22391>

- Ising, E. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1), 253-258.
- Jiang, J., Liu, X., Li, R., & Mi, W. (2021). Topological spin textures in a two-dimensional $\text{MnBi}_2(\text{Se}, \text{Te})_4$ Janus material. *Applied Physics Letters*, 119(7), 072401.
- Jiang, S., Shan, J., & Mak, K. F. (2018). Electric-field switching of two-dimensional van der Waals magnets. *Nature Materials*, 17(5), 406-410.
- Jiang, X., & Mi, W. (2023). Recent progress in Janus 2D materials for spintronics and electronics. *Materials Horizons*, 10(2), 123-145. <https://doi.org/10.1039/D2MH00345A>
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8th ed.). Wiley.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Li, X., Cao, T., Niu, Q., Shi, J., & Feng, J. (2018). Coupling the valley degree of freedom to antiferromagnetic order. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(10), 3738-3742. <https://doi.org/10.1073/pnas.1219420110>
- Liang, J., Wang, W., Haifeng, D., Hallal, A., Garcia, K., Chshiev, M., Fert, A., & Yang, H. (2020). Very large Dzyaloshinskii-Moriya interaction in two-dimensional Janus manganese dichalcogenides and its application to realize skyrmion states. *Physical Review B*, 101(18), 184401.
- Liechtenstein, A. I., Katsnelson, M. I., Antropov, V. P., & Gubanov, V. A. (1987). Local spin density Functional approach to the theory of exchange interactions in ferromagnetic metals and alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 67(1), 65-74.
- Lu, A.-Y., Zhu, H., Xiao, J., Chuu, C.-P., Han, Y., Chiu, M.-H., ... & Li, L.-J. (2017). Janus monolayers of transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, 12(8), 744-749. <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.100>
- Ma, Y., Kou, L., & Heine, T. (2021). Two-dimensional vanadium dichalcogenides: Janus monolayers with intrinsic ferromagnetism. *Physical Review B*, 104(2), 024417.
- Mannix, A. J., Zhou, X.-F., Kiraly, B., Wood, J. D., Alducin, D., Myers, B. D., & Hersam, M. C. (2015). Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. *Science*, 350(6267), 1513-1516.
- McGuire, M. A., Clark, G., KC, S., Chance, W. M., Jellison, G. E., Cooper, V. R., Xu, X., & Sales, B. C. (2017). Magnetic behavior and spin-lattice coupling in cleavable van der Waals layered CrCl_3 crystals. *Physical Review Materials*, 1(1), 014001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.1.014001>
- McGuire, M. A., Dixit, H., Cooper, V. R., & Sales, B. C. (2015). Coupling of crystal structure and magnetism in the layered, ferromagnetic insulator CrI_3 . *Chemistry of Materials*, 27(2), 612-620.
- Mermin, N. D., & Wagner, H. (1966). Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, 17(22), 1133-1136.

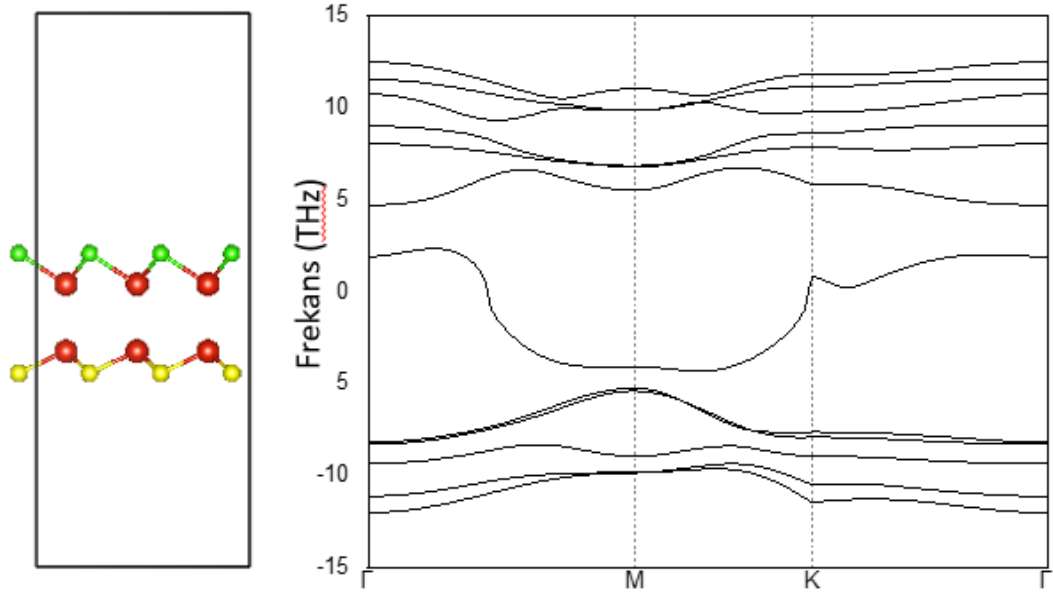
- M. Modarresi, A. Mogulkoc, Y. Mogulkoc, and A. N. Rudenko, Lateral Spin Valve Based on the Two-Dimensional CrN/P/CrN Heterostructure, *Phys. Rev. Appl.* 11, 064015 (2019).
- Mogulkoc, A., Mogulkoc, Y., Kecik, D. & Durgun, E. (2018). The effect of strain and functionalization on the optical properties of borophene. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(32), 21043-21050. <https://doi.org/10.1039/C8CP03594F>
- Nha, P. H., Nguyen, C. V., Hieu, N. N., Phuc, H. V., & Nguyen, C. Q. (2024). Theoretical prediction of electronic properties and contact barriers in a metal/semiconductor NbS₂/Janus MoSSe van der Waals heterostructure. *Nanoscale Advances*, 6(3), 1193-1201. <https://doi.org/10.1039/D3NA00852E>
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V. ve Firsov, A. A. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films, *science*, 306: 666-669.
- Smaili, I., Laref, S., J. Ruzs, I. Turek, and M. Diviš, Random-phase approximation for critical temperatures of collinear magnets with multiple sublattices: GdX compounds (X = Mg, Rh, Ni, Pd), *Phys. Rev. B* 71, 174408 (2005)
- Tyablikov, S. (1967). *Methods in the Quantum Theory of Magnetism*. Plenum Press. Bretonnet, J. (2017). Basics of the density functional theory. **, 1372–1405. Superzeure, E. X., & Superieure, E. X. (1964)
- Vogt, P., De Padova, P., Quaresima, C., Avila, J., Frantzeskakis, E., Asensio, M. C. & Le Lay, G. (2012). Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*, 108(15), 155501.
- Wang, Q. H., Bedoya-Pinto, A., Blei, M., Dismukes, A. H., Hamo, A., Jenkins, S., Koperski, M., Liu, Y., Sun, Q.-C., Telford, E. J., Kim, H. H., Augustin, M., Vool, U., Yin, J.-X., Li, L. H., Falin, A., Dean, C. R., Casanova, F., Evans, R. F. L., Chshiev, M., Mishchenko, A., Petrovic, C., He, R., Zhao, L., Tsen, A. W., Gerardot, B. D., Brotons-Gisbert, M., Guguchia, Z., Roy, X., Tongay, S., Wang, Z., Hasan, M. Z., Wrachtrup, J., Yacoby, A., Fert, A., Parkin, S., Novoselov, K. S., Dai, P., & Balicas, L. (2020). The magnetic genome of two-dimensional van der Waals materials. *Nature*, 591(7848), 229-234.
- Xu, M., Liang, T., Shi, M., & Chen, H. (2013). Graphene-like two-dimensional materials. *Chemical Reviews*, 113(5), 3766-3798.
- Yagmurcukardes, M., Qin, Y., Ozen, S., Sayyad, M., Peeters, F. M., Tongay, S., & Sahin, H. (2020). Quantum properties and applications of 2D Janus crystals and their superlattices. *Applied Physics Reviews*, 7(1), 011311. <https://doi.org/10.1063/1.5128736>
- Zhang, J., Jia, S., Kholmanov, I., Dong, L., Er, D., Chen, W., Guo, H., & others. (2017). Janus monolayer transition-metal dichalcogenides. *ACS Nano*, 11(8), 8192-8198.
- Zhang, J., Zhao, S., Wu, Z., Jiang, Q., Wang, Z., & Wang, F. (2018). Tunable electronic and magnetic properties of Janus transition metal dichalcogenides: First-principles calculations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(25), 17345-17351. <https://doi.org/10.1039/C8CP02950G>

EKLER

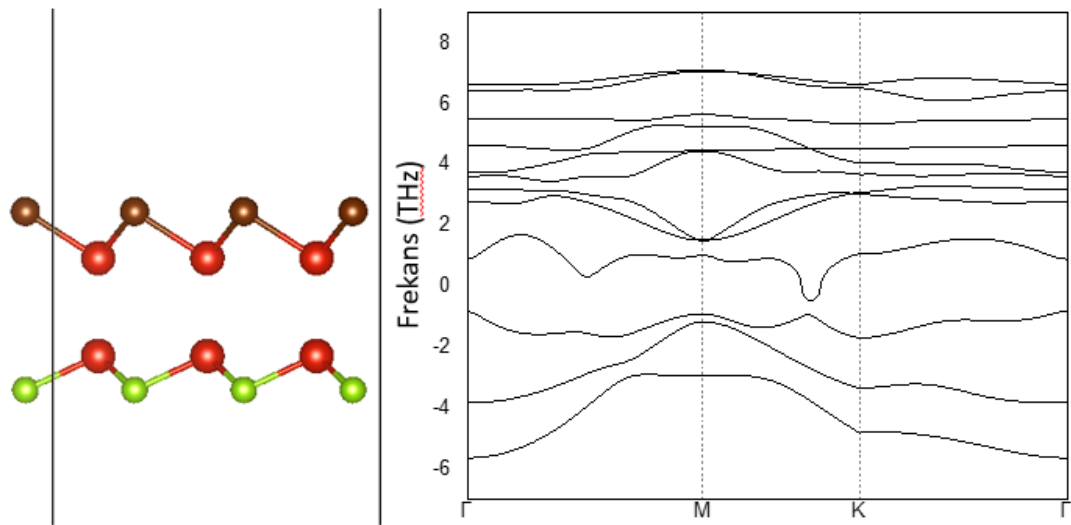
EK-1 DİNAMİK OLARAK KARARSIZ BULUNAN YAPILAR VE FONON SPEKTRUMLARI



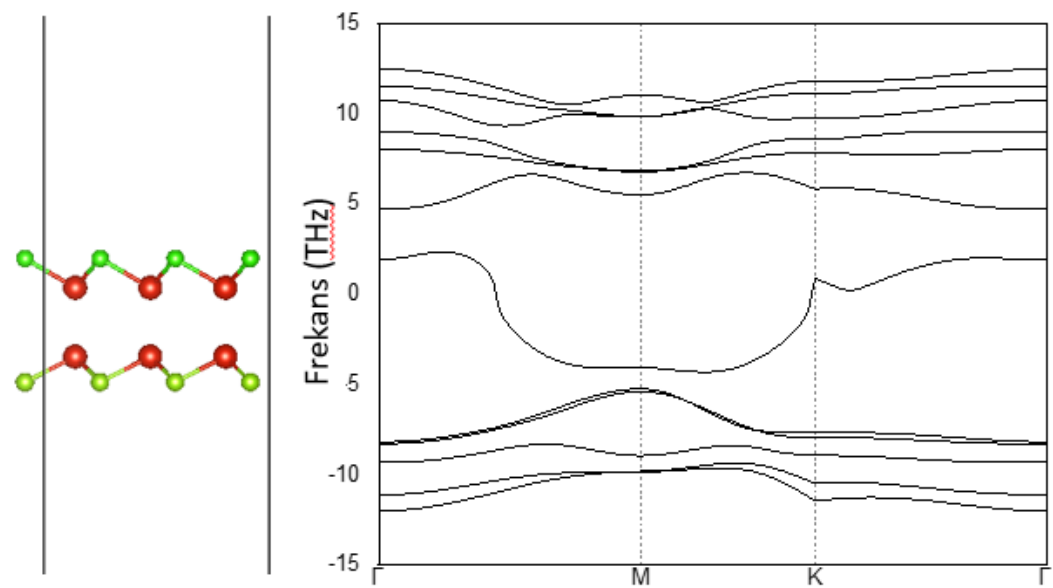
(a) V₂BrS



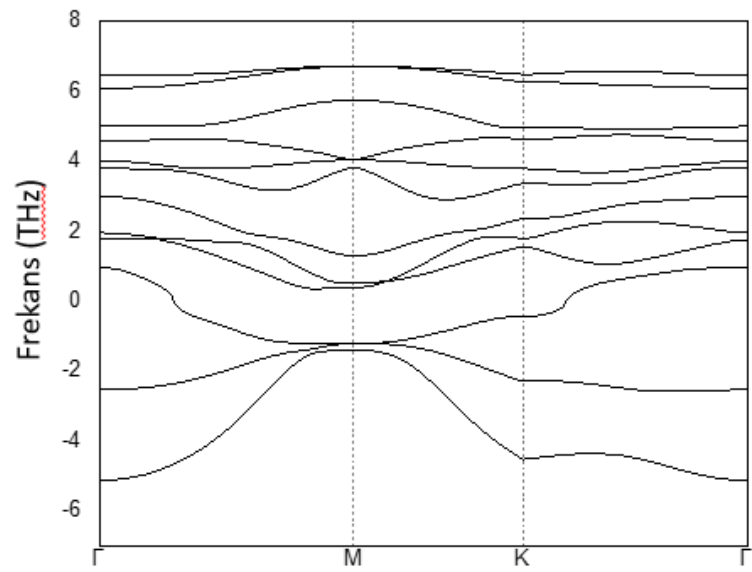
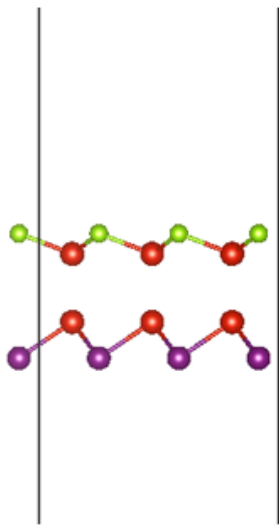
(b) V₂SCI



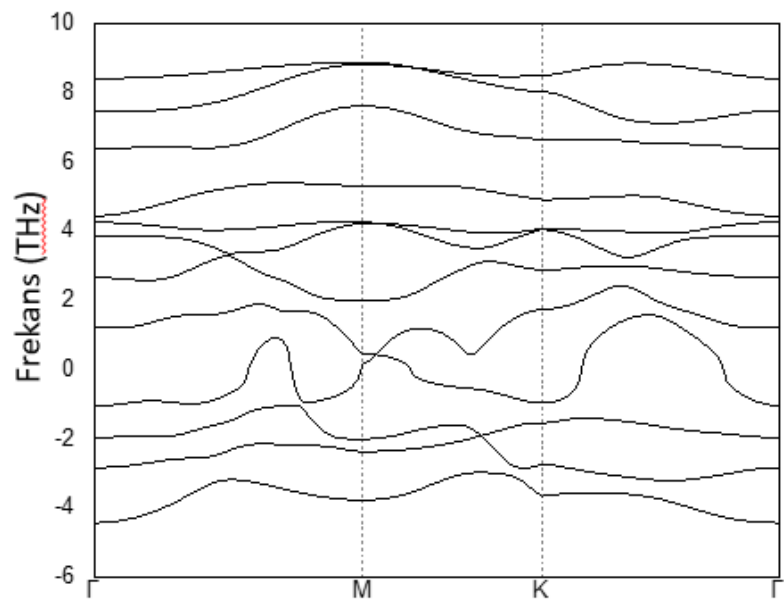
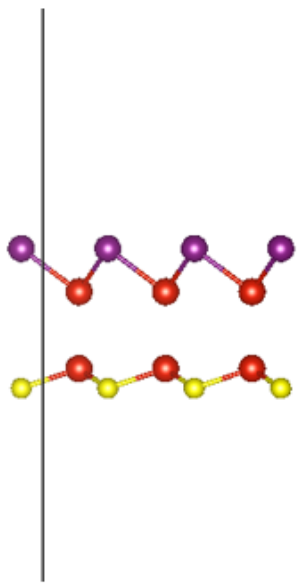
(c) V_2SeBr



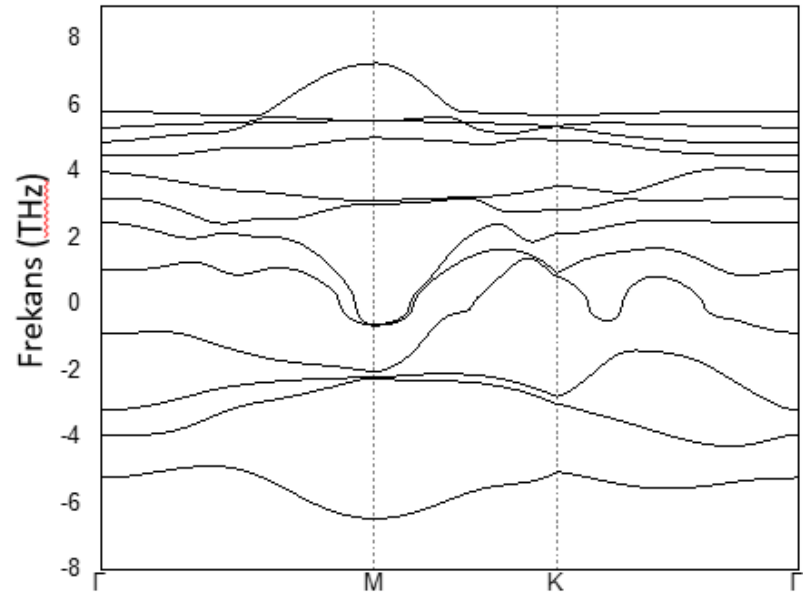
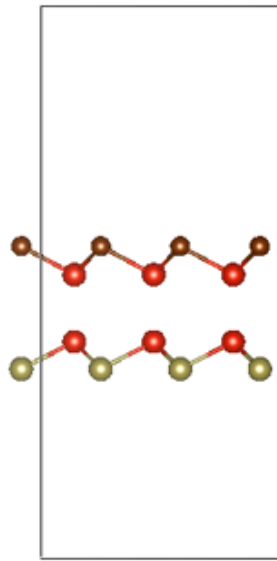
(d) V_2SeCl



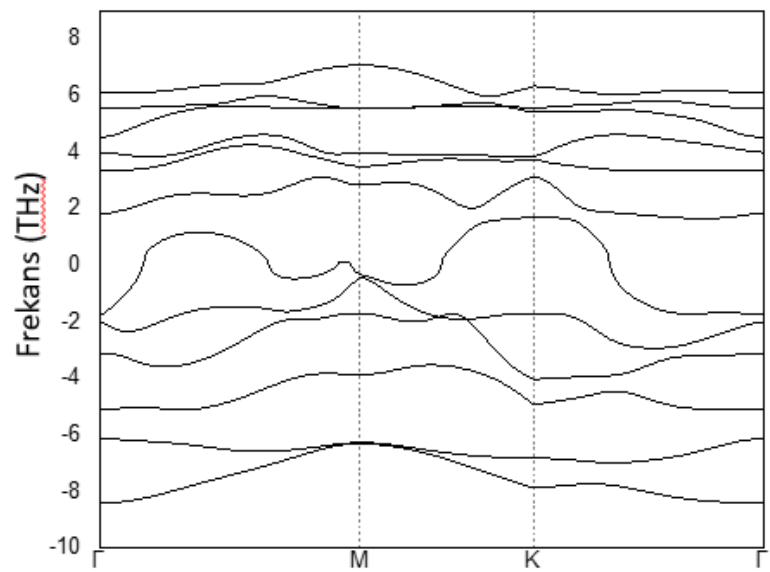
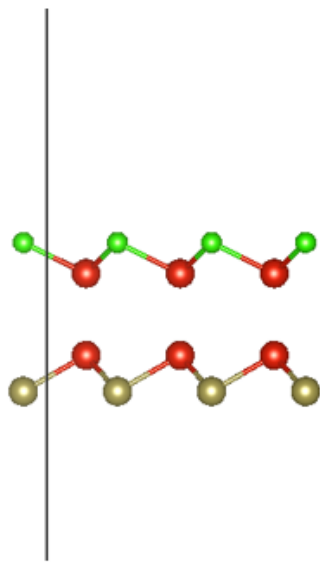
(e) V_2Se_1



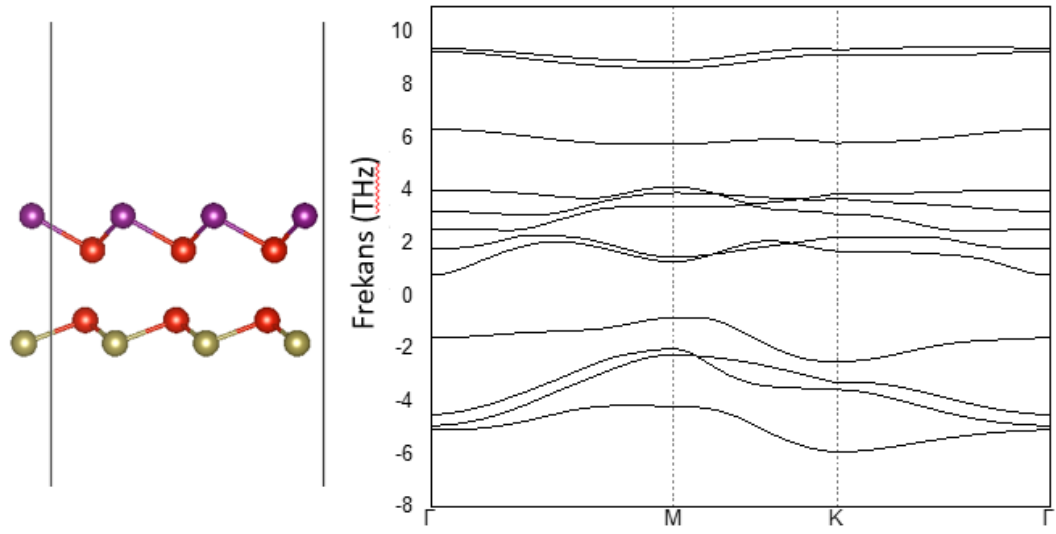
(f) V_2SI



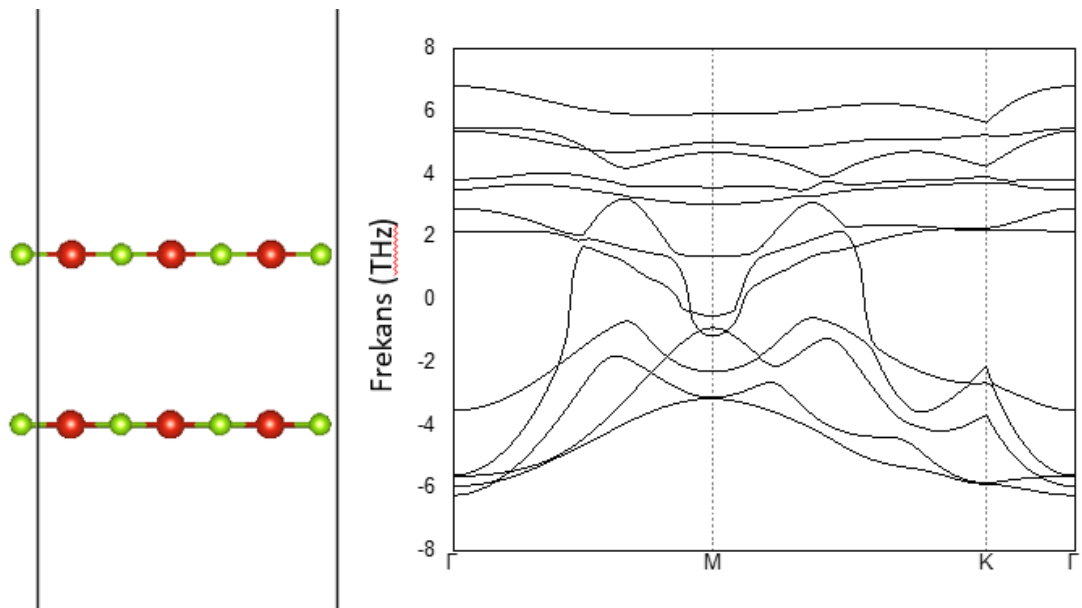
(g) V_2TeBr



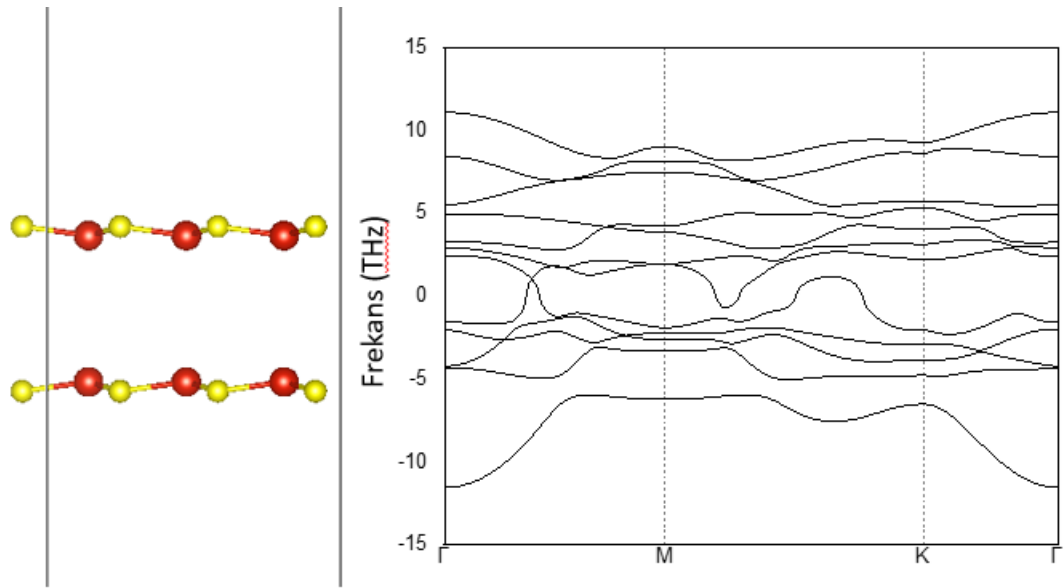
(g) V_2TeCl



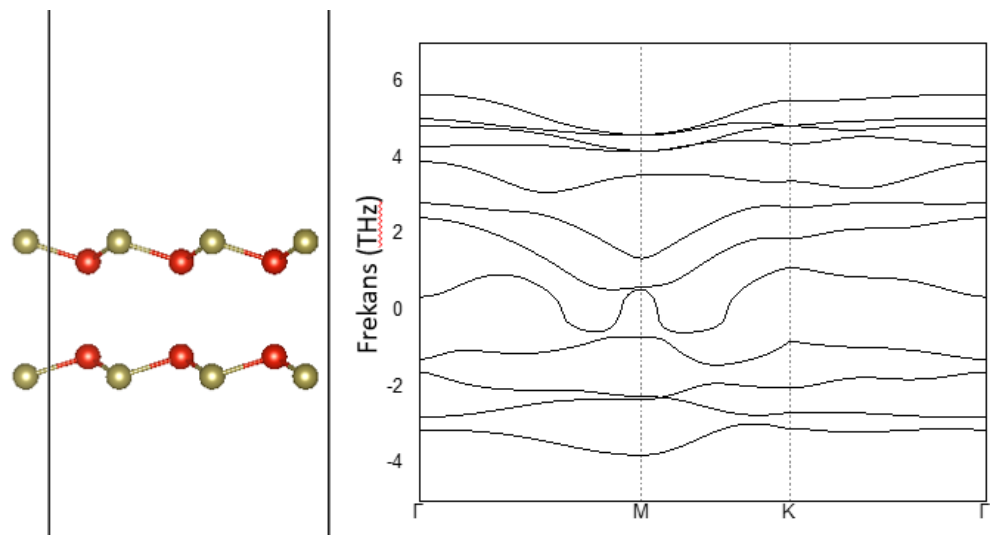
(h) V_2TeI



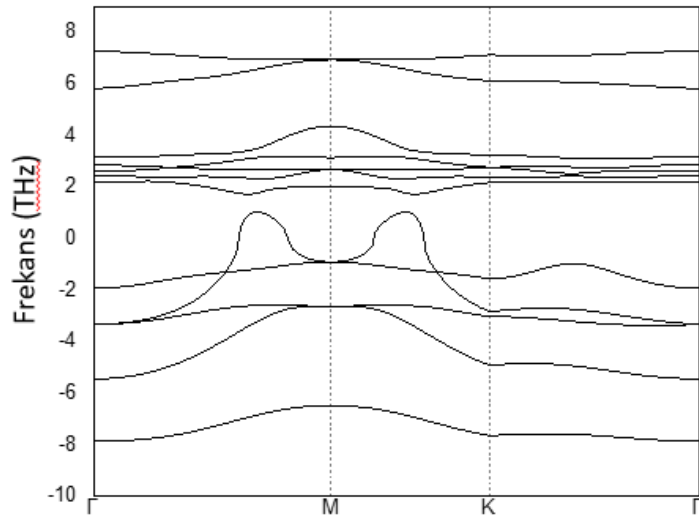
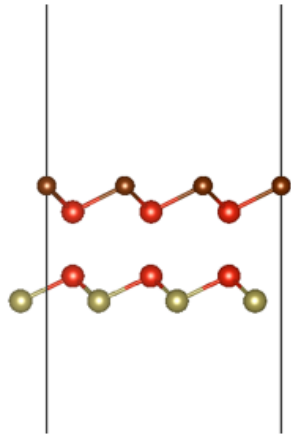
(i) V_2Se_2



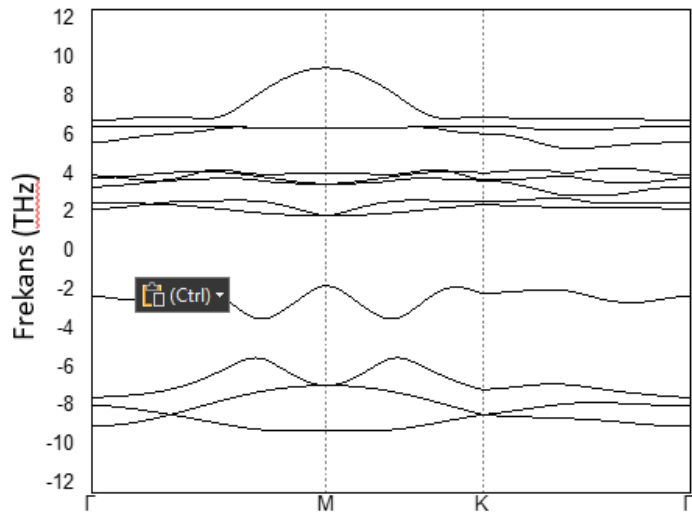
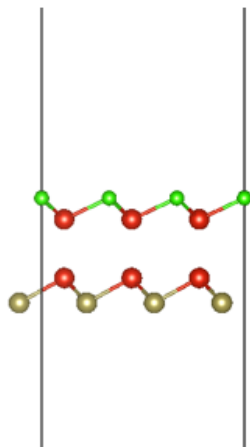
(i) V_2S_2



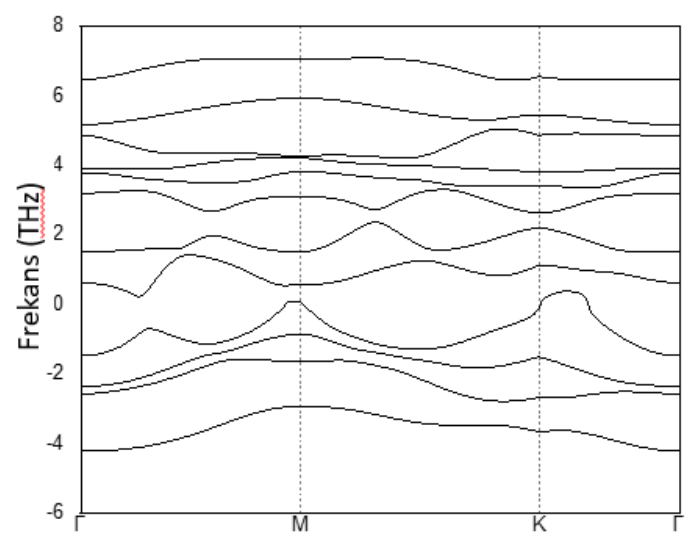
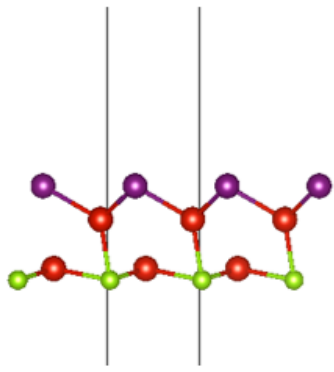
(j) V_2Te_2



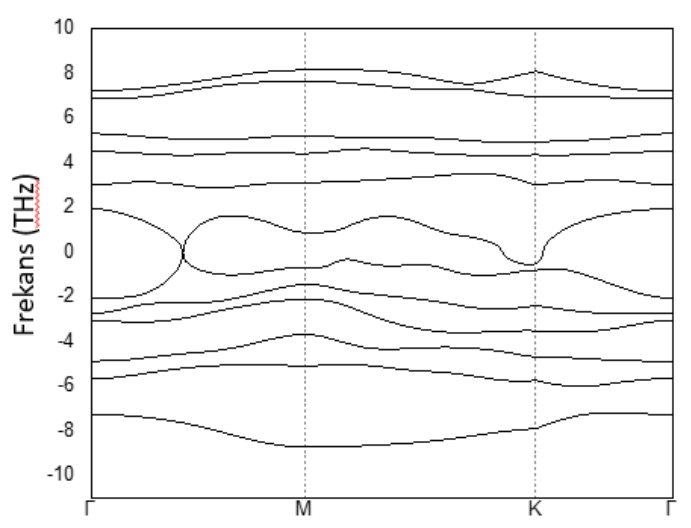
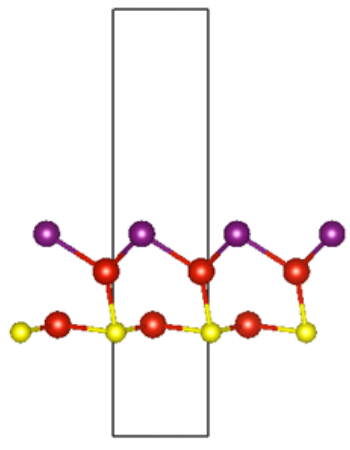
(k) V_2TeBr



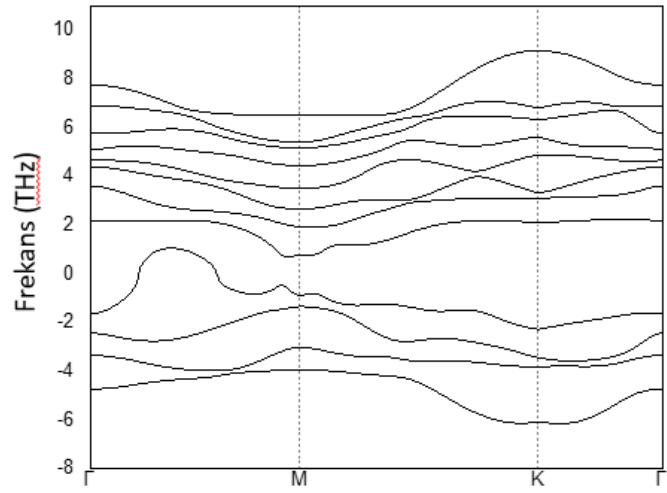
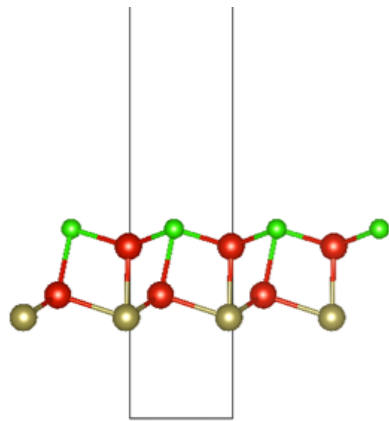
(l) V_2TeCl



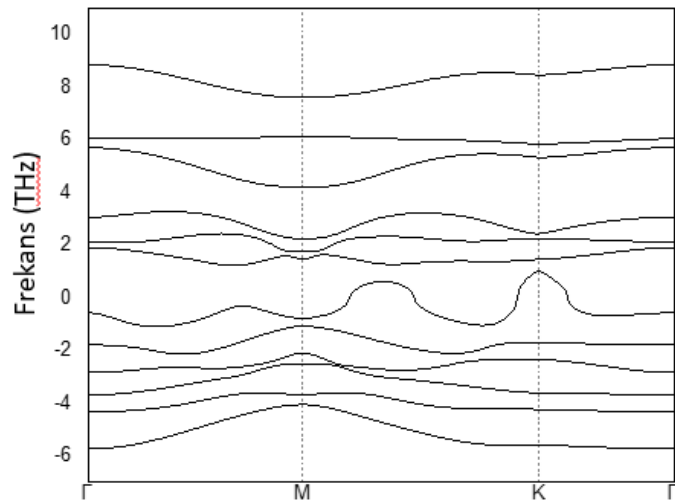
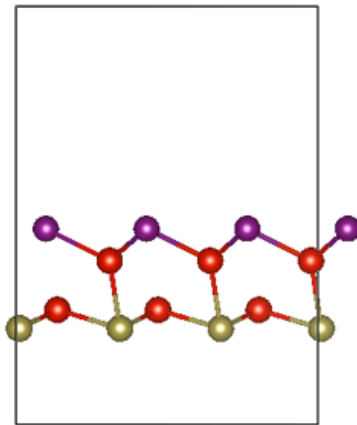
(m) V_2SeI



(n) V_2SI



(o) V_2TeCl



(ö) V_2TeI