

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**İKİ BOYUTLU GRUP IV KALKOJENLERDE ZORLANMA ETKİSİNİN
NÜMERİK OLARAK İNCELENMESİ**

Gözde ENEKÇİ

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

**ANKARA
2025**

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

İKİ BOYUTLU GRUP IV KALKOJENLERDE ZORLANMA ETKİSİNİN NÜMERİK OLARAK İNCELENMESİ

Gözde ENEKÇİ

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Yeşim MOĞULKOÇ

Tez kapsamında, Janus γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) tek katmanlarının çeşitli gerilme koşulları altında elektronik, optik ve mekanik özellikleri araştırılmıştır. Fonon spektrumları ve ab initio moleküler dinamik simülasyonları dinamik ve termal kararlılıklarını doğrularken, mekanik kararlılık Born kriteri ile desteklenmiştir. Bu tek katmanlı iki boyutlu malzemeler, Young modülü ve Poisson oranı gibi ayarlanabilir mekanik özellikler sergileyerek onları esnek uygulamalar için uygun hale getirmiştir. Elektronik yapı, benzersiz yük yoğunluğu davranışını gösteren Meksika şapkası şeklinde bir değerlik bandı ortaya koymuştur. Anizotropik deformasyon potansiyeli taşıyıcı hareketliliğini etkiler; γ -Si₂SSe ve γ -Si₂SeTe düşük etkin kütle ve artırılmış hareketlilik gösterirken, γ -Si₂STe daha yüksek etkin kütlesi ve deformasyon potansiyeli anizotropisi nedeniyle daha düşük hareketlilik sergilediği bulunmuştur. Bu bulgular, γ -Si₂XY tek katmanlarının çok işlevli doğasını vurgulamaktadır ve onları ileri teknolojik uygulamalar için umut verici adaylar haline getirmektedir.

Ocak 2025, 44 sayfa

Anahtar Kelimeler: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, İki Boyutlu Malzemeler, Elastiksel Özellikler, Elektronik Özellikler, Optik Özellikler

ABSTRACT

Master Thesis

NUMERICAL INVESTIGATION OF THE STRAINING EFFECT ON TWO-DIMENSIONAL GROUP IV CHALCOGENE

Gözde ENEKÇİ

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

Supervisor: Assoc. Prof. Yeşim MOĞULKOÇ

In this thesis, the electrical, optical and mechanical properties of Janus γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) monolayers were investigated under various stress conditions. Phonon spectra and ab initio molecular dynamics simulations confirm their dynamic and thermal stability, while mechanical stability is supported by the Born criterion. These monolayers exhibit tunable mechanical properties such as Young's modulus and Poisson's ratio, making them suitable for flexible applications. The electronic structure revealed a valence band in the shape of a Mexican hat, indicating the unique charge density behavior. The anisotropic deformation potential affects the carrier mobility; γ -Si₂SSe and γ -Si₂SeTe show low effective mass and enhanced mobility, while γ -Si₂STe is found to exhibit lower mobility due to its higher effective mass and deformation potential anisotropy. These findings highlight the multifunctional nature of γ -Si₂XY monolayers and make them promising candidates for advanced technological applications.

January 2025, 44 pages

Key Words: Density Functional Theory, Two Dimensional Materials, Elastical Properties, Electronic Properties, Optical Properties

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmamın gerçekleşmesinde, değerli bilgilerini benden esirgemeyen, kullandığı her kelimenin hayatıma kattığı önemini asla unutmayacağım, akademik hayatımda gelişmemi sağladığı kadar hayata dair de ufkumu açan yol göstericiliğinden dolayı saygıdeğer danışman hocam Doç. Dr. Yeşim Moğulkoç'a (Ankara Üniversitesi, Fizik Mühendisliği Bölümü), çalışmam boyunca bendenyardımlarını esirgemeyen Ankara Üniversitesi Yoğun Madde Fiziği Grubundan saygıdeğer hocam Dr. Yasin Zengin'e ve çalışma süresince tüm zorlukları benimle göğüsleyen ve hayatımın her evresinde bana destek olan değerli eşim, ailem ve kızıma sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Gözde ENEKÇİ
Ankara, Ocak 2025

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAYI	
ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR	iv
KISALTMALAR DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1.GİRİŞ	1
2.KURAMSAL TEMELLER.....	3
2.1 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi	3
2.2 İzdüşümle Güçlendirilmiş Dalga (Projector Augmented Wave) Yöntemi	5
2.3 Fonon Analizi Hesaplamaları	6
2.4 Ab-Initio Moleküler Dinamik (AIMD) Hesaplamaları	8
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	10
3.1 VESTA	10
3.2 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)	11
4.BULGULAR	14
4.1 γ -Si ₂ XY (X/Y = S, Se, Te) Tek Tabaka Yapıları.....	14
4.2 γ -Si ₂ XY Tek Katmanlarının Yapısal ve Mekanik Özellikleri.....	17
4.3 γ -Si ₂ XY (X/Y = S, Se, Te) Tek Tabaka 2B Malzemesinin Dinamiksel Kararlılık Sonuçları.....	22
4.4 Elektronik Özellikler	25
4.5 Dış Elektrik Alan ve Çift Eksenli Gerilimin Etkisi.....	29
4.6 Taşıyıcı Hareketliliği.....	32
4.7 Optik Özellikler	35
5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	40
KAYNAKLAR	42
ÖZGEÇMİŞ.....	44

KISALTMALAR DİZİNİ

AIMD	Ab-initio Moleküler Dinamik
BZ	Brillouin Bölgesi
YFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
DOS	Durumlar Yoğunluğu
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
MD	Moleküler Dinamik
PBE	Perdew-Burke-Ernzerhof
VASP	Vienna Ab-Initio Simulation Package
VESTA	Visualization for Electronic and Structural Analysis

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 4.1 γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe malzemelerinin üstten ve yandan görünümleri.	16
Şekil 4.2 γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe malzemelerinin fonon dispersiyonları.....	23
Şekil 4.3 γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe malzemelerinin 300K ve 600K sıcaklıklarda toplam enerjisindeki dalgalanmaları.	24
Şekil 4.4 γ -Si ₂ XY tek katmanlarının elektronik bant yapıları ve kısmi durum yoğunlukları (PDOS).....	27
Şekil 4.5 γ -Si ₂ XY tek katmanlarının HSE06 fonksiyoneli ile hesaplanmış elektronik bant yapısı.	28
Şekil 4.6 Çift eksenli gerilime maruz bırakılan 2B γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe tek katmanının polarizasyonundaki değişimleri.	29
Şekil 4.7 Çift eksenli gerilime maruz bırakılan γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe tek katmanının bant aralıklarındaki değişimleri.	30
Şekil 4.8 Harici elektrik alana maruz bırakılan 2B γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe tek katmanının bant aralıklarındaki değişimleri.	31
Şekil 4.9 γ -Si ₂ SSe, γ -Si ₂ STe ve γ -Si ₂ SeTe tek katmanının optik emilim spektrumları.	37

ÇİZELGELER DİZİNİ

- Çizelge 4.1 γ -Si₂XY tek katmanlısının hesaplanan algılama parametreleri (örgü sabiti a (Å), bağ uzunlukları d (Å), kalınlık h (Å), bağ açıları θ .) 17
- Çizelge 4.2 γ -Si₂XY tek katmanlısının hesaplanan algılama parametreleri (kohesif enerji E_{coh} (eV/atom), elastik sabitleri C_{ij} , Young modülü E_{2D} (N/m) ve Poisson oranı ν .)..... 19
- Çizelge 4.3 HSE06 ve PBE fonksiyonelleri kullanılarak γ -Si₂XY malzemeleri için hesaplanan algılama parametreleri: bant aralığı(PBE ve HSE06 fonksiyonelleri kullanılarak hesaplanan E_{gap} , X ve Y yüzeyleri için iş fonksiyonu Φ_1 , Φ_2 ve vakum seviyesi farkı $\Delta\Phi$).....26
- Çizelge 4.4 γ -Si₂XY tek katmanları için x ve y yönleri boyunca etkin kütle m^* (serbest elektron kütlesi m_0 cinsinden), elastik modül C_{2D} (Nm⁻¹), deformasyon potansiyeli (DP) sabiti E_d (eV) ve taşıyıcı mobilitesi μ (cm²V⁻¹s⁻¹) değerleri. 33

1. GİRİŞ

İki boyutlu malzeme çalışmaları grafenin 2004 yılındaki keşfi (Novoselov vd., 2004) ve 2010 yılında buluşun Nobel ödülü ile taçlandırılmasıyla modern nanoteknoloji çağı iki boyutlu malzemeler için başlamıştır. Böylece bilim insanları bu keşfin vermiş olduğu teşvik ile yeni nesil iki boyutlu (2B) malzemenin araştırılması ve geliştirilmesi için çalışmaya başlamışlardır. Bu malzemelerin özgün fiziksel ve kimyasal özellikleri, malzeme fiziğinde araştırma alanlarını genişletmiştir ve geleneksel endüstriyel malzemelerden daha üstün bir potansiyele sahip olmalarını sağlamıştır (Shanmugam vd. 2022).

Bilim insanlarının 2B katmanlı nanoyapılara olan ilgisini, bu malzemelerin benzersiz özellikleri ve nanoteknolojideki potansiyel uygulamaları nedeniyle giderek artırmaktadır. 2B kristaller, çeşitli polimorfik formlarda bulunabilir ve bu formlar oldukça farklı fiziksel özellikler sergileyebilir. Bu nedenle, yeni allotropların keşfi ve mevcut yapıların detaylı incelenmesi önem arz etmektedir. 2B kristallerin atomik yapısı, onların elektronik ve optik özelliklerini belirlemede kritik bir rol oynar ve grup IV monokalkojenler (S, Se, Te gibi elementlerle oluşturulan yapılar) bu bağlamda umut verici malzemeler olarak öne çıkmaktadır.

Son dönemde yapılan deneysel çalışmalar, yeni polimorfik yapıların yakın zamanda keşfedilmesi, 2B malzeme ailesini önemli ölçüde zenginleştirmiş ve hem temel araştırma hem de pratik uygulamalar için yeni fırsatlar ortaya çıkarmıştır. Bu bağlamda, germanyum selenit (GeSe) ve germanyum sülfür (GeS) gibi malzemelerin γ -fazı, benzersiz özellikleri nedeniyle önemli ölçüde ilgi görmüştür. Geleneksel α -fazlarından farklı olarak, γ -GeSe ve γ -GeS yapıları yalnızca enerjik olarak daha elverişli olmakla kalmayıp, aynı zamanda termoelektrik performansı önemli ölçüde artırma potansiyeline sahip belirgin elektronik bant yapıları da sergilemektedir. Meksika şapkası benzeri değerlik bantları gibi benzersiz elektronik özelliklerin varlığı, bu malzemelerin verimlilik ve performansın en önemli olduğu yeni nesil elektronik cihazların geliştirilmesinde önemli bir rol oynama olasılığını vurgular. Ayırt edici elektronik özellikleriyle öne çıkan bu malzemeler, çok çeşitli nanoteknolojik uygulamalarda

gelişmiş verimlilik ve performans için heyecan verici beklentiler sunar. Yeni özellikleri, malzeme özelliklerinin optimizasyonunun cihaz boyutunun küçültülmesi ve işlevselliğin iyileştirilmesi için gerekli olduğu enerji verimli elektronik, kuantum hesaplama ve optoelektronikteki ilerlemeleri hızlandırma potansiyeline sahiptir (Lee vd. 2021).

Bu bağlamda, bu tez çalışması, γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) tek tabakaların (monolayers) yapısal özelliklerini, elektronik özelliklerini ve yük dağılımlarını detaylı bir şekilde incelemeyi amaçlamaktadır. Tez çalışması, ilk ilkesel (ab-initio) yöntemlerini kullanarak, gerilme (strain) etkileri altında bu yapıların elektronik ve optik özelliklerinde meydana gelen değişiklikleri araştırmayı ve Janus yapıların potansiyel uygulamalarını değerlendirmeyi hedeflemektedir. Ayrıca, bu malzemelerin taşıyıcı hareketliliği, yüksek performanslı optoelektronik uygulamalar için uygunluklarını belirlemeyi amaçlamaktadır. Bu nedenle, bu araştırma, 2B malzemelerin özelliklerini anlama ve optimize etme yönündeki devam eden çabalara önemli bir katkı sunmakta olup, nihai hedef, bunların bir sonraki nesil nanoelektronik ve termoelektrik cihazlara entegrasyonunu kolaylaştırmaktır. Bununla birlikte, bu tez kapsamında yapılan araştırma sonuçlarının, 2B malzemelerin özelliklerini daha iyi anlamak ve yeni nesil nanoelektronik ve termoelektrik cihazlarda kullanılabilirliğini artırmak açısından önemli katkılarda bulunacağı ön görülmektedir.

2. KURAMSAL TEMELLER

İlk ilkesel hesaplamalar, malzeme bilimi, nanoteknoloji ve diğer birçok alanda kritik bir rol oynayan güçlü bir hesaplama yöntemidir. Bu hesaplamalar, malzeme ve moleküllerin özelliklerini anlamak, tahmin etmek ve optimize etmek amacıyla kullanılır. Kuantum mekaniğinin temel ilkelerine dayanan bu yöntem, deneysel verilere ihtiyaç duymaksızın, doğrudan temel fizik yasalarından çıkarımlar yapabilme yeteneği ile öne çıkar. Elektronik ve atomik yapılar, termodinamik, mekanik, optik ve manyetik özellikler ile yük taşınımı gibi geniş bir özellik yelpazesini tahmin etme kapasitesi, malzemelerin kapsamlı bir şekilde analiz edilmesine olanak tanır. Bu hesaplamalarda yaygın olarak kullanılan Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT), hesaplama doğruluğu ile maliyet arasında dengeli bir yaklaşım sunar. İlk ilkesel hesaplamalar, malzeme bilimi, kimya, yoğun madde fiziği ve nanobilim gibi alanlarda geniş uygulama alanlarına sahiptir ve malzemelerin atom düzeyindeki davranışlarını anlamada önemli bir araç sağlar. Her ne kadar bazı hesaplama maliyetleri ve zorluklar bulunsa da, bilim ve mühendislik alanlarında değerli öngörüler sunması nedeniyle vazgeçilmez bir yöntem olarak kabul edilir.

2.1 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT), çok cisim problemini çözmek için geliştirilmiş bir yaklaşımdır. Temel olarak, bir sistemdeki tüm elektronların karmaşık etkileşimlerini doğrudan çözmek yerine, sistemin toplam elektron yoğunluğunu temel alan bir fonksiyonel ile bu problemi ele alır. YFT, çok cisim kuantum mekaniğinin karmaşıklığını, elektron yoğunluğunu kullanarak daha yönetilebilir bir hale getirir ve böylece özellikle katı hâl fiziği ve kimyada geniş çapta uygulama alanı bulmaktadır (Jones 2015).

Elektronik hamiltoniyen, her çok parçacıklı sistemin, dış bir potansiyel içinde etkileşimde bulunan elektronlardan oluştuğunu varsayar. Kuantum istatistiksel modeller, örneğin Thomas-Fermi Teorisi, böyle bir sistemin analizinde dalga fonksiyonu yerine, merkezi değişken olarak elektron yoğunluğunu kullanmayı

önermiştir. Her ne kadar bu modeller gerçek sistemlerin doğru bir tanımını sağlamada yetersiz kalsa da, YFT aynı yaklaşımı benimseyen kapsamlı bir teori olarak ortaya çıkmış ve önemli başarılar elde etmiştir (Marder 2010).

Parçacıkların yoğunluğu, $n(\mathbf{r})$; N sayıda elektronun belirli bir \mathbf{r} konumunda olma olasılığının yoğunluğunu belirtmektedir. Bu, yoğunluk işlemcisi $\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_i^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 'nin beklenen değerinden elde edilir ve şu şekilde yazılır:

$$n(\mathbf{r}) = N \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3 \dots d^3\mathbf{r}_N \quad (2.1)$$

Yoğunluğun integrali, toplam elektron sayısını vermektedir; $\int n(\mathbf{r}) d^3r = N$ ve q yükü için elektron yoğunluğu ρ ile bağıntısı şu biçimdedir: $\rho(\mathbf{r}) = qn(\mathbf{r})$. Açıkça görüleceği üzere, yoğunluk diğer gözlemlenebilirler gibi dalga fonksiyonu tarafından belirlenir. Ayrıca, bu temel durum yoğunluğuna karşılık gelen enerji, minimum değerini alır ve bu da taban durum enerjisi olan Denklem (2.2)'ye karşılık gelmektedir:

$$E_0 = \int V_{dış}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + F[n(\mathbf{r})] \quad (2.2)$$

Elektron yoğunluğu $\rho(\mathbf{r})$, Kohn-Sham orbitallerinin karelerinin toplamıyla elde edilir:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.3)$$

Yoğunluk fonksiyonel teorisi, bir elektron sisteminin temel durum enerjisini, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak ifade eden bir kuantum mekaniği yaklaşımıdır. Bu teoriye göre, tüm sistemin özellikleri, yalnızca elektron yoğunluğuna bağlı olarak belirlenebilmektedir.

Kohn-Sham (Kohn ve Sham, 1965), YFT'deki temel problemi çözmek için, birçok elektronun etkileşimlerini hesaba katarken bile, bu sistemi etkileşimsiz referans sistemine dönüştüren bir yaklaşım geliştirdi. Bu yaklaşımla, birden fazla elektronun oluşturduğu karmaşık sistem, tek parçacıklı Kohn-Sham orbitalleriyle temsil

edilir. Kohn-Sham eşitlikleri, bu orbitalleri elde etmek için çözülen Schrödinger benzeri bir denklemi ifade eder:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{etkin}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Burada, $\phi_i(\mathbf{r})$ Kohn-Sham orbitalini, ϵ_i ise bu orbitalin enerjisini temsil eder. $V_{etkin}(\mathbf{r})$ etkin potansiyeli, dış potansiyel (çekirdeklerin oluşturduğu potansiyel), elektron-elektron etkileşimlerinden gelen Coulomb potansiyeli ve değiş-tokuş korelasyon potansiyelini içerir.

Kohn-Sham eşitlikleri, kendisi-tutarlı (self-consistence) bir şekilde çözülür. Yani, başlangıçta bir yoğunluk tahmin edilir, bu yoğunlukla etkin potansiyel hesaplanır ve ardından bu potansiyel kullanılarak yeni orbitaller ve yeni yoğunluk elde edilir. Bu işlem, yoğunluk ve enerji değişmez hale gelene kadar tekrarlanır.

2.2 İzdüşümle Güçlendirilmiş Dalga (Projector Augmented Wave) Yöntemi

İzdüşümle güçlendirilmiş dalga (PAW) yöntemi, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (YFT) çerçevesinde, sistemlerin elektronik yapılarını hassas ve verimli bir şekilde modellemek için geliştirilmiş bir tekniktir. Bu yöntem, özellikle karmaşık çok elektronlu sistemlerde, çekirdek bölgesindeki elektron yoğunluğunun ve dalga fonksiyonlarının doğru bir şekilde temsil edilmesini sağlar. PAW, düzlem dalga tabanlı yaklaşımların esnekliğini atomik orbitallerin yüksek çözünürlüğü ile birleştirerek, sistemin toplam enerji ve kuvvet hesaplamalarında yüksek doğruluk sunar. Özellikle, çekirdeğe yakın bölgelerdeki elektronların hızlı salınımlarını etkili bir şekilde modelleyebilmesi, bu yöntemin yoğunluk fonksiyonel teorisi hesaplamalarında tercih edilmesinin başlıca nedenidir.

Tez kapsamında, sistemin elektronik özelliklerini doğru bir şekilde temsil edebilmek için, elektron değiş-tokuş ve korelasyon etkilerini açıklayan Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) genel gradyan yaklaşımı (GGA) fonksiyoneli kullanılmıştır (Perdew vd., 1996). PBE, elektronik yoğunluğun gradyanlarını dikkate alarak, özellikle kimyasal bağlar,

yüzey enerjileri ve moleküler etkileşimlerin tahmininde dengeli bir hassasiyet sunar. Ancak, PBE fonksiyoneli ile elde edilen bant aralığı (band gap) değerlerinin deneysel sonuçlarla uyumsuz olabileceği bilinmektedir.

Bu eksikliği gidermek ve bant aralığı değerlerini deneysel verilere daha yakın hesaplayabilmek için yarı-empirik bir hibrit fonksiyonel olan Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) fonksiyoneli tercih edilmiştir (Heyd vd., 2003). HSE06 fonksiyoneli, değişim enerji teriminin bir kısmını Hartree-Fock teorisinden türeterek hesaplamalara dahil eder ve bu sayede, özellikle yarı iletkenler ve yalıtkanlarda enerji bant yapılarının daha doğru bir şekilde öngörülmesini sağlar. Bu yöntem, hem PBE'nin düşük hesaplama maliyet avantajlarını korurken hem de bant aralığı, enerji seviyeleri ve optoelektronik özelliklerin daha hassas bir şekilde tahmin edilmesine olanak tanır.

2.3 Fonon Analizi Hesaplamaları

Fonon hesaplamaları, malzemelerin dinamik ve termal özelliklerini incelemek için Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) çerçevesinde gerçekleştirilen temel bir yaklaşımdır. Fononlar, kristal yapılar içindeki atomların kolektif titreşim modlarını temsil eden kuantize durumlar olarak tanımlanır. Bu titreşim modları, malzemenin termodinamik ve dinamik kararlılığı hakkında önemli bilgiler sunar. Özellikle, fononların frekansları ve dağılımları malzemenin ses hızları, termal iletkenlik, termal kapasite gibi makroskopik özelliklerini doğrudan etkiler.

Fonon modları iki ana kategoriye ayrılır: **akustik modlar** ve **optik modlar**. Akustik modlar, düşük frekanslarda meydana gelir ve atomların birbirine göre uyumlu hareket ettiği titreşimleri ifade eder. Bu modlar, özellikle ses dalgalarının yayılımı ve malzemenin mekanik özellikleri açısından önemlidir. Optik modlar ise daha yüksek frekanslarda gözlenir ve genellikle birim hücredeki atomların birbirine zıt yönde hareket etmesiyle karakterize edilir. Bu modlar, optik absorpsiyon ve polaritondavranışları gibi optoelektronik özelliklerle ilişkilidir. Polariton, ışık ile maddenin etkileşimi sonucunda ortaya çıkan hibrit kuasipartikül türüdür. Bu etkileşim, bir fotonun (ışık parçacığı) bir malzemedeki madde uyarımlarıyla (örneğin, fononlar, eksitonlar veya plazmonlar)

güçlü bir şekilde bağlanmasıyla meydana gelir. Polaritonlar, hem ışığın dalga doğasını hem de maddenin kuantum mekaniksel özelliklerini bir arada sergileyen özel parçacıklardır (Hopfield 1958).

YFT kapsamında fonon hesaplamaları genellikle Yoğunluk Fonksiyoneli Pertürbasyon Teorisi (YFPT) kullanılarak gerçekleştirilir (Baroni vd., 2001). YFPT, kristal yapıdaki atomların küçük yer değiştirmelerinin toplam enerji üzerindeki etkilerini hesaba katarak fonon spektrumunu ve titreşim modlarını belirler. Bu yöntem, harmonik yaklaşımı temel alır ve fonon frekanslarının yanı sıra olası kararsızlık durumlarını tespit etmek için de kullanılır. Kristal yapıdaki herhangi bir negatif frekans, malzemenin dinamik olarak kararsız olduğunu ve yeniden yapılandırılması gerektiğini gösterebilir.

Fonon hesaplamaları aynı zamanda malzemenin sıcaklıkla değişen davranışlarının modellenmesi için de kritik bir öneme sahiptir. Örneğin, malzemenin ısı kapasitesi ve termal genişleme katsayısı gibi termal özellikleri tahmin edilebilir. Ayrıca, fonon-davranışı, malzemelerde ısı taşınımı ve enerji yayılımını kontrol eden temel mekanizmalardan biri olduğu için termal iletkenlik hesaplamalarında merkezi bir rol oynar.

Sonuç olarak, fononlar kristal yapıların termal, optik ve elektronik özelliklerini belirlemede kritik bir role sahiptir. YFT ve YFPT gibi teorik yaklaşımlar, malzemelerin bu özelliklerini anlamada ve geliştirmede güçlü araçlar sunmaktadır.

VASP, YFT tabanlı hesaplamalar için kullanılan bir yazılımdır ve fonon analizlerinde YFPT yöntemiyle dinamik matris hesaplamalarını destekler.

Fonon Hesaplamaları İçin Gerekli Dosyalar:

- **POSCAR:** Kristal yapının tanımı.
- **INCAR:** Hesaplama parametrelerinin detayları. (Örneğin, IBRION=5 veya IBRION=6 fonon hesaplamaları için kullanılır.)

- **POTCAR**: Pseudopotansiyel (potansiyelimsi) dosyası.
- **KPOINTS**: Brillouin bölgesinin örnekleme.

Hesaplama Adımları:

1. Geometrik optimizasyon (önce atomik konumların ve örgü parametrelerinin optimize edilmesi gerekir).
2. Dinamik matris hesaplaması (IBRION=6 ile) yapılır.
3. Fonon frekanslarının hesaplanması ve spektrumun elde edilmesi sağlanır.

Sonuçların Analizi: Tüm frekansların pozitif olması kararlı bir yapıyı ifade eder. İmajiner frekanslar (negatif) yapının kararsız olduğunu gösterir. Malzemenin elastik ve termal özelliklerini anlamada kullanılır. Bant yapısını çizmek için genellikle **Phonopy** veya benzeri araçlar kullanılır (Togo ve Tanaka, 2015).

2.4 Ab-Initio Moleküler Dinamik (AIMD) Hesaplamaları

Kanonik ensemble (NVT) altında ab-initio moleküler dinamik (AIMD) hesaplamaları, sabit atom sayısı (N), hacim (V) ve sıcaklık (T) koşullarında sistemin termodinamik davranışlarını incelemek için kullanılan güçlü bir yöntemdir. Bu yaklaşım, atomların ve elektronların hareketini birleştirerek kuantum mekaniği ilkeleri doğrultusunda fiziksel özelliklerin hesaplanmasını sağlar. AIMD, özellikle karmaşık malzeme sistemlerinin veya moleküler yapıların sıcaklık etkisi altındaki dinamiklerini ve enerji yüzeylerini anlamada önemli bir araçtır. Kanonik ensemble sayesinde, sıcaklık değişimlerinin sistem üzerindeki etkileri daha doğru bir şekilde modellenebilir. 2B tek tabaka yapıların oda sıcaklığındaki termodinamik kararlılığını değerlendirmek için kanonik ensemble (NVT) altında ab-initio moleküler dinamik (AIMD) hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. Kanonik ensemble (NVT ensemble), istatistiksel mekanikte kullanılan bir topluluktur ve sabit **atom/molekül sayısı** (N), **hacim** (V) ve **sıcaklık** (T) altında bir sistemin durumlarını tanımlar. Bu ensemble, bir sistemin bir ısı banyosuyla termal dengeye ulaştığı varsayımına dayanır (Pathria ve Beale, 2011).

Bu durumda, sistemin toplam enerjisi deęişebilir, ancak sıcaklık sabit tutulur. Kanonik ensemble'deki olasılık daęılımı, her mikro durumun (yani belirli bir enerji düzeyindeki durumun) **Boltzmann daęılımı** ile belirlenmesiyle ifade edilir:

$$P(E) \propto e^{-E/k_B T} \quad (2.5)$$

Burada:

- P(E): Enerji E'ye sahip durumun olasılığı,
- k_B : Boltzmann sabiti,
- T: Sıcaklık.

Kanonik ensemble, termodinamik sistemlerin sıcaklıkla ilişkili özelliklerini incelemek ve termodinamik niceliklerin (serbest enerji, entropi vb.) hesaplanması için yaygın olarak kullanılır. Özellikle, fizik ve kimyada sıcaklık etkilerini içeren simülasyonlarda temel bir çerçeve sunar (Hansen ve McDonald, 2006).

NVT, Nosé-Hoover termostatı gibi yöntemler yardımıyla sabit bir sıcaklık korunarak sistemin dinamik ve termal özelliklerini incelemeyi mümkün kılar (Nosé 1984). Bu yöntemle, tek tabaka yapıların yapısal bütünlüğünün zaman içinde nasıl korunduęu detaylı bir şekilde ortaya konmuştur.

AIMD, malzeme ve moleküllerin atomik özelliklerini zamanın bir fonksiyonu olarak modelleyerek, atomların hareketlerini simüle eden bir yöntemdir. Elektronik yapının kuantum mekaniksel ve atomik hareketlerin klasik mekaniksel yaklaşımlarla hesaplanması, bu yöntemin temelini oluşturur. AIMD, elektronların kuantum etkilerini de dikkate alarak malzemenin gerçek zamanlı davranışını simüle eder ve böylece termodinamik özelliklerden kimyasal reaksiyon kinetiğine kadar birçok konuda derinlemesine analizler sağlar. Özellikle, farklı sıcaklık ve basınç koşullarındaki davranışları anlamak ve yeni malzeme tasarımlarına ışık tutmak amacıyla kullanılan bu yöntem, moleküler seviyede önemli bir bilgi kaynağıdır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Tez çalışmalarında hesaplamaları yapılan sistemlere ait kristal yapıların kurulması VESTA programı ile yapılmıştır. Hesaplamalarda Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) paket programı kullanılmıştır.

3.1 VESTA

VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis), kristal yapıların görselleştirilmesi, analizi ve yorumlanması amacıyla kullanılan gelişmiş bir yazılımdır. Özellikle kristalografi, malzeme bilimi ve kimya gibi alanlarda geniş bir uygulama alanı bulmaktadır. Program, Japonya Tohoku Üniversitesi'nden Koichi Momma ve Fujio Izumi tarafından geliştirilmiştir (Momma ve Izumi, 2011).

VESTA'nın en belirgin özelliği, kristal yapıları üç boyutlu olarak görselleştirme yeteneğidir. Bu özellik, atomların, bağların ve kristal örgülerinin detaylı grafiksel gösterimini mümkün kılmakta, dolayısıyla kristal yapılarının anlaşılmasını ve yorumlanmasını kolaylaştırmaktadır. Program ayrıca, elektron yoğunluk haritalarını ve manyetik yoğunluk gibi diğer skalar alanları da görüntüleyebilmekte, bu yönüyle yapısal analizler için vazgeçilmez bir araç sunmaktadır.

VESTA'nın sunduğu simetri işlemleri, kristal yapıların simetrik özelliklerinin hesaplanmasını ve analiz edilmesini sağlamaktadır. Bu bağlamda, kristal yapıların simetri elemanları ve eşdeğer konumları detaylı bir şekilde incelenebilmektedir. Program, faz diyagramlarının ve birim hücre parametrelerinin görselleştirilmesine olanak tanıyarak, kristal yapıların faz geçişlerinin ve diğer termodinamik özelliklerinin araştırılmasında da önemli katkılar sunmaktadır.

VESTA, geniş dosya formatı desteği ile CIF (Crystallographic Information File) ve diğer yaygın kristalografi dosya formatlarını açabilmekte ve düzenleyebilmektedir. Bu yönüyle, farklı veri kaynakları ile entegrasyonu kolaylaştırmakta ve araştırmacılara esnek bir çalışma ortamı sunmaktadır.

VESTA, yapısal modeller, elektron/nükleer yoğunluklar ve üç boyutlu verilerin de görselleştirilmesi için kullanılan bir programdır. Öne çıkan özellikleri şunlardır:

- Aynı pencerede birden fazla model, veri ve morfoloji ile çalışma.
- Çoklu sekme ve pencere desteği.
- Büyük miktarda nesneyle (atom, bağ, çokyüzlü vb.) çalışma.
- Örgü dönüşümleri ve süper/hücre oluşturma.
- Rietveld analizinde bağ uzunlukları ve açıların görselleştirilmesi.
- Şeffaf yüzeyler ve yüksek çözünürlüklü grafik çıktıları.

Program, hacimsel veri işleme ve görselleştirmede güçlü araçlar sunar. Sonuç olarak, VESTA, açık kaynaklı ve kullanıcı dostu arayüzü sayesinde, araştırmacıların karmaşık kristal yapılarını etkin bir şekilde analiz etmelerine ve sonuçlarını net bir biçimde sunmalarına olanak tanıyan çok yönlü bir araçtır. Malzeme bilimi, kimya ve fizik gibi alanlarda kristal yapıların derinlemesine incelenmesi için yaygın olarak tercih edilmekte olup, bilimsel araştırmaların önemli bir bileşenini oluşturmaktadır (Momma ve Izumi, 2011).

3.2 VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) paket programı, ab-initio kuantum mekaniği tabanlı moleküler dinamik hesaplamaları yapmak için yaygın olarak kullanılan bir yazılımdır. Bu program, Vanderbilt potansiyelimsileri ve düzlem dalga baz setleri kullanarak nümerik hesaplamalar gerçekleştirir. VASP'ın temel yöntemi, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) olup, Kohn-Sham denklemlerini çözmek için tasarlanmıştır. Program, G. Kresse ve J. Furthmüller tarafından geliştirilmiş olup, J. Hafner'in katkılarıyla daha da ilerletilmiştir. VASP, hesaplamalarında potansiyelimsiler ve düzlem dalga baz setleri kullanır ve tüm hesaplamalar DFT yöntemi ile yapılır (Kresse ve Furthmüller, 1996). Elektronik bant yapı hesaplamalarında kısmi yoğunluk dosyası (DOS) yorumlarının daha iyi anlaşılabilmesi için yük yoğunluğu kontur eğrileri kullanılmıştır. Bu amaçla VASP yazılımı kullanılmıştır (Henkelman vd., 2006). VASP

paket programının çalışabilmesi için dört ana giriş dosyası gereklidir. Bu giriş dosyaları şunlardır:

1. INCAR: Bu dosya, hesaplama algoritmalarını belirler ve çeşitli hesaplama parametrelerini içerir. Örneğin, sistemin adı ve kesilim enerjisi değeri.
2. POSCAR: Kristal yapıyı tanımlar ve örgüye ait geometri ile sistemdeki atomların konumlarını içerir.
3. POTCAR: Sistem içerisindeki her bileşen için kullanılan potansiyelimsi (pseudo-potansiyel) dosyalarını barındırır. Her bir bileşene ait potansiyelimsiler bu dosya altında birleştirilir.
4. KPOINTS: Brillouin bölgesindeki k-noktalarının sayısını belirtir, bu da hesaplamaların doğruluğunu etkiler.

VASP programı çalıştırıldıktan sonra ortaya çıkan bazı önemli çıktı dosyaları ise şunlardır:

1. OUTCAR: Bu dosya, simülasyon boyunca elde edilen tüm önemli verileri içerir. Enerji, kuvvetler, gerilmeler, dalga fonksiyonlarının özdeğerleri, Fermi enerjisi ve iterasyon detayları gibi bilgileri sağlar. OUTCAR dosyası, simülasyonun her adımını ayrıntılı olarak raporlar ve sonuçların derinlemesine analizi için temel kaynaktır.
2. CONTCAR: Simülasyonun son adımında elde edilen atomik pozisyonları içeren dosyadır. Bu dosya, yapı optimizasyonu sonrasında elde edilen nihai kristal yapıyı temsil eder. CONTCAR, yeni bir simülasyonun başlangıç yapısı olarak kullanılabilir veya sonuçların doğruluğunu değerlendirmek için incelenir.
3. OSZICAR: Simülasyon sırasında enerji iterasyonlarının nasıl değiştiğini özetleyen bir dosyadır. Enerjinin yakınsama sürecini ve simülasyonun başarılı bir şekilde tamamlanıp

tamamlanmadığını gösterir. Bu dosya, enerji yakınsamasını izlemek ve simülasyonun ilerleyişini takip etmek için kullanılır.

4. CHGCAR:Elektron yoğunluğu dağılımını içeren dosyadır. Spin polarize sistemler için spin yukarı ve spin aşağı yoğunluklarını ayrı ayrı verir. Elektron yoğunluğu dağılımının görselleştirilmesi, elektronik özelliklerin ve bağ yapılarının incelenmesi için kullanılır.

5. EIGENVAL:Elektron dalga fonksiyonlarının özdeğerlerini içeren dosyadır. Bu dosya, enerji seviyeleri ve elektronik bant yapısını analiz etmek için kullanılır. Sistemlerin elektronik özelliklerini anlamada kritik rol oynar.

6. IBZKPT:İndirgenmiş Brillouin bölgesindeki k-noktalarını ve bu noktalar için hesaplanmış ağırlıkları içerir. K-uzayı entegrasyonları ve bant yapısı hesaplamalarında kullanılır.

7. DOSCAR:Elektronik yoğunluk durumu (Density of States, DOS) bilgilerini sunan dosyadır. Bu dosya, enerji seviyelerindeki elektronik durum yoğunluğunu sağlar ve sistemin elektronik yapısının analiz edilmesinde kullanılır.

8. PROCAR:Dalga fonksiyonlarının atomlara ve orbitallere projeksiyonlarını içerir. Bu, bant yapısı analizinde belirli bir banttaki atomik ve orbital katkıları anlamak için kullanılır.

9. WAVECAR:Simülasyon sırasında elde edilen dalga fonksiyonlarını içeren dosyadır. Bu dosya, bant yapısı ve elektronik özelliklerle ilgili daha ileri analizler yapmak için gereklidir.

4. BULGULAR

Tez çalışması kapsamında, γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) tek tabaka yapıların detaylı analizleri sunulmuştur. Çalışma, bu malzemelerin yapısal ve elektronik özelliklerinin yanı sıra yük dağılımlarının kapsamlı bir şekilde incelenmesini içermektedir. İlk ilkesel (ab-initio) hesaplama yöntemleri kullanılarak yürütülen araştırma, bu yapıların gerilme (strain) etkileri altında sergilediği elektronik ve optik davranışlarındaki değişiklikleri ayrıntılı bir şekilde ortaya koymaktadır. Ayrıca, Janus yapıların potansiyel uygulama alanları değerlendirilerek, 2B malzemelerin özelliklerinin anlaşılmasına ve bunların yeni nesil nanoelektronik ve termoelektrik cihazlarda kullanım potansiyellerinin artırılmasına katkı sağlanması hedeflenmiştir. Elde edilen bulguların, bu tür malzemelerin ileri düzeyde anlaşılması ve yenilikçi teknolojilerde kullanımına yönelik önemli bir bilgi birikimi oluşturacağı düşünülmektedir.

4.1 γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) Tek Tabaka Yapıları

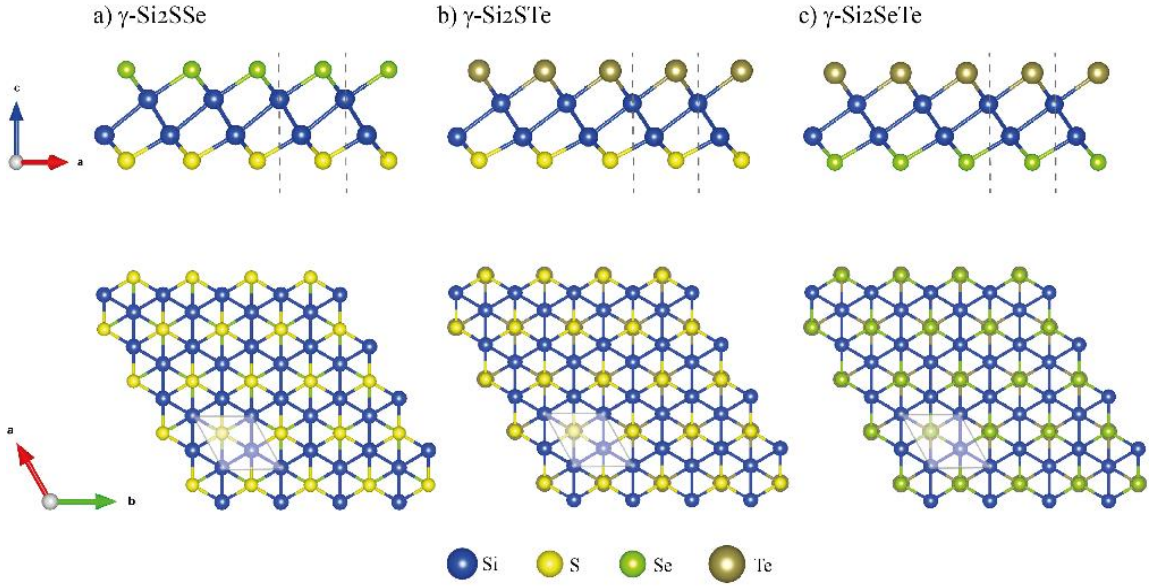
İki boyutlu Janus malzemeler, atomik düzeyde asimetric yapıları sayesinde farklı yüzeylerinden farklı elektronik özellikler sergileyen benzersiz malzemelerdir. Bu asimetric yapı, malzemenin üst ve alt yüzeylerinin farklı atom türlerinden oluşmasıyla ortaya çıkar ve çift yönlü elektronik davranışa yol açar. Janus malzemeler, bu farklı yüzey enerjileri ve kimyasal etkileşimler nedeniyle yüzey seçiciliği gösterir ve belirli kimyasal reaksiyonlara karşı yüksek yatkınlık sergileyebilir. Bu özellikleri, özellikle kataliz, sensörler ve enerji depolama gibi alanlarda potansiyel uygulamalar sunar (Seixas, 2020).

γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) tek tabaka yapıları, gama (γ) fazında yarıiletken özelliğe sahip iki boyutlu (2B) malzemelerdir. Bu malzemeler, Si (silisyum) atomları ile S, Se, Te (kükürt, selenyum, tellür) atomlarının kombinasyonlarından oluşur ve kendine özgü elektronik ve optik özelliklere sahiptir. Janus olarak adlandırılmaları, iki farklı atom katmanının bir yüzeyde birleşip diğer yüzeyde farklı atom katmanları oluşturmasıyla çift yüzlü davranış göstermelerindedir.

Seçilen 2B malzemelerin Si_2XY ($X/Y = \text{S, Se, Te}$) tek tabaka yapıları, γ fazında çalışılmıştır. Bunun aşağıda anlatıldığı üzere diğer fazlara kıyasla bazı avantajlı durumları mevcuttur. Bu avantajlar şu şekilde sıralanabilir:

- **Elektronik Özellikler:** γ fazı, daha düşük enerji kayıpları ve yüksek taşıyıcı hareketliliği sağlar, bu da nanoelektronik cihazlar için idealdir. α fazı genellikle daha iyi taşıyıcı hareketliliği sunsa da, γ fazı daha verimli taşıyıcı taşınımını sunar.
- **Optik Performans:** γ fazı, yüksek ışık emisyonu ve fotolüminesans özellikleri ile optoelektronik uygulamalar için daha uygundur.
- **Yapısal Esneklik:** γ fazı, gerilme (strain) altında daha dayanıklı ve esnek yapılar oluşturarak yüksek mekanik dayanıklılık sağlar, bu da onu esnek cihazlar için avantajlı kılar.
- **Farklı Fazlara Geçiş Aralığı:** γ fazı, yüksek sıcaklık ve basınç koşullarında daha kararlı olabilir, bu da onu zorlu çevresel koşullarda çalışan cihazlar için tercih edilen bir seçenek yapar.

Şekil 4.1'de $\gamma\text{-Si}_2\text{SSe}$, $\gamma\text{-Si}_2\text{STe}$ ve $\gamma\text{-Si}_2\text{SeTe}$ 2B malzemelerinin yandan ve üstten görünümü verilmiştir. Bu kristal yapılar, altıgen petek düzenini sergilemektedir ve birim hücrede dört atom yer almaktadır.



Şekil 4.1 γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin yandan ve üstten görünüşleri

Çizelge 4.1’de görüldüğü gibi γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin örgü sabitleri sırasıyla 3.53, 3.68 ve 3.76 Å’dur. Si ve kalkojen atomları olan S, Se ve Te arasındaki bağ uzunlukları S, Se ve Te atomlarının yarıçapıyla doğru orantılı olarak değişmektedir. En küçük atom yarıçapına sahip olan S atomu en küçük örgü sabitine (2.35 Å) sahip iken en büyük atom yarıçapına sahip olan Te atomu en büyük örgü sabitine (2.65Å) sahiptir. Benzer doğru orantıtek katmanların kalınlıkları için de geçerlidir. Çizelge 4.1’de γ -Si₂XYtek katmanlarının kalınlıklarının 4.17 Å ile 4.36 Å arasında değiştiği ve en küçük kalınlığın γ -Si₂SSe malzemesinde olduğu en büyük kalınlığın ise γ -Si₂SeTe malzemesinde olduğu görülür. Bileşikteki elementlerin atom yarıçapları, γ -Si₂XYtek katmanının kalınlığında, örgü sabitlerinde ve bağ uzunluklarında gözlemlenen değişimlere benzer şekilde değişimlere neden olur.

Çizelge 4.1 γ -Si₂XY tek katmanlısının hesaplanan algılama parametreleri (örgü sabiti a (Å), bağ uzunlukları d (Å), kalınlık h (Å), bağ açıları θ)

<i>Malzeme</i>	<i>a</i>	<i>d_{Si-X}</i>	<i>d_{Si-Y}</i>	<i>h</i>	<i>θ_{X-Si-X}</i>	<i>θ_{Y-Si-Y}</i>	<i>$\theta_{Si-Si-Si}$</i>
γ -Si ₂ SSe	3.53	2.35	2.44	4.17	97.44	92.46	84.63
γ -Si ₂ STe	3.68	2.40	2.63	4.26	100.30	88.51	87.51
γ -Si ₂ SeTe	3.76	2.52	2.65	4.36	96.58	89.42	89.42

Çizelge 4.1’de görüldüğü gibi γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin örgü sabitleri sırasıyla 3.53, 3.68 ve 3.76 Å’dur. Si ve kalkojen atomları olan S, Se ve Te arasındaki bağ uzunlukları S, Se ve Te atomlarının yarıçapıyla doğru orantılı olarak değişmektedir. En küçük atom yarıçapına sahip olan S atomu en küçük örgü sabitine (2.35 Å) sahip iken en büyük atom yarıçapına sahip olan Te atomu en büyük örgü sabitine (2.65Å) sahiptir. Benzer doğru orantı tek katmanların kalınlıkları için de geçerlidir. Çizelge 4.1’de γ -Si₂XY tek katmanlarının kalınlıklarının 4.17 Å ile 4.36 Å arasında değiştiği ve en küçük kalınlığın γ -Si₂SSe malzemesinde olduğu en büyük kalınlığın ise γ -Si₂SeTe malzemesinde olduğu görülür. Bileşikteki elementlerin atom yarıçapları, γ -Si₂XY tek katmanının kalınlığında, örgü sabitlerinde ve bağ uzunluklarında gözlemlenen değişimlere benzer şekilde değişimlere neden olur.

4.2 γ -Si₂XY Tek Katmanlarının Yapısal ve Mekanik Özellikleri

Malzemelerin kristal yapılarının geometrik özellikleri, kimyasal bileşimlerine bağlı olarak önemli farklılıklar gösterebilmektedir. Bu farklılıklar, atomların boyutları ve bağlanma özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Özellikle örgü sabitleri, bağ uzunlukları ve katman kalınlıkları gibi parametreler, bileşimdeki elementlerin atom yarıçaplarıyla doğrudan ilişkilidir. Tez kapsamındaki γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin örgü sabitleri sırasıyla 3.53, 3.68 ve 3.76 Å’dır. Bu değerler, önceki araştırmalardan elde edilen bulgularla yakından örtüşmektedir (Hiep vd., 2023; Zhu vd., 2024). Si ve kalkojen atomları (S, Se ve Te) arasındaki bağ uzunluğu, kalkojenin atom yarıçapıyla orantılı olarak artar ve S için 2.35 Å’dan (en küçük yarıçap) Te için 2.65 Å’ya kadar değişir (en büyük yarıçap). Benzer bir durum, tek katmanların kalınlıkları

için de geçerlidir. Çizelge 4.1'e göre, γ -Si₂XY tek katmanının kalınlığının 4.17 Å ile 4.36 Å arasında değiştiğini göstermektedir. Bileşikteki elementlerin atom yarıçapları, γ -Si₂XY tek katmanının kalınlığında, örgü sabitlerinde ve bağ uzunluklarında gözlemlenen değişimlere benzer değişimlere neden olur.

Malzemelerin yapısal kararlılığını değerlendirmek, onların fiziksel, kimyasal ve elektronik özelliklerini anlamak ve potansiyel uygulama alanlarını belirlemek açısından kritik bir öneme sahiptir. Yapısal kararlılığın belirlenmesi, atomlar arasındaki bağlanma enerjilerinin detaylı analizi ile mümkündür. Bu bağlamda, bir malzemenin kohesif enerjisi, atomlar arasındaki bağlanma kuvvetinin bir ölçüsü olarak kararlılığın en temel göstergelerinden biri olarak kabul edilir. Kohesif enerji, malzemenin birim hücresindeki atomların ayrıştırılması için gerekli enerji miktarını ifade eder ve yüksek bir kohesif enerji, malzemenin yapısal olarak daha kararlı olduğunu gösterir.

γ -Si₂XY malzemesinin yapısal kararlılığını değerlendirmek için kohesif enerjileri hesaplanmıştır. Kohesif enerji (E_{coh}), kristal örgüdeki atomları izole edilmiş serbest atomlara dönüştürmek için gereken enerjiyi ifade eder (Zhang, 2018). Kohesif enerji, bir kristal yapıdaki atomlar arasındaki bağlanma enerjisinin bir ölçüsü olup, aşağıdaki denklem kullanılarak hesaplanmaktadır:

$$E_{coh} = \frac{E_{toplam} - (N_{Si}E_{Si} + N_X E_X + N_Y E_Y)}{N_{Si} + N_X + N_Y} \quad (4.1)$$

E_{toplam} γ -Si₂XY tabakasının toplam enerjisini temsil ederken, E_{Si} , E_X ve E_Y sırasıyla Si, X ve Y atomlarının enerjilerini ifade etmektedir. N_{Si} , N_X ve N_Y ise birim hücre içinde bulunan Si, X ve Y atomlarının sayısını belirtir.

Denklem 4.1 kullanılarak hesaplanan γ -Si₂XY tek katmanlarının kohesif enerjileri, Çizelge 4.2'de gösterildiği gibi negatiftir ve bu durum, incelenen malzemelerin termodinamik olarak kararlı bir yapıya sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Kohesif enerjinin negatif olması, atomlar arasındaki bağlanmanın güçlü olduğunu ve malzemenin kendiliğinden ayrılmaya karşı direnç gösterdiğini ifade etmektedir. Bu

sonuç γ -Si₂XY tek katmanlarının hem deneysel hem de teorik çalışmalar için uygun ve kararlı bir yapı sergilediğine işaret etmektedir.

Çizelge 4.2 γ -Si₂XY tek katmanlı 2B malzemelerinin hesaplanan kohesif enerji ve elastik parametreleri (kohesif enerji E_{coh} (eV/atom), elastik sabitleri C_{ij} (GPa), Young modülü E_{2D} (N/m) ve Poisson oranı ν .)

<i>Malzeme</i>	E_{coh}	C_{11}	C_{12}	C_{66}	E_{2D}	ν
γ -Si ₂ SSe	-4.07	21.70	6.60	7.55	12.29	0.69
γ -Si ₂ STe	-3.84	15.85	4.22	5.82	9.05	0.60
γ -Si ₂ SeTe	-3.73	15.05	3.54	5.76	8.87	0.55

γ -Si₂XY tek katmanlarının kohesif enerjilerindeki artış, gelişmiş molekül içi bağlanmayı işaret etmektedir. -4.07 eV/atom kohesif enerjiye sahip γ -Si₂SSe tek katmanının moleküller arası bağları, sırasıyla-3.73 ve -3.84 eV/atom kohesif enerjilere sahip γ -Si₂SeTe ve γ -Si₂STe tek katmanlarının bağlarından daha güçlüdür. Ayrıca, kohesif enerji, hem örgü sabiti hem de malzemenin kalınlığı ile doğrudan ilişkilidir. Bu bağlamda, atom hacmindeki bir artış, örgü sabiti ve malzeme kalınlığında buna karşılık gelen bir artışa neden olur ve bu da kohesif enerjide bir azalmaya yol açar.

Malzemelerin mekanik özellikleri, yapısal kararlılıkları ve performanslarının değerlendirilmesinde temel bir rol oynar. Bu bağlamda, elastik sabitler, malzemenin dış kuvvetlere karşı verdiği tepkiyi tanımlayarak, mekanik özelliklerin detaylı bir şekilde anlaşılmasını sağlar. İncelenen yapıların mekanik özelliklerini daha ayrıntılı bir şekilde analiz etmek için, Young modülü E_{2D} ve Poisson oranı ν , elastik sabitler C_{ij} kullanılarak aşağıda verilen formül yardımıyla hesaplanmıştır:

$$E_{2D} = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{AC_{11} + BC_{22} - A^2B^2(2C_{12} - \Pi)} \quad (4.2)$$

$$v = \frac{(A^2 + B^2)C_{12} - A^2B^2(2C_{12} - \Pi)}{A^4C_{11} + B^4C_{22} - A^2B^2(2C_{12} - \Pi)} \quad (4.3)$$

$A = \sin(\theta)$ ve $(B = \cos(\theta))$ olarak tanımlanmıştır. Burada θ , armchair yönüne göre açığı ifade etmektedir. Π ise $(C_{11}C_{22} - C_{12}) / C_{16}$ denklemini ifade etmektedir.

Elastik sertlik sabitleri, bir malzemenin mekanik özelliklerini anlamak için kritik öneme sahiptir; çünkü bu sabitler, malzemenin dış kuvvetlere nasıl tepki verdiğini tanımlar. Bu sabitler, malzemeye küçük eksene bağlı gerilmeler uygulanması sonucu enerji değişimleri analiz edilerek hesaplanmaktadır. Bu yöntem, malzemenin deformasyona karşı direnci ve esnekliği gibi önemli mekanik özelliklerin değerlendirilmesine olanak sağlar.

Bu kapsamda, γ -Si₂XY tek katmanının mekanik özelliklerini ve elastik kararlılığını değerlendirmek için elastik sabitler C_{ij} hesaplanmıştır. Hesaplamalar, malzemeye -1.5% ile 1.5% arasında değişen ve 0.5% adımlarla artan gerilme artışları uygulanarak gerçekleştirilmiştir. Uygulanan dış kuvvet altında atomların daha düşük enerjili bir konfigürasyona ulaşmalarını sağlayan optimize edilmiş iyon katsayıları da belirlenmiştir.

2D malzemelerde dört elastik katsayı bulunmaktadır. Bunlar C_{11} , C_{22} , C_{12} ve C_{66} dır. γ -Si₂XY'nin hegzagonal yapısı nedeniyle C_{11} ve C_{22} değerleri birbirine eşittir. Ayrıca, C_{66} değeri C_{11} ve C_{22} değerlerine bağlı olarak hesaplanabildiğinden C_{11} ve C_{22} sabitlerinin belirlenmesi yeterlidir (Duerloo vd., 2012).

Çizelge 4.2'de sunulan elastik sabitlerinin $C_{11} > 0$, $C_{11} > C_{12}$ ve $C_{66} > 0$ kriterlerini sağladığı görülmektedir. Bu sebeple, γ -Si₂XY tek katmanının elastik kararlılığa sahip olduğu söylenebilir. Bu kararlılık, malzemenin dış gerilmeler altında yapısını koruma yeteneğini ifade eden önemli bir mekanik özelliktir. Bu kriterler, malzemenin hem gerilme hem de kayma kuvvetlerine karşı direncini ortaya koymaktadır. Özellikle, $C_{11} > 0$ koşulu, malzemenin eksensel yöndeki gerilmelere karşı dirençli olduğunu ifade ederken, $C_{11} > C_{12}$ koşulu, malzemenin elastik anizotropisini ve deformasyon

sürecindeki denge koşullarını sağlamaktadır. Ayrıca, $C_{66} > 0$ şartı, kayma modüllerinin pozitif olduğunu ve malzemenin kayma gerilmelerine karşı kararlı bir yapı sergilediğini göstermektedir.

Bu sonuçlar, γ -Si₂XY tek katmanının hegzagonal yapısal düzenine uygun elastik kararlılık kriterlerini sağladığını kanıtlamaktadır. Malzemenin elastik modüllerinin pozitif olması, dış kuvvetler altında mekanik dayanıklılığını ve yapısal bütünlüğünü koruyabileceğini göstermektedir. Bu özellikler, malzemenin pratik uygulamalarda kullanılabilirliği açısından büyük önem taşımaktadır (Born ve Huang, 1996; Mouhat ve Coudert, 2014).

İki boyutlu malzemelerin mekanik özelliklerini anlamak, bu malzemelerin uygulamalı kullanımını değerlendirebilmek için oldukça önemlidir. Bu bağlamda, **Young modülü (E_{2D})**, malzemenin sertlik ve elastikiyet özelliklerini tanımlayan temel bir parametre olarak öne çıkar. Çizelge 4.2’de sunulan E_{2D} değerleri, analiz edilen malzemelerin mekanik özelliklerine dair önemli bilgiler sunmaktadır. Yüksek E_{2D} değeri, malzemenin daha sert bir yapıya sahip olduğunu ve gerilmeye maruz kaldığında elastik deformasyona karşı daha fazla direnç gösterdiğini ifade eder. Bu özellik, malzemenin çekme kuvvetlerine karşı minimum deformasyon göstererek uygulanan kuvvet kaldırıldığında orijinal şekline geri dönmesini sağlar. Yüksek E_{2D} değerine sahip malzemeler, daha dayanıklı ve sağlamdır, bu da onları mühendislik ve nanoteknoloji uygulamaları için ideal hale getirir.

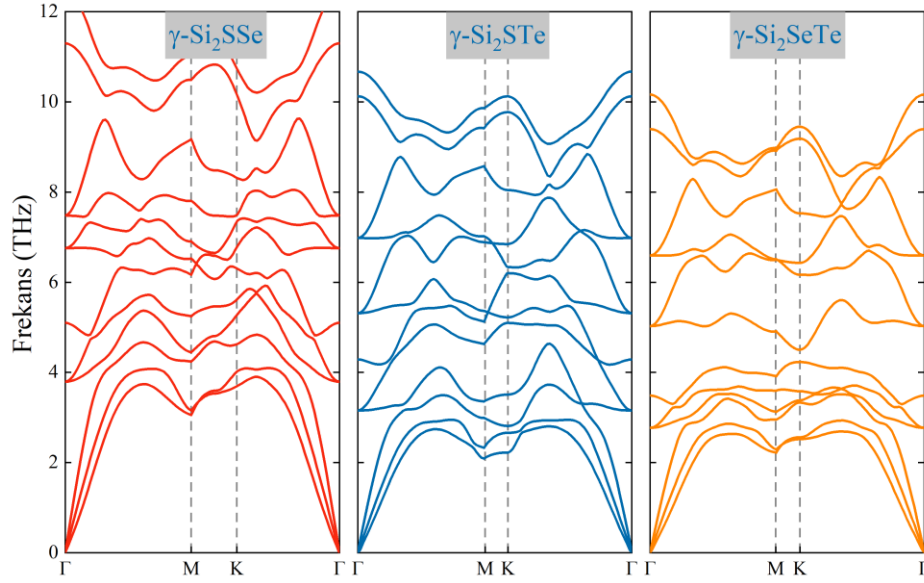
Bu bağlamda, γ -Si₂SSe tek katmanı, 12.16 N/m ile en yüksek E_{2D}değerini sergileyerek bükülmeye karşı daha dirençli bir yapı ortaya koymaktadır. Buna karşılık, γ -Si₂SeTe (9.85 N/m) ve γ -Si₂STe (8.87 N/m) tek katmanları, daha esnek bir yapıya sahiptir. Ayrıca, γ -Si₂XY tek katmanlarının E_{2D}değerleri, MoS₂(Cooper vd., 2013) ve grafen (Xiang vd., 2020) gibi malzemelere kıyasla belirgin şekilde daha düşüktür. Bu fark, γ -Si₂XY tek katmanlarını esneklik gerektiren ekranlar, giyilebilir teknolojiler ve nanotüpler gibi uygulamalar için uygun bir aday haline getirmektedir.

4.3 γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) Tek Tabaka 2B Malzemesinin Dinamik Kararlılık Sonuçları

Tezin bu bölümünde, γ -Si₂XY malzemelerinin fonon ve moleküler dinamik (MD) simülasyonlarının sonuçları sunulmaktadır. Fonon hesaplamaları, malzemenin titreşimsel özelliklerini ve örgü dinamiğini incelememize olanak tanırken, MD simülasyonları malzemenin atomik düzeydeki hareketleri ve termal davranışlarını detaylı bir şekilde analiz eder. Her iki yöntem de, malzemenin termal, mekanik ve elektronik özelliklerinin daha iyi anlaşılmasına katkıda bulunarak, potansiyel uygulama alanları hakkında değerli bilgiler sağlamaktadır.

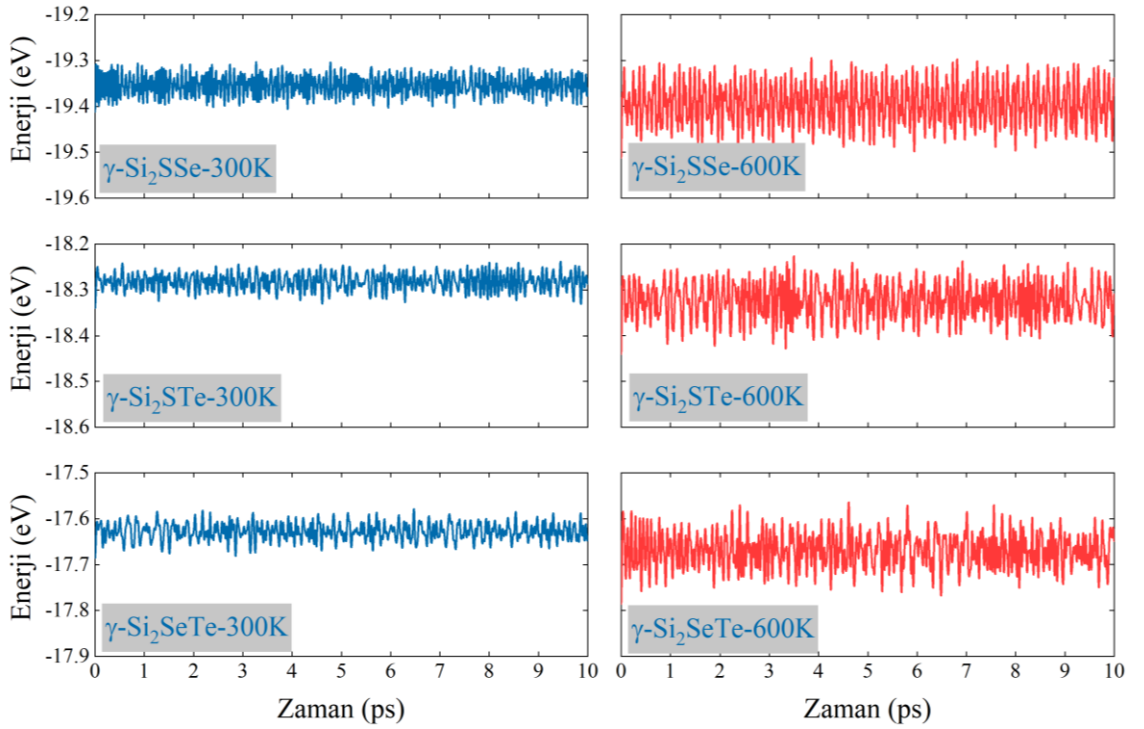
Fonon spektrumları, γ -Si₂XY malzemesinin titreşim özelliklerini belirlemek ve dinamik kararlılığını incelemek amacıyla hesaplanır. Akustik modlar, malzemelerin mekanik dayanıklılığı ve elastik özellikleriyle içsel olarak bağlantılıdır. Düşük frekanslı akustik modlar genellikle malzemenin elastik özelliklerini ve mekanik bütünlüğünü gösterir. Akustik modların seyrek görülmesi, malzeme içindeki atomların örgü yapısında senkronize olarak salındığını, bunun da örgünün bu hareketlere karşı direncinin azalmasına ve malzemenin düşük titreşim enerjisine neden olduğunu gösterir. Şekil 4.2'de, γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin fonon bant yapılarını göstermektedir.

γ -Si₂SSe malzemesinin frekans spektrumu, 0 ila 12 THz arasında bir aralıkta genişlemektedir. Bu, γ -Si₂STe (yaklaşık 0-11 THz) ve γ -Si₂SeTe (yaklaşık 0-10 THz) malzemelerine kıyasla daha geniş bir dağılım gösterdiğini ortaya koymaktadır. Bu farkın başlıca nedeni, Se ve Te atomlarının kütlelerinin S atomlarından daha büyük olmasıdır. Bu da malzemenin titreşimsel özelliklerini etkileyerek daha geniş bir frekans aralığının ortaya çıkmasına yol açtığı söylenebilir.



Şekil 4.2 γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin fonon dispersiyonları

Ayrıca, düşük akustik modlar, elastik sabitlerin ve Young modülünün düşüşünü gösterebilir. Şekil 4.1, γ -Si₂SeTe malzemesinin azalan akustik modlarını sergilemektedir. Bu durum, Tablo 1’de sunulan γ -Si₂SeTe malzemesinin düşük elastik sabiti ve Young modülü değerleri ile uyumludur. Öte yandan, γ -Si₂SSe ve γ -Si₂STe malzemelerinde düşük frekanslı optik ve akustik titreşimler arasında belirgin bir farklılık gözlenmemektedir. Bu durum, γ -Si₂SSe ve γ -Si₂STe yapılarının önemli derecede akustik-optik saçılmaya maruz kalacağı ve bunun da termal iletkenlikte bir azalmaya yol açabileceği sonucunu doğurur. Ancak, γ -Si₂SeTe malzemesinde optik ve akustik modlar arasında bir boşluk bulunur ve bu durum, fonon etkileşimlerini ve enerji dağılımı olasılığını azaltır. Fononlar, uzun mesafelerde serbestçe hareket edebildiğinde, γ -Si₂SeTe malzemesinin ısı taşıma verimliliği artar ve bu da termal iletkenliğin yükselmesine katkıda bulunur. Son olarak, yapılan simülasyon sonuçları, incelenen γ -Si₂XY tek katmanlarının Brillouin bölgesi (BZ) üzerindeki fonon dağılım hesaplamalarında negatif frekansların görülmediğini göstermektedir. Bu bulgu, bu malzemelerin dinamik olarak kararlı olduğunu, özellikle titreşim kararlılığına ve atomik yer değiştirmelere karşı direnç gösterdiğini ortaya koymaktadır. Şekil 4.3’te, γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin 300K ve 600K sıcaklıklarındaki moleküler dinamik sonuçlarını göstermektedir.



Şekil 4.3 γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinin 300K ve 600K sıcaklıklarda toplam enerjisindeki dalgalanmaları

Şekil 4.2, 300 K ve 600 K sıcaklıklarında gerçekleştirilen AIMD hesaplamalarını göstermektedir. Her iki sıcaklıkta da enerji dalgalanmalarının ihmal edilebilir seviyede olduğu ve γ -Si₂XY tek katmanların termal olarak kararlı olduğu gözlemlenmiştir. İncelenen tek katmanların toplam enerji dalgalanmalarının 300 K'de 10 ps boyunca yaklaşık 0.1 eV civarında olduğu, 600 K'de ise bu değer 0.2 eV'ye çıktığı tespit edilmiştir. Her iki durumda da atomik yapıda ve bağlarda herhangi bir bozulma görülmemiş, yapısal fazda bir değişim gözlenmemiştir. Bu durum, γ -Si₂XY tek katmanların yüksek sıcaklıklarda bile kararlı yapısını koruyabildiğini ve potansiyel uygulamalar için termal dayanıklılık gösterdiğini ortaya koymaktadır. Böylece, bu malzemeler yüksek sıcaklık koşullarında dahi kararlılıklarını sürdürme potansiyeline sahiptir, bu da onları elektronik ve optoelektronik cihazlar için umut verici kılmaktadır. Bu bulgular, incelenen yapının termodinamik kararlılığını ve atomik bağların sıcaklık artışına karşı direnç gösterdiğini teyit eder.

4.4 Elektronik Özellikler

İki boyutlu malzemelerin elektronik yapılarını anlamak, bu malzemelerin elektronik cihazlarda kullanım potansiyelini değerlendirmek açısından büyük önem taşımaktadır. Ayrıca iki boyutlu malzemelerin bant yapısı ve kısmi yoğunluk durumu (PDOS) analizleri, onların elektronik özelliklerine dair önemli bilgiler sunmaktadır. Bu bağlamda, γ -Si₂XY tek katmanlarının elektronik bant yapısı ve PDOS hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. γ -Si₂XY, diğer iki boyutlu malzemelerden farklı olarak olağanüstü özelliklere sahiptir. Şekil 4.4'te γ -Si₂XY malzemelerinde “Meksika şapkası” benzeri bir bant yapısı görüldüğü gösterilmektedir. Bu yapı, elektron yoğunluğu ve etkileşimler açısından farklı dinamikleri ortaya koymaktadır. Bu tür malzemeler, ilgi çekici elektronik özelliklere sahiptir ve bu durum onları elektronik ve optoelektronik uygulamalar için benzersiz ve cazip kılmaktadır.

Ayrıca, Şekil 4.4 γ -Si₂XY tek katmanlarının dolaylı bir bant aralığına sahip yarı iletkenler olarak davrandığını göstermektedir. Meksika şapkası benzeri bu dağılım nedeniyle, değerlik bandı (VB) bölgesinde iki nokta arasında minimal enerji farkı bulunurken, iletim bandı (CB) minimum noktası bu durumdan etkilenmez. Bu iki noktadan enerji değeri daha yüksek olan, değerlik bandı maksimumu (VBM) noktasını K₁ ifade etmektedir. Bu durum, iletim bandı minimumu (CBM) açısından malzemelere göre farklılık göstermektedir. CBM, γ -Si₂SSe ve γ -Si₂STe malzemeleri için M₁ noktasında, γ -Si₂SeTe için ise K₂ noktasında yer almaktadır. Sonuç olarak, γ -Si₂STe, γ -Si₂SSe ve γ -Si₂SeTe 2B malzemeleri yarıiletken özellik sergilemektedir.

Şekil 4.5 ve Çizelge 4.3'te görüldüğü gibi HSE06 fonksiyoneli kullanılarak hesaplanan elektronik bant dağılımları, PBE fonksiyoneli ile karşılaştırılabilir bir dağılım sergilemektedir. Yarı iletken özelliklere sahip malzemelerde, bant aralığı enerjilerinin hesaplanmasında HSE06 fonksiyoneli daha doğru sonuçlar vermektedir.

Çizelge 4.3'te sunulan bant aralığı enerji verileri, HSE06 fonksiyonelinin γ -Si₂SSe için PBE fonksiyoneline kıyasla daha düşük bir bant aralığı enerjisi sağladığını göstermektedir. Buna karşılık, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe için HSE06 fonksiyoneliyle

hesaplanan bant aralığı enerjisi, PBE fonksiyoneliyle belirlenen değeri aşmaktadır. Dikkate değer bir şekilde, bant aralığı enerjisi arttıkça HSE06 ve PBE fonksiyonelleri arasındaki fark da büyümektedir. Bant aralığı γ -Si₂SSe malzemesinde olduğu gibi düşük değerlerde PBE > HSE06 eşitliği sağlanırken daha yüksek bant aralığına sahip γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinde bu eşitlik yön değiştirmekte ve PBE < HSE06 olmaktadır.

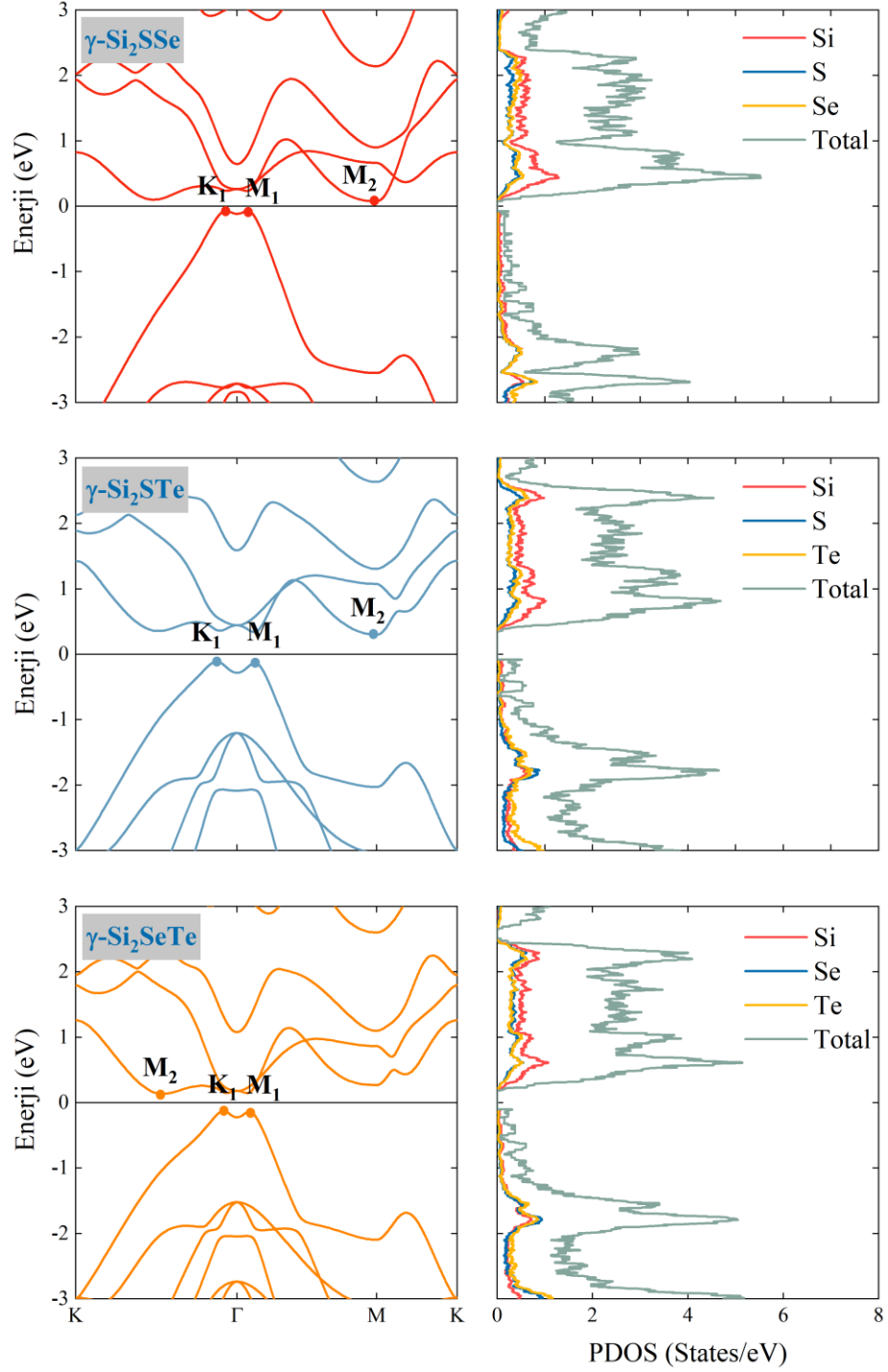
Çizelge 4.3 HSE06 ve PBE fonksiyonelleri kullanılarak γ -Si₂XY malzemeleri için hesaplanan algılama parametreleri: bant aralığı(PBE ve HSE06 fonksiyonelleri kullanılarak hesaplanan E_{gap} (eV), X ve Y yüzeyleri için iş fonksiyonu Φ_1 (eV), Φ_2 (eV) ve vakum seviyesi farkı $\Delta\Phi$)

Malzeme	E_g^{PBE}	E_g^{HSE06}	Φ_1	Φ_2	$\Delta\Phi$
γ -Si ₂ SSe	0.143	0.119	3.90	3.91	0.01
γ -Si ₂ STe	0.409	0.521	4.17	4.27	0.08
γ -Si ₂ SeTe	0.260	0.273	4.03	4.02	0.01

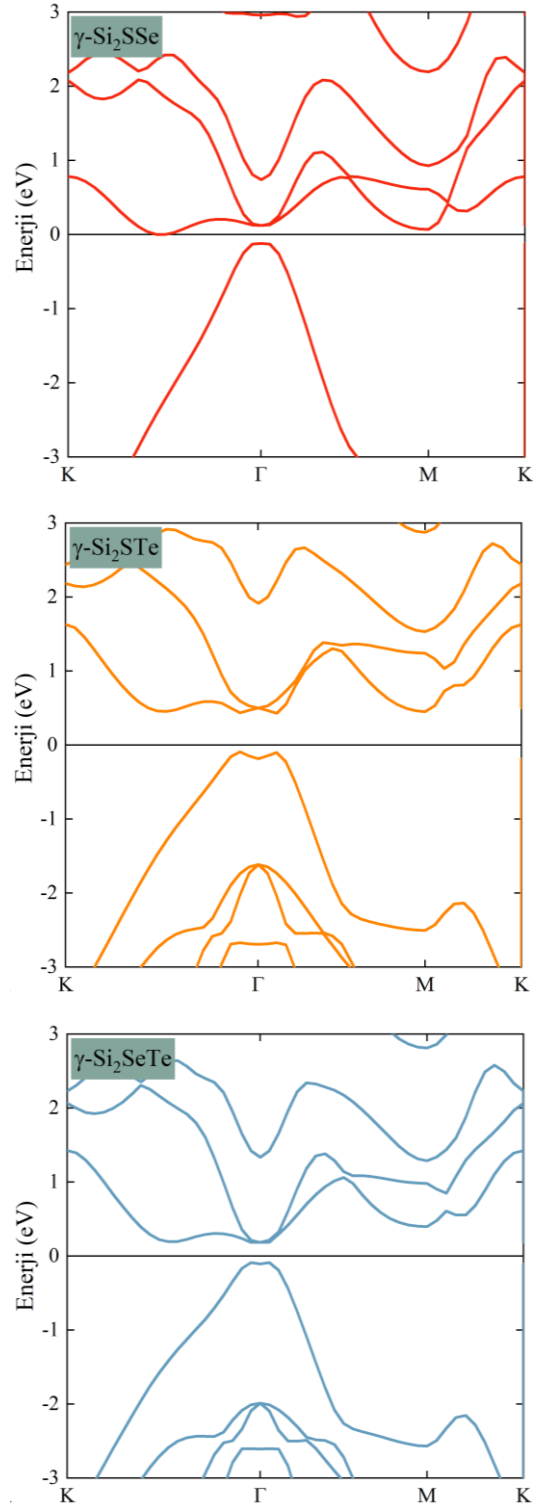
İki boyutlu malzemelerin yüzey özellikleri, elektronik ve optoelektronik uygulamalardaki potansiyellerini anlamak için hayati öneme sahiptir. Elektronların yüzeyden serbest bir duruma geçişi için gereken minimum enerji olarak tanımlanan iş fonksiyonu, dikkate alınması gereken bir diğer kritik parametredir. Üst ve alt katmanlarında farklı atomlar bulunan yapılar, Janus malzemelerde olduğu gibi, dikey olarak asimetric yapılar olarak adlandırılmaktadır. Yüzey atomlarının farklı elektronegatiflikleri, malzeme içinde bir iç elektrik alan oluşumuna neden olmaktadır. Bu nedenle, asimetric malzemelerin elektrostatik potansiyel hesaplamalarında dipol düzeltmelerinin dikkate alınması gerekmektedir.

Çizelge 4.3'te, γ -Si₂XY tek katmanlarının iki yüzeyi arasındaki vakum seviyesi farkını göstermektedir. Bu fark, yüzeydeki X ve Y elementlerinin atom çaplarındaki farklılıklara bağlıdır. Atom çaplarındaki daha büyük bir fark, vakum seviyelerinde daha belirgin bir farklılığa yol açmaktadır. Örneğin, bu değer γ -Si₂SSe ve γ -Si₂SeTe için 0.01 eV iken, atom çapları arasındaki en büyük farkı gösteren γ -Si₂STe için 0.08 eV olarak hesaplanmıştır. Ayrıca, X yüzeyindeki vakum seviyeleri, Y yüzeyine göre daha düşük

bir değere sahiptir. Bu durum, X yüzeyindeki elektronların Y yüzeyine göre yüzeyden daha kolay ayrılabilmesini göstermektedir.



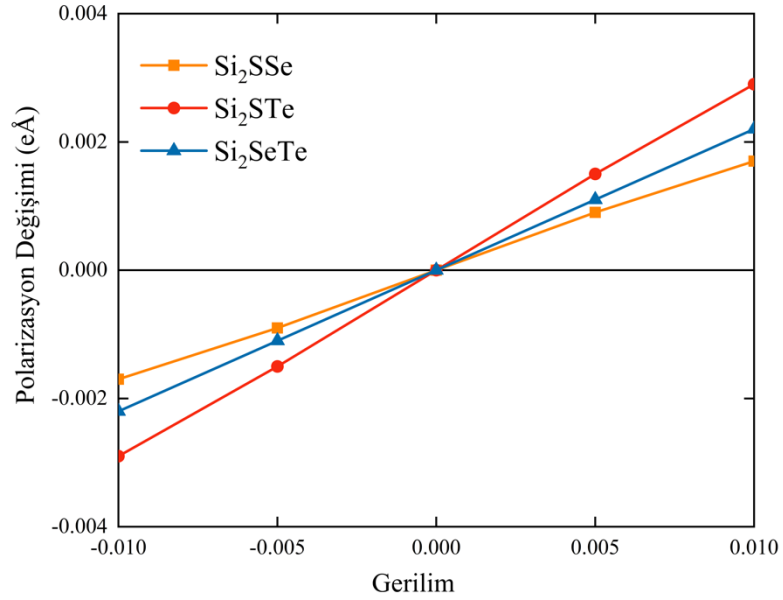
Şekil 4.4 γ -Si₂XY tek katmanlarının elektronik bant yapıları ve kısmi durum yoğunlukları (PDOS)



Şekil 4.5 γ -Si₂XY tek katmanlarınınHSE06 fonksiyoneliile hesaplanmış elektronik bant yapısı

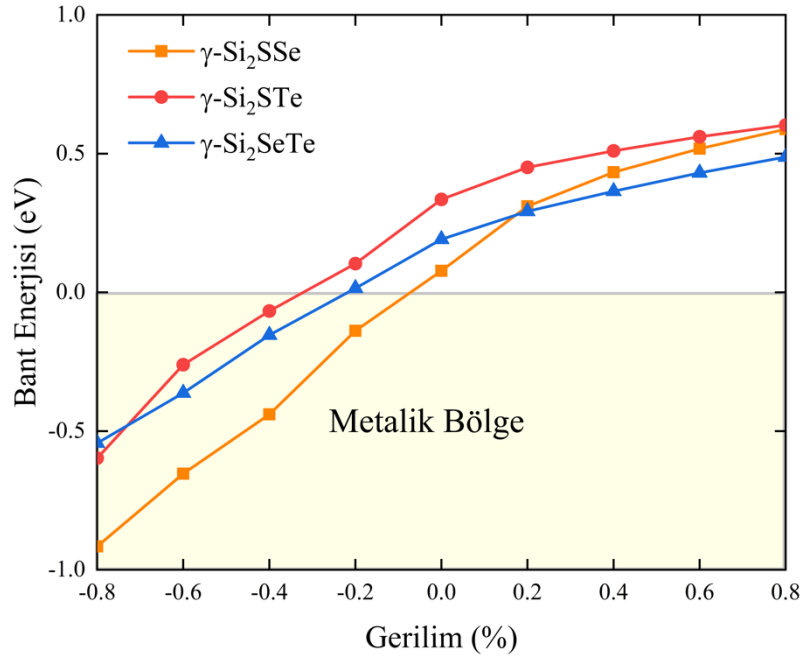
4.5 Dış Elektrik Alan ve Çift Eksenli Gerilimin Etkisi

Son yıllarda, iki boyutlu malzemelerin elektronik özelliklerinin harici etkilerle kontrol edilebilirliği, nanoelektronik ve optoelektronik uygulamalarda büyük ilgi görmüştür. Malzemelere harici bir elektrik alanı uygulamak, elektronik özelliklerinde önemli değişimlere yol açarak bu malzemelerin olası uygulama alanlarını genişletmektedir. Şekil 4.6'da γ -Si₂XY tek katmanlarının harici bir elektrik alanına karşı polarizasyon tepkisini göstermektedir. Polarizasyonda tespit edilen doğrusal değişim, bu tek katmanların doğrudan elektrik alanına tepki verdiğini açıkça ortaya koymaktadır. Özellikle, γ -Si₂STe'nin grafiği, daha dik bir eğimle elektrik alanıyla daha güçlü bir etkileşim sergilemekte ve γ -Si₂SSe ile γ -Si₂SeTe'ye kıyasla daha yüksek polarizasyon seviyeleri göstermektedir. Bu durum, γ -Si₂STe'nin elektrik alanı etkisi altında elektronik özelliklerinin daha belirgin değişimler sergilediğini ortaya koymaktadır. Dolayısıyla, γ -Si₂STe, alan kontrollü elektronik ve optoelektronik uygulamalar için diğer tek katmanlara kıyasla daha güçlü bir adaydır.

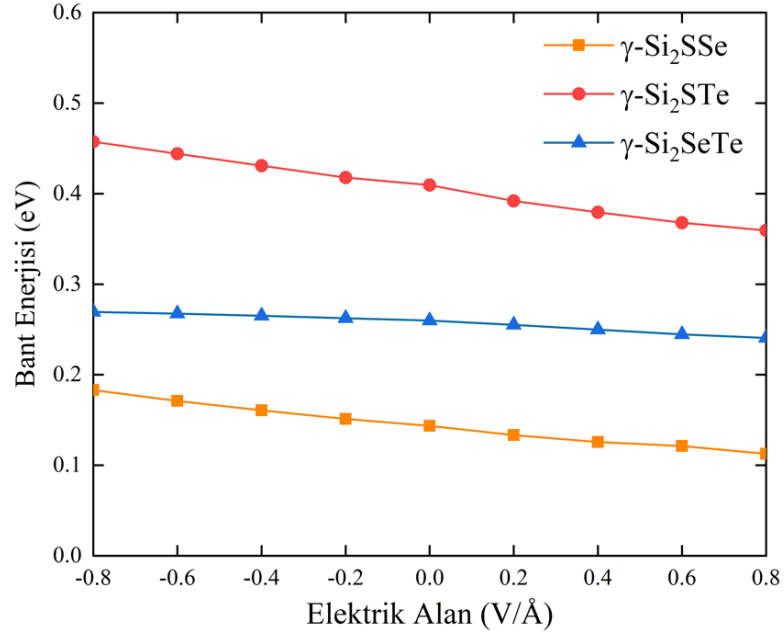


Şekil 4.6 Çift eksenli gerilime maruz bırakılan 2B γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe tek katmanının polarizasyonundaki değişimleri

Şekil 4.7’de, çift eksenli gerilim uygulandığında γ -Si₂XY tek katmanlarının bant aralıklarında meydana gelen değişimleri göstermektedir. Negatif gerilim (basınç gerilimi) bant aralığını azaltırken, pozitif gerilim (çekme gerilimi) bu aralığı artırmaktadır. Özellikle pozitif gerilim uygulaması, malzemelerin elektronik özelliklerinde yarı iletken metale doğru bir kayma yaratmaktadır. Daha büyük bir bant aralığına sahip olan γ -Si₂STe malzemesi, yaklaşık -0.3% gerilimde yarı iletken metalik özelliğe geçerken, γ -Si₂SSe ve γ -Si₂SeTe malzemelerinde bu geçiş -0.2% eV seviyelerinde gerçekleşmektedir. Bu bulgular, γ -Si₂XY tek katmanlarının elektronik özelliklerinin çift eksenli gerilim kullanılarak hassas bir şekilde ayarlanabileceğini göstermektedir. Böylece bu malzemeler, esnek elektronik uygulamalar için güçlü adaylar arasında yer almaktadır. Özellikle belirli pozitif gerilim seviyelerinde bant aralığındaki modülasyon ve yarı iletken metale geçiş, γ -Si₂XY malzemelerinin gelecekteki nanoelektronik uygulamadaki potansiyelini vurgulamaktadır.



Şekil 4.7 Çift eksenli gerilime maruz bırakılan γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe tek katmanlarının bant aralıklarındaki değişimleri



Şekil 4.8 Harici elektrik alana maruz bırakılan $2B\gamma$ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe tek katmanının bant aralıklarındaki değişimleri

Harici elektrik alanlarının iki boyutlu malzemelerin bant yapıları üzerindeki etkileri, bu malzemelerin elektronik ve optoelektronik uygulamalardaki potansiyellerini anlamada önemli bir rol oynamaktadır. Çift eksenli gerilime maruz bırakılan γ -Si₂XY tek katmanlarının aksine, çift eksenli gerilim altındaki bant aralığındaki değişimin uygulanan gerilimle doğru orantılı olduğu belirlenmiştir. Şekil 4.8'de γ -Si₂XY tek katmanlarına dik bir elektrik alanı uygulandığında bant aralıklarında meydana gelen değişiklikleri göstermektedir. Yapılan analizler, uygulanan negatif elektrik alanının malzemelerin bant aralığını artırdığını, pozitif elektrik alanının ise bu aralığı azalttığını ortaya koymaktadır. Bant aralığındaki bu değişimlerin, uygulanan elektrik alanının büyüklüğü ile ters orantılı olduğu gözlenmiştir. Bu durum, γ -Si₂XY tek katmanlarının elektronik özelliklerinin harici elektrik alanıyla hassas bir şekilde kontrol edilebileceğini göstermektedir. Özellikle bu özellikler, alan kontrollü elektronik ve optoelektronik cihazlar için bu malzemeleri güçlü adaylar haline getirmektedir. γ -Si₂XY tek katmanlarının, saf hallerine benzer şekilde γ -Si₂XY harici elektrik alanı altında da dolaylı bir bant aralığı sergilemeye devam etmektedir. Bu bulgular, γ -Si₂XY tek katmanlarının esnek ve alan kontrollü uygulamalarda kullanılacak üstün malzemeler arasında olduğunu açıkça ortaya koymaktadır.

4.6 Taşıyıcı Hareketliliği

Taşıyıcı hareketliliği, yarı iletken malzemelerin incelenmesinde temel bir parametredir, çünkü doğrudan yeni nesil elektronik uygulamalar için uygunluklarını etkiler. Taşıyıcı hareketliliği, yarı iletken malzemelerin elektronik özelliklerinin anlaşılmasında kritik bir faktördür ve gelişmiş yüksek performanslı elektronik cihazların geliştirilmesi için gereklidir. Bir elektrik alanının etkisi altında yük taşıyıcılarının (elektronlar veya deşikler) bir malzemeyi geçme yeteneğini ölçen doğal bir elektronik özelliği temsil eder. Bu özellik, yarı iletken cihaz performansının değerlendirilmesinde ayrılmaz bir parçadır ve daha yüksek taşıyıcı hareketliliği, gelişmiş elektriksel iletkenliğe ve daha hızlı cihaz çalışmasına karşılık gelir. Gerilmiş malzemeler durumunda, taşıyıcı hareketliliği, yön bağımlılıklarını içeren ve ortogonal bir hücre içinde x ve y eksenleri boyunca bağımsız olarak değerlendirilen Denklem 4.4 kullanılarak hesaplanır.

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{k_B T m^* \bar{m} E_d^2} \quad (4.4)$$

Bu bağlamda, C_{2D} elastik modülü ifade ederken, E_d deformasyon potansiyeli (DP) sabitini temsil etmektedir. Taşıyıcının efektif kütlesi m^* ile gösterilirken, $\bar{m} = \sqrt{m_x m_y}$ olarak tanımlanan ortalama efektif kütleyle ifade eder. Bunun yanı sıra, k_B , e ve \hbar sırasıyla Boltzmann sabiti, elektronun temel yükü ve indirgenmiş Planck sabitini temsil etmektedir. Hesaplamalarda sıcaklık (T) 300 K olarak sabitlenmiştir.

Denklem 4.5 kullanılarak, elektronların ve deşiklerin efektif kütleleri sırasıyla iletkenlik bandının minimum noktası (CBM) ve değerlik bandının maksimum noktası (VBM) için parabolik fonksiyonlar uyarlanarak belirlenmiştir.

$$m^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right]^{-1} \quad (4.5)$$

Bu bağlamda $E(k)$, enerji bantlarının sınır noktalarındaki dalga vektörü k ile ilişkilendirilen enerjiyi ifade etmektedir.

Bunun yanı sıra, deformasyon potansiyeli (DP) sabiti E_d ve elastik modül C_{2D} değerlerini hesaplamak için denklem 4.6 ve 4.7 kullanılmıştır.

$$C_{2D} = \frac{1}{S_0} \frac{\partial^2 E_{tot}}{\partial \epsilon_{uni}^2} \quad (4.6)$$

$$E_d = \frac{\Delta E_{edge}}{\epsilon_{uni}} \quad (4.7)$$

S_0 , E_{tot} ve ΔE_{edge} , sırasıyla optimize edilmiş birim hücrenin alanını, toplam enerjiyi ve elektronlar ile deşikler için iletkenlik bandı minimumu (CBM) ve valans bandı maksimumunun (VBM) vakum seviyesine göre enerji kaymasını ifade etmektedir. ϵ_{uni} ise -1% ile 1% arasında, 0.5%'lik artışlarla değişen küçük bir tek eksenli gerilimi temsil etmektedir.

Çizelge 4.4 γ -Si₂XY tek katmanları için x ve y yönleri boyunca etkin kütle m^* (serbest elektron kütlesi m_0 cinsinden), elastik modül C_{2D} (Nm⁻¹), deformasyon potansiyeli (DP) sabiti E_d (eV) ve taşıyıcı mobilitesi μ (cm²V⁻¹s⁻¹) değerleri

	Malzeme	m_x^*	m_y^*	C_{2D}^x	C_{2D}^y	E_d^x	E_d^y	μ_x	μ_y
Elektron	γ -Si ₂ SSe	0.20	0.20	56.05	54.48	2.41	-6.67	8.23	1.04
	γ -Si ₂ STe	0.67	0.67	42.90	41.66	-7.48	-24.34	0.058	0.0053
	γ -Si ₂ SeTe	0.60	0.60	47.71	48.76	-6.68	-2.05	0.101	1.10
Deşik	γ -Si ₂ SSe	0.16	0.16	56.05	54.48	-2.45	-5.93	12.44	2.06
	γ -Si ₂ STe	0.28	0.28	42.90	41.66	0.86	2.94	25.24	2.10
	γ -Si ₂ SeTe	0.51	0.51	47.71	48.76	-7.48	-5.99	0.12	0.78

Çizelge 4.4 γ -Si₂XY tek katmanları için etkin kütle (m), elastik modül (C_{2D}) ve deformasyon potansiyeli (DP) sabiti (E_d) değerlerini sunmaktadır. Serbest elektron kütlesine bağlı hesaplanan etkin kütleler, yarı iletken malzemelerde doping seviyelerine bağlı varyasyonları ortaya koymaktadır. γ -Si₂STe için etkin kütle 0.67 m_0 olarak

hesaplanırken, γ -Si₂SSe (0.19m₀) ve γ -Si₂SeTe'de (0.60m₀) belirgin şekilde azalmaktadır. Dikkat çekici bir şekilde, etkin kütle tüm γ -Si₂XY tek katmanları boyunca hem x hem de y taşıma yönlerinde düzgün kalmaktadır. C_{2D} değerleri için de benzer bir eğilim gözlemlenmiştir ve bu, hem etkin kütle hem de elastik modülde anizotropiyi göstermektedir. Bu bulgular, Şekil 4.4'te gösterilen enerji bant yapılarıyla uyumludur. Daha düşük etkin kütleler sergileyen γ -Si₂SSe ve γ -Si₂SeTe'nin bant yapıları, γ -Si₂STe'ye kıyasla iletim bandı minimumu (CBM) yakınında daha az belirgin parabolik özellikler göstermektedir. Bu, bant yapısı özellikleri ile etkin kütle değerleri arasındaki etkileşimi vurgulamaktadır.

DP sabiti, taşıyıcı hareketliliğini belirlemede önemli bir rol oynayan x ve y eksenleri boyunca önemli bir anizotropi sergiler. Bu anizotropi, Çizelge 4.4'te özetlendiği gibi, γ -Si₂XY malzemeleri için taşıyıcı hareketlilik değerlerinin izotropik veya anizotropik davranışını doğrudan etkiler.

Elektron ve deşik hareketlilikleri, kristalografik yönelime göre DP sabitinin önemli ölçüde değişmesi nedeniyle oldukça yönlüdür. γ -Si₂STe hariç çoğu malzeme için, x eksenini boyunca taşıyıcı hareketliliği, y eksenini boyunca olandan sürekli olarak üstündür. Bu farklılık, bu yönler boyunca taşıyıcıların anizotropik difüzyon katsayılarından kaynaklanmaktadır. İncelenen malzemeler arasında, γ -Si₂STe, yüksek deformasyon potansiyeli anizotropisi ve yoğunlaştırılmış saçılma süreçleri nedeniyle en düşük hareketliliği göstermektedir. Bu faktörler, taşıyıcı tepkisini ve elektriksel iletkenliği azaltarak bu malzemeyi yüksek performanslı elektronik uygulamalar için daha az uygun hale getirir. Taşıyıcı hareketliliğindeki gözlemlenen değişimler, elektronik uygulamalar için malzemelerin tasarımı ve optimizasyonu sürecinde yön bağımlılıklarının dikkate alınmasının ne denli önemli olduğunu vurgulamaktadır. Malzemenin taşıyıcı hareketliliğini, istenilen yönelimlere göre en üst düzeye çıkaracak şekilde uyarlamak, gelişmiş teknolojik uygulamalarda üstün cihaz performansı elde etmenin anahtarıdır. Bu yaklaşım, malzeme mühendisliğinde yön ile ilgili özelliklerin optimize edilmesi gerektiğini ve böylece cihazların verimlilik ve performansının artırılabilirliğini ortaya koymaktadır.

4.7 Optik Özellikler

VASP malzemelerin elektronik ve optik özelliklerini hesaplamak için yaygın olarak kullanılan bir yazılımdır. Optik özellikler, bir malzemenin ışıkla etkileşimini, özellikle de ışığın yansıma, emilim, kırılma ve geçirgenlik gibi davranışlarını anlamada önemli rol oynar. VASP, yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) çerçevesinde bu özellikleri hesaplamak için kullanılır ve genellikle optik geçişlerin, enerji bant yapılarının ve dielektrik fonksiyonların incelenmesinde kullanılır. Optik özelliklerin hesaplanmasında, genellikle dielektrik fonksiyonu ve elektriksel dipol momentlerinin üzerine inşa edilen eşitlikler kullanılır. VASP, bu hesaplamaları yapmak için ikincil kuantum mekaniksel hesaplamalar ve taşıyıcıların dinamik davranışlarını modellemek için özel yöntemler sunar. Elektriksel dipol momentleri ve dielektrik fonksiyonları, malzemenin ışıkla etkileşimini tanımlamak için temel fiziksel büyüklüklerdir.

Dielektrik Fonksiyonu ($\epsilon(\omega)$): Optik özelliklerin hesaplanmasında en yaygın kullanılan terimlerden biri dielektrik fonksiyondur. Bu fonksiyon, malzemenin ışığa karşı duyarlılığını ve ışığın malzeme ile etkileşiminden nasıl etkilendiğini belirler. VASP, dielektrik fonksiyonunun karmaşık bileşenini (reel ve imajiner kısımlar) hesaplayarak optik geçişler hakkında bilgi verir. Dielektrik fonksiyonu şu şekilde ifade edilir:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi}{\omega^2} \int_0^\infty \sigma(\omega') \cdot \frac{d\omega'}{\omega' - \omega} (4.8)$$

Burada $\sigma(\omega)$, malzemenin frekansa bağlı elektriksel iletkenliğidir ve ω ise frekanstır.

Absorpsiyon ($\alpha(\omega)$): Optik geçişler, fotonların malzeme içindeki serbest taşıyıcılar ile etkileşmesi sonucu ortaya çıkar. VASP, optik geçişleri ve bu geçişlerin absorpsiyon spektrumlarını hesaplamak için gerekli bilgileri sağlar.

Absorpsiyon, malzemenin ışık tarafından ne kadar emildiğini gösterir ve aşağıdaki gibi tanımlanabilir (Chelikowsky ve Cohen 1967):

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_2(\omega)}{2}} \quad (4.9)$$

Burada $\alpha(\omega)$ emilim katsayısı; $\varepsilon_2(\omega)$ dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı ve c , ışık hızıdır.

Yansım: Malzemenin ışığa karşı gösterdiği yansım oranını ifade eder. Optik geçişler ve malzemenin dielektrik fonksiyonu kullanılarak yansım katsayısı hesaplanabilir. Yansım şu şekilde ifade edilebilir (Chelikowsky ve Cohen 1967):

$$R(\omega) = \left| \frac{n(\omega)-1}{n(\omega)+1} \right|^2 \quad (4.10)$$

Burada $n(\omega)$, malzemenin kırılma indisi olarak bilinen, frekansa bağılı bir fonksiyondur.

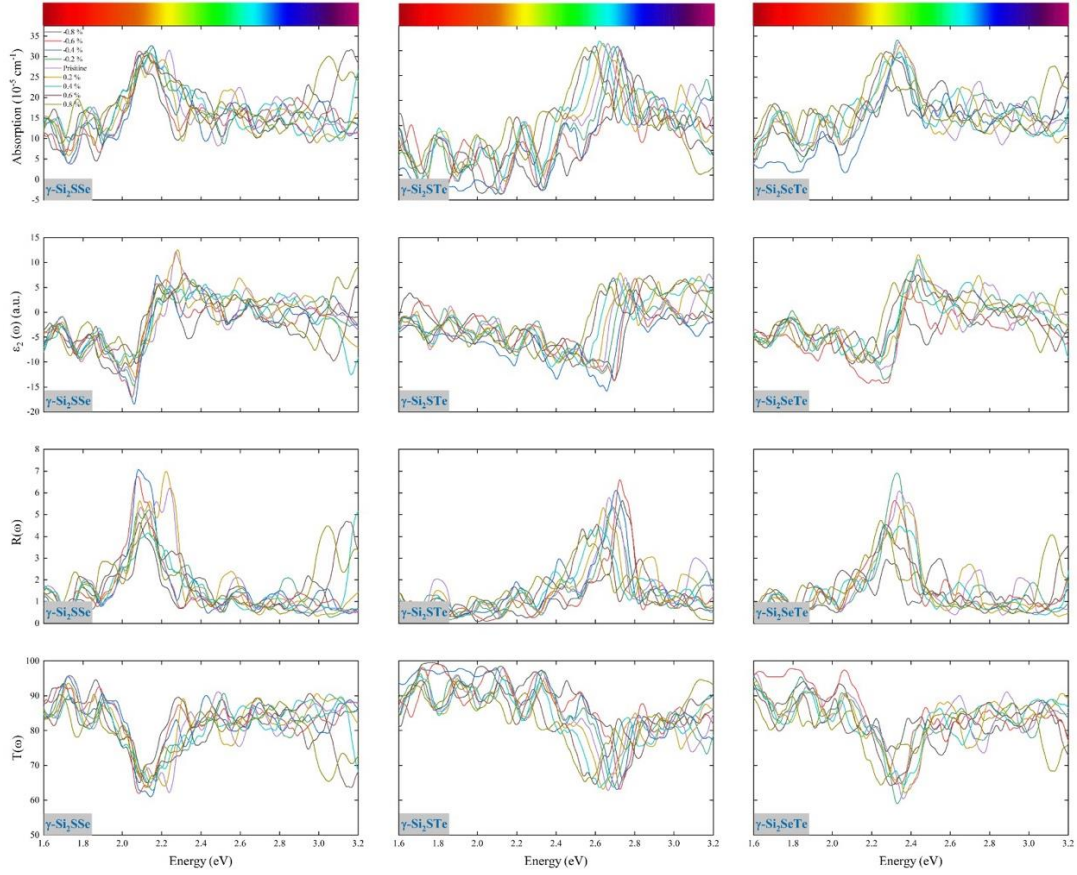
Kırılma İndisi: Kırılma indisi, bir malzemenin ışık hızını nasıl yavaşlattığını belirleyen bir parametredir ve optik özelliklerin hesaplanmasında önemli bir rol oynar. VASP kullanılarak, malzemenin kırılma indisi, dielektrik fonksiyonu üzerinden hesaplanabilir ve şu şekilde ifade edilebilir:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1(\omega) + \sqrt{(\varepsilon_1(\omega))^2 + (\varepsilon_2(\omega))^2}}{2}} \quad (4.11)$$

Burada $\varepsilon_1(\omega)$ ve $\varepsilon_2(\omega)$, dielektrik fonksiyonunun reel ve imajiner kısımlarıdır (Chelikowsky ve Cohen 1967).

γ -Si₂XY tek katmanlarının optik özellikleri, bu malzemelerin gelecekteki teknolojik uygulamalardaki potansiyelini değerlendirmek amacıyla detaylı bir şekilde analiz edilmiştir. Bu çalışmada, söz konusu sistemlerin farklı seviyelerde uygulanan gerilme altındaki optik tepkileri incelenmiş ve γ -Si₂XY malzemelerinin değişen mekanik koşullar altındaki davranışlarına dair önemli bilgiler elde edilmiştir.

Şekil 4.9’da, görünür spektrumda bozulmamış ve farklı gerilme seviyelerine maruz bırakılmış γ -Si₂XY tek katmanlarının optik soğurma katsayıları gösterilmektedir.



Şekil 4.9 γ -Si₂Sse, γ -Si₂Ste ve γ -Si₂SeTe tek katmanının optik özellikleri

Şekil 4.9’de görüldüğü gibi, değişen gerilme seviyelerinin absorpsiyon spektrumunun yoğunluğunu ve dalga boyu dağılımını etkilediğini ortaya koymaktadır. Özellikle, pozitif gerilme altında absorpsiyonun kayda değer şekilde arttığı, negatif gerilme altında ise azaldığı gözlemlenmiştir. Pozitif gerilme koşulları, bozulmamış duruma kıyasla genel bir absorpsiyon artışı sağlarken, bu durum bant aralığında meydana gelen kaymalarla ilişkilendirilmektedir. Bu bağlamda, pozitif gerilme altında absorpsiyondaki artışın, genişletilmiş bant geçişlerine sahip optoelektronik cihazlar veya fotovoltaik uygulamalar için bu malzemelerin uygunluğunu artırdığı değerlendirilmiştir. Buna karşılık, negatif gerilme altında absorpsiyonda meydana gelen azalma, malzemenin optik verimliliğinde bir düşüşe işaret etmektedir.

γ -Si₂XY tek katmanlarının optik spektrumlarında görünür bölgede gözlemlenen pik noktalarının, elektronik bant yapılarındaki ve enerji seviyelerindeki farklılıklarla ilişkilendirildiği tespit edilmiştir. 2B malzemelerde genellikle doğrudan bant geçişleri ile görünür spektrumdaki pik enerjileri arasında orantılı bir ilişki beklenmektedir. Ancak, dolaylı geçişler sergileyen γ -Si₂XY malzemelerinde bu tür bir doğrudan korelasyon kurmanın güç olduğu değerlendirilmektedir. Bu durum, doğrudan geçişlerde bant aralığı enerjisinin tamamen foton enerjisine bağlı olması ile açıklanabilirken, dolaylı geçişlerde enerji, foton ve fonon katkılarının bir kombinasyonu ile belirlendiği için optik yanıtın daha karmaşık bir yapıya sahip olmasına yol açmaktadır.

γ -Si₂SSe, γ -Si₂STe ve γ -Si₂SeTe'nin absorpsiyon katsayıları enerjiye (eV) bağlı olarak gerilme durumlarına göre değişiyor.

- Düşük enerjilerde absorpsiyon oldukça düşük ve malzemeler ışığı düşük enerjilerde zayıf bir şekilde absorbe ediyor.
- Enerji arttıkça, absorpsiyon katsayısında belirgin artışlar gözleniyor. Ancak bu artış, gerilme durumuna bağlı olarak enerji aralıklarında farklılık gösteriyor.
- **Gerilme türü arttıkça (pozitif ve negatif değerlerde), absorpsiyonun enerji spektrumu üzerindeki zirve noktalarının yer değiştirdiği görülüyor.** Örneğin: γ -Si₂STe'de yüksek gerilme durumları absorpsiyonun artmasına neden oluyor.

İmajiner dielektrik fonksiyonu, malzemelerin dispersiyon özelliklerini tanımlar ve bu durum gerilme ile oldukça değişken bir yapıya sahiptir. Şekil 4.9'da imajiner dielektrik fonksiyon görülmektedir.

- İmajiner dielektrik fonksiyonunda pozitiften negatife geçişler gerilme durumuna bağlı olarak kayma göstermektedir.

- Negatif gerilmeler, enerji aralıklarında daha belirgin dalgalanmalara neden olmaktadır.
- Bu dalgalanmalar, malzemelerin optik kutuplanma durumlarını etkiler ve bu malzemelerin belirli dalga boylarında optik aktif hale gelebileceğini gösterir.

Malzemelerin gerilme altında ışığı yansıtma (R) özellikleri enerji spektrumuna göre değişir.

- Şekil 4.9'dan da görüleceği üzere, düşük enerjilerde yansıma katsayısı oldukça düşük, bu da bu enerji aralığında ışığın büyük kısmının emildiğini veya geçtiğini gösterir.
- Gerilme arttıkça, yansımanın zirve noktaları enerji spektrumu boyunca kayma olduğunu göstermektedir.
- Özellikle γ -Si₂SeTe için, yüksek pozitif gerilmelerde yansımanın önemli ölçüde arttığı gözlenmektedir.

Işık geçirgenliği (T), gerilme durumlarına bağlı olarak değişmektedir.

- Negatif gerilmeler geçirgenliği artırırken, pozitif gerilmeler geçirgenliği azaltabilir.
- Şekil 4.9'dan da görüldüğü üzere, düşük enerji aralıklarında geçirgenlik nispeten yüksek, bu da malzemelerin düşük enerjili ışık için daha geçirgen olduğunu göstermektedir.
- Ancak, **yüksek pozitif gerilme durumlarında geçirgenliğin enerji spektrumunda daha hızlı azaldığı**

5. TARTIŞMAVE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, Janus γ -Si₂XY (X/Y = S, Se, Te) tek katmanlı malzemelerin elektriksel, optik ve mekanik özellikleri detaylı olarak incelenmiş ve bu malzemelerin ileri teknoloji uygulamaları için büyük potansiyel taşıdığı ortaya konmuştur. Farklı gerilme koşulları altında yapılan analizler, malzemelerin dinamik ve termal kararlılıklarını koruduğunu, bu özelliklerin fonon spektrumları ve ab initio moleküler dinamik simülasyonları ile doğrulandığını göstermiştir. Born'un mekanik kararlılık kriterine göre yapılan değerlendirmeler, bu yapıların üstün mekanik stabiliteye sahip olduğunu açıkça ortaya koymuştur.

Elektronik bant yapılarında özellikle değerlik bandında gözlemlenen Meksika şapkası şeklindeki dağılım, benzersiz bir elektron yoğunluğu davranışını işaret etmektedir. Bu durum, Janus γ -Si₂XY malzemelerinin elektronik ve optoelektronik cihazlarda kullanılabilirliğini artırmaktadır. Elektron ve delik hareketliliklerinin, deformasyon potansiyelinin yön bağımlılığı nedeniyle x- ve y-eksenleri boyunca farklılık göstermesi, bu malzemelerin anizotropik özelliklere sahip olduğunu kanıtlamaktadır. Özellikle Si₂SSe ve Si₂SeTe'nin düşük etkin kütle değerleri, daha az belirgin parabolik bant yapıları sayesinde yüksek taşıyıcı hareketliliği sağlamaktadır. Buna karşılık, Si₂STe'nin yüksek etkin kütlesi ve artan deformasyon potansiyeli anizotropisi, taşıyıcı hareketliliğini azaltarak bu malzemeyi yüksek performanslı cihazlar için daha az uygun hale getirmiştir.

Genel olarak optik özelliklerine baktığımızda; gerilme (strain), bu malzemelerin tüm optik özelliklerini önemli ölçüde etkilemekte olduğu gözlenmiştir.

Pozitif gerilmeler genelde absorpsiyon ve yansımayı (reflektansı) artırırken, geçirgenliği (transmittansı) düşürme eğilimindedir.

Negatif gerilmeler (compressive strain), imajiner dielektrik fonksiyonunda da daha belirgin dalgalanmalara neden olurken, geçirgenliği artırıyor. Gerilme uygulamalarının,

optik soğurma spektrumlarında ve bant aralığında dikkate değer değışimlere yol açtığı belirlenmiştir. Pozitif gerilme (tensile strain) altında optik soğurma kapasitesindeki artış, Janus γ -Si₂XY malzemelerinin optoelektronik ve fotovoltaik uygulamalarda kullanımını cazip hale getirmektedir. Ayrıca, malzemelerin yarıiletken-metal faz geçişi göstermesi, nanoelektronik uygulamalar için önemli bir avantaj sunmaktadır.

Elde edilen sonuçlar, Janus γ -Si₂XY malzemelerinin üstün elektronik, optik ve mekanik özelliklere sahip olduğunu, bu özelliklerin farklı uygulama alanlarında kullanılabilirliği artıracığını göstermektedir. Bu malzemelerin esnek elektronik, enerji depolama, optoelektronik ve nanoelektronik cihazlar için umut verici adaylar olduğu sonucuna varılmıştır. Gelecekteki çalışmalarda bu malzemelerin deneysel sentezi ve cihaz düzeyindeki performanslarının daha detaylı incelenmesi önerilmektedir.

KAYNAKLAR

- Baroni, S., de Gironcoli, S., Dal Corso, A., & Giannozzi, P. (2001). Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of Modern Physics*, 73(2), 515-562.
- Born, M., & Huang, K. (1996). *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press.
- Chelikowsky, J. R., & Cohen, M. L. (1967). Optical properties of solids. *Physical Review Letters*, 19(18), 1214-1218.
- Cooper, R. C., Lee, C., Marianetti, C. A., Wei, X., Hone, J., & Kysar, K. W. (2013). Nonlinear elastic behavior of two-dimensional molybdenum disulfide, *Physical Review B*, vol. 87, p. 035423.
- Duerloo, K. A. N., Ong, M. T., & Reed, E. J. (2012). Intrinsic piezoelectricity in two-dimensional materials," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 3, pp. 2871–2876.
- Hansen, J. P., & McDonald, I. R. (2006). *Theory of Simple Liquids* (4th ed.). Academic Press.
- Henkelman, G., Uberuaga, B. P., & Jónsson, H. (2006). A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density. *The Journal of Chemical Physics*, 113(22), 9901-9904.
- Hiep, N. T., Nguyen, C. Q., & Hieu, N. N. (2023). Negative Poisson's ratio and anisotropic carrier mobility in ternary Janus Si₂XY (X/Y = S, Se, Te): First-principles prediction. *Applied Physics Letters*, 123.
- Hopfield, J. J. (1958). *Theory of the Contribution of Excitons to the Complex Dielectric Constant of Crystals*. *Physical Review*, 112(5), 1555–1567.
- Jones, R. O. (2015). Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. *Reviews of Modern Physics*, 87(3), 897-923.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133-A1138.
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54(16), 11169-11186.
- Lee, S., Jung, J.-E., Kim, H.-g., Lee, Y., Park, J. M., Jang, J., Yoon, S., Ghosh, A., Kim, M., Kim, J., Na, W., Kim, J., Choi, H. J., Cheong, H., Kim, K. (2021). γ -GeSe: A New Hexagonal Polymorph from Group IV–VI Monochalcogenides. *Nano Lett.*, 21, 10, 4305–4313.
- Marder, M.P. (2010). *Condensed Matter Physics*. A John Wiley & Sons, Inc. Publication, 952s., Hoboken, New Jersey.
- Martin, R. M. (2004). *Electronic structure: Basic theory and practical methods*. Cambridge University Press.

- Momma, K., & Izumi, F. (2011). VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *Journal of Applied Crystallography*, 44(6), 1272-1276.
- Mouhat, F., & Coudert, F. X. (2014). Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems, *Physical Review B*, vol. 90, p. 224104.
- Nosé, S. (1984). A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, 81(1), 511-519.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V. and Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696); 666-669.
- Parlinski, K., Li, Z. Q., & Kawazoe, Y. (1997). First-principles determination of the soft mode in cubic ZrO₂. *Physical Review Letters*, 78(21), 4063.
- Pathria, R. K., & Beale, P. D. (2011). *Statistical Mechanics* (3rd ed.). Academic Press.
- Seixas, L. (2020). Janus two-dimensional materials based on group IV monochalcogenides. *Journal of Applied Physics*, 128(4).
- Shanmugam, V., Mensah, R. A., Babu, K., Gawusu, S., Chanda, A., Tu, Y., Neisiany, R. E., Försth, M., Sas, G. and Das, O. (2022). A Review of the Synthesis, Properties, and Applications of 2B Materials. *Wiley*, 39(6); 1-22.
- Togo, A., & Tanaka, I. (2015). First principles phonon calculations in materials science. *Scripta Materialia*, 108, 1-5.
- Xiang, P., Sharma, S., Wang, W. M., Wu, J., & Schwingenschlögl, J. (2020). Flexible C₆BN Tek katmans As Promising Anode Materials for High-Performance K-Ion Batteries, *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 12, p. 024001.
- Zhang, N., Hong, Y., Yazdanparast, S., & Zaeem, M. A. (2018). A comprehensive first-principles study of structural, elastic, and electronic properties of two-dimensional titanium carbide/nitride-based MXenes. *2B Materials*, 5(1), 1–22.
- Zhu, Y., Qu, Z., Zhang, J., Wang, X., Jiang, S., Xu, Z., Yang, F., Wu, Z., & Dai, Y. (2024). First-principles prediction of ferroelectric Janus Si₂XY (X/Y = S/Se/Te, X ≠ Y). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26, 4555–4563.