



T.C.

ALTINBAŞ ÜNİVERSİTESİ

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalı

**MXene/MBene YÜZEY TİPİ Fe_xB FİLMLEİNİN
EMI KALKANLAMA VERİMLİLİKLERİNİN
YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ VE MONTE
CARLO METODU YAKLAŞIMIYLA
ARAŞTIRILMASI**

Hakan ÜŞENTİ

Doktora Tezi

Danışman

Doç.Dr. İzzet Paruğ DURU

İstanbul, 2024

**MXene/MBene YÜZEY TİPİ Fe_xB FİLMLEİN EMI KALKANLAMA
VERİMLİLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ VE
MONTE CARLO METODU YAKLAŞIMIYLA ARAŞTIRILMASI**

Hakan ÜŞENTİ

Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalı

Doktora Tezi

ALTINBAŞ ÜNİVERSİTESİ

2024

“Hakan ÜŞENTİ” tarafından hazırlanmış ve 11/12/2024 tarihinde sunulmuş “MXene/MBene YÜZEY TİPİ Fe₃B FİMLERİN EMI KALKANLAMA VERİMLİLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ VE MONTE CARLO METODU YAKLAŞIMIYLA ARAŞTIRILMASI” başlıklı tez Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalında Doktora Tezi olarak **oy birliği** ile kabul edilmiştir.

Doç. Dr. İzzet Paruğ DURU

Danışman

Tez Savunma Sınavı Jüri Üyeleri:

Doç. Dr. Polat TOPUZ

Metalurji ve Malzeme
Mühendisliği Bölümü,

İstanbul Gedik Üniversitesi

Doç. Dr. İzzet Paruğ DURU

Tıbbi Hizmetler ve Teknikler
Bölümü,

İstanbul Gedik Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi Mesut ÇEVİK

Elektrik ve Elektronik
Mühendisliği Bölümü,

Altınbaş Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi Abdullah Abdu
IBRAHİM

Bilgisayar Mühendisliği
Bölümü,

Altınbaş Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi Emre GÜMÜŞ

Mülkiyet Koruma ve Güvenlik
Bölümü,

İstanbul Gedik Üniversitesi

Bu tezin Doktora tezi olarak bütün şartları sağladığını beyan ederim.

Bu tezdeki tüm bilgilerin akademik kurallara ve etik davranışlara uygun olarak edinildiğini ve sunulduğunu beyan ederim. Ayrıca, bu kuralların ve davranışların gerektirdiği şekilde, bu çalışmada, orijinal olmayan tüm materyalleri ve sonuçları tamamen alıntı yaptığımı ve referans gösterdiğimi de beyan ederim.

Hakan ÜŞENTİ

İmzası



İTHAF

“Babam Apdurrahman ÜŞENTİ’nin aziz hatırasına...”



ÖZET

MXene/MBene YÜZEY TİPİ Fe_xB FİLMLERİN EMI KALKANLAMA VERİMLİLİKLERİNİN YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ VE MONTE CARLO METODU YAKLAŞIMIYLA ARAŞTIRILMASI

ÜŞENTİ, Hakan

Doktora, Elektrik ve Bilgisayar Mühendisliği Ana Bilim Dalı, Altınbaş Üniversitesi

Danışman: Doç.Dr. İzzet Paruğ DURU

Tarih: Aralık/2024

Sayfa: 161

Bu tez çalışmasında MXenes ailesinin en yeni üyesi olan MBenes kapsamındaki Fe_xB 'un (FeB , Fe_2B) yapısal, elektronik, manyetik ve optik özellikleri ab-initio yöntemler kullanılarak incelenmiştir. Ardından bu malzemelerle elde edilen 2D film tabakaların elektromanyetik kalkanlama etkililikleri fotonun polarizasyon durumu gözetilerek detaylı şekilde incelenmiştir. Çalışmada isim karışıklığını önlemek için; I41/amd uzay grubunda bulunan FeB için $\text{FeB}(1)$, cmcm uzay grubunda bulunan FeB için $\text{FeB}(2)$, I41/mcm uzay grubunda bulunan Fe_2B için $\text{Fe}_2\text{B}(1)$, P4/mmm uzay grubunda bulunan Fe_2B için $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ denilmiştir. Bu 4 malzemenin analizi yapılırken kuantum mekaniksel alt yapıyı kullanan yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT) kullanılmıştır. Fe_xB nanoparçacıklar ($\text{FeB}(1)$, $\text{FeB}(2)$, $\text{Fe}_2\text{B}(1)$, $\text{Fe}_2\text{B}(2)$) kullanılarak elde edilen dört farklı tek katmanlı film yapının da ultraviyole bölgede 20 dB'in üzerinde kalkanlama performansı gösterdiği görülmüştür. Elektromanyetik radyasyondan korunmanın en etkili yolu elektriksel iletkenliği yüksek aynı zamanda yüksek manyetik geçirgenliğe sahip kalkanlama malzemesi kullanmaktır. Bor tabanına demir katkılanarak elde edilmiş olan Fe_xB yapıları birçok üstün özelliğinin yanı sıra, göstermiş oldukları metalik davranışları ve ortaya koydukları manyetik özellikleri sayesinde yeni nesil kalkanlama malzemesi olmaya da aday olduklarını göstermişlerdir. Tek katmanlı atomik yapılarında bile >20 dB dolaylarındaki kalkanlama performansları heyecan vericidir.

Anahtar Kelimeler: MBene, Fe_xB , Kalkanlama, Ab-initio, DFT.

ABSTRACT

EMI OF MXene/MBene SURFACE TYPE Fe_xB FILMS INTENSITY OF PROTECTION EFFICIENCIES FUNCTION THEORY AND MONTE CARLO METHOD RESEARCH WITH APPROACH

ÜŞENTİ, Hakan

PhD, Electrical and Computer Engineering, Altınbaş University,

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. İzzet Parug DURU

Date: December/2024

Pages: 161

In this thesis, the structural, electronic, magnetic and optical properties of Fe_xB (FeB, Fe₂B) within the scope of MBenes, the newest member of the MXenes family, were investigated using ab-initio methods. Then, the electromagnetic shielding efficiency of 2D film layers obtained with these materials was investigated in detail by considering the polarization state of the photon. In order to avoid name confusion in the study; FeB(1) for FeB'nin the I41/amd space group, FeB(2) for FeB'nin the cmcm space group, Fe₂B(1) for Fe₂B in the I41/mcm space group, Fe₂B(2) for Fe₂B in the P4/mmm space group. Density function theory (DFT) using quantum mechanical background was used to analyze these 4 materials. All four different monolayer film structures obtained using Fe_xB nanoparticles (FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2)) were found to exhibit shielding performance above 20 dB in the ultraviolet region. The most effective way to protect from electromagnetic radiation is to use shielding materials with high electrical conductivity and high magnetic permeability. Fe_xB structures obtained by doping iron on boron base have shown that they are candidates to be the next generation shielding material thanks to their metallic behavior and magnetic properties, as well as their many superior properties. Their shielding performance of around >20 dB even in single-layer atomic structures is exciting.

Keywords: MBene, Fe_xB, Shielding Effect, Ab-initio, DFT.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
TABLO LİSTESİ.....	xii
ŞEKİL LİSTESİ	xiv
KISALTMALAR.....	xviii
SEMBOL LİSTESİ	xix
1. GİRİŞ VE AMAÇ	1
1.1 GİRİŞ	1
1.2 PROBLEM TANIMI VE ÇÖZÜM	6
1.3 TEZİN KATKISI.....	7
1.4 TEZİN AMACI.....	7
2. LİTERATÜR TARAMASI.....	8
2.1 GEÇMİŞ ÇALIŞMALAR	8
3. TEORİK BİLGİLER	18
3.1 ELEKTROMANYETİK DALGALAR.....	18
3.1.1 Elektromanyetik Dalgaların Özellikleri.....	18
3.1.2 Maxwell Eşitlikleri.....	19
3.1.3 Elektromanyetik Dalga Eşitliği.....	20
3.1.4 Elektromanyetik Dalganın Taşıdığı Enerji Ve Momentum.....	21
3.1.5 Elektromanyetik Dalga Polarizasyonu Ve Yayılımı.....	22
3.1.6 Elektromanyetik Spektrum	22
3.1.7 Elektromanyetik Radyasyon	24
3.1.8 Elektromanyetik Girişim (EMI).....	25
3.2 KRİSTAL YAPI	26
3.2.1 Kristal Sistemleri Ve Bravais Örgüleri	28
3.2.2 Miller İndisleri	29

3.3 AB-İNİTİO YÖNTEMLER.....	30
3.3.1 Hartree-Fock Yaklaşımı.....	30
3.3.1.1 Korelasyon enerjisi	31
3.3.2 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)	32
3.3.2.1 Thomas-Fermi-Dirac yaklaşımı	32
3.3.2.2 Hohenberg-Kohn teoremleri	35
3.3.2.3.Kohn-Sham yaklaşımı.....	36
3.3.2.4 Hellmann-Feynman teoremi.....	38
3.3.3 Değiş-Tokuş Korelasyon Enerjisinin Önemi	38
3.3.3.1 DFT hesaplarının öz-tutarlı çözümü	39
3.3.3.2 Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)	41
3.3.3.3 Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA)	42
3.3.4 Düzlem Dalga Baz Setleri Ve Bloch Teoremi	45
3.3.5 Pseudopotansiyel Yaklaşım	46
3.4 KATILARIN MANYETİK ÖZELLİKLERİ.....	49
3.4.1 Diyamanyetizma	49
3.4.2 Paramanyetizma	50
3.4.3 Ferromanyetizma	50
3.4.4 Antiferromanyetizma	51
3.4.5 Ferrimanyetizma	52
3.5 KATILARIN ELEKTRONİK BANT YAPISI.....	53
3.6 OPTİK ÖZELLİKLER	55
3.7 ELEKTROMANYETİK KALKANLAMA ETKİNLİLİĞİ (SE)	58
4. MATERYAL VE YÖNTEM	61
4.1 GEOMETRİ OPTİMİZASYONU VE KAFES PARAMETRELERİNİN HESAPLANMASI.....	62
4.1.1 Birim Hücre Yapısı Ve Nano Parçacıklar.....	63
4.2 ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLER VE TABAN DURUMU ÇÖZÜMÜ	68

4.3 DİELEKTRİK FONKSİYONU VE OPTİK ÖZELLİKLER	70
4.4 MANYETİK ÖZELLİKLER.....	71
4.5 KALKANLAMA ETKİLİLİĞİNİN (SE) HESAPLANMASI.....	73
4.6 CASTEP PROGRAMININ TANITIMI	74
5. BULGULAR	76
5.1 ELEKTRONİK ÖZELLİKLER, TABAN DURUMU VE MANYETİK ÖZELLİKLER.....	76
5.1.1 FeB(1)'in Yapısal ve Manyetik Özellikleri	77
5.1.1.1 FeB(1) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı.....	77
5.1.1.2 FeB(1) İçin manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı.....	79
5.1.2 FeB(2)'nin Yapısal Ve Manyetik Özellikleri	80
5.1.2.1 FeB(2) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı.....	80
5.1.2.2 FeB(2) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı.....	82
5.1.3 Fe ₂ B(1)'in Yapısal Ve Manyetik Özellikleri	83
5.1.3.1 Fe ₂ B(1) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı	83
5.1.3.2 Fe ₂ B(1) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı	85
5.1.4 Fe ₂ B(2)'nin Yapısal Ve Manyetik Özellikleri	86
5.1.4.1 Fe ₂ B(2) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı	86
5.1.4.2 Fe ₂ B(2) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı	88
5.2 ENERJİ HESAPLAMALARI: DİELEKTRİK FONKSİYONU VE OPTİK ÖZELLİKLER.....	89
5.2.1 FeB(1) İçin Dielektrik Fonksiyonu Ve Optik Özellikler	90
5.2.2 FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonu Ve Optik Özellikler	93
5.2.3 Fe ₂ B(1) İçin Dielektrik Fonksiyonu Ve Optik Özellikler.....	97
5.2.4 Fe ₂ B(2) İçin Dielektrik Fonksiyonu Ve Optik Özellikler.....	100
5.3 ELEKTROMANYETİK KALKANLAMA PERFORMANSI (SE).....	104
5.3.1 FeB(1)'in Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı	104
5.3.1.1 FeB(1)'in ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı.....	104
5.3.1.2 FeB(1)'in görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı	106

5.3.1.3 FeB(1)'in kızılötesi (IR) bölgesindeki kalkanlama performansı	108
5.3.2 FeB(2)'nin Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı	110
5.3.2.1 FeB(2)'nin ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı.....	110
5.3.2.2 FeB(2)'nin görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı	112
5.3.2.3 FeB(2)'nin kızılötesi (IR) bölgesindeki kalkanlama performansı	114
5.3.3 Fe ₂ B(1)'in Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı.....	116
5.3.3.1 Fe ₂ B(1)'in ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı	116
5.3.3.2 Fe ₂ B(1)'in görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı	118
5.3.3.3 Fe ₂ B(1)'in kızılötesi (IR) bölgedeki kalkanlama performansı.....	120
5.3.4 Fe ₂ B(2)'nin Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı.....	122
5.3.4.1 Fe ₂ B(2)'nin ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı	122
5.3.4.2 Fe ₂ B(2)'nin görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı	124
5.3.4.3 Fe ₂ B(2)'nin kızılötesi (IR) bölgesindeki kalkanlama performansı	126
5.3.5 FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1), Fe ₂ B(2) İçin [001] Perspektif Yüzeyindeki SET Performanslarının Karşılaştırılması	128
5.3.6 FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1), Fe ₂ B(2) İçin [010] Perspektif Yüzeyindeki SET Performanslarının Karşılaştırılması	129
5.3.7 FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1), Fe ₂ B(2) İçin [100] Perspektif Yüzeyindeki SET Performanslarının Karşılaştırılması	131
5.3.8 FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1), Fe ₂ B(2) İçin Tüm Durumlardaki SET Performanslarının Karşılaştırılması	132
6. SONUÇ	134
REFERANSLAR	138

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 4.1: FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1), Fe ₂ B(2) Kafes Parametreleri, Birim Hücre Açıları ve Birim Hücre Hacimleri.	64
Tablo 5.1: FeB(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	105
Tablo 5.2: FeB(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	106
Tablo 5.3: FeB(1)'in Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	107
Tablo 5.4: FeB(1)'in Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	108
Tablo 5.5: FeB(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	109
Tablo 5.6: FeB(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	110
Tablo 5.7: FeB(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	111
Tablo 5.8: FeB(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	112
Tablo 5.9: FeB(2)'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	113
Tablo 5.10: FeB(2)'nin Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük Ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	114
Tablo 5.11: FeB(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	115
Tablo 5.12: FeB(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük Ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	116
Tablo 5.13: Fe ₂ B(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı. ...	117
Tablo 5.14: Fe ₂ B(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	118

Tablo 5.15: Fe ₂ B(1)'in Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Performans Aralığı.	119
Tablo 5.16: Fe ₂ B(1)'in Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	120
Tablo 5.17: Fe ₂ B(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	121
Tablo 5.18: Fe ₂ B(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	122
Tablo 5.19: Fe ₂ B(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı. .	123
Tablo 5.20: Fe ₂ B(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük Ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	124
Tablo 5.21: Fe ₂ B(2)'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.....	125
Tablo 5.22: Fe ₂ B(2)'nin Görünür Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	126
Tablo 5.23: Fe ₂ B(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.	127
Tablo 5.24: Fe ₂ B(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE _A , SE _R , SE _T Performansları.	128
Tablo 5.25: FeB(1), FeB(2), Fe ₂ B(1) ve Fe ₂ B(2) İçin Maksimum SE _T Değerleri.	133

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1: Kalınlığı T Olan Bir Duvarın Ekranlama Etkinliği Bileşenleri.	4
Şekil 2.1: Tek Tabakalı Grafinin Şematik Görüntüsü	10
Şekil 2.2: MAX ve MXene Yapıları İle İlgili Raporlanan Çalışmalar	12
Şekil 2.3: Farklı Tipteki Panellerin Üstten Ve Yandan Görünümleri.	14
Şekil 3.1: Elektromanyetik Dalga.....	18
Şekil 3.2: Elektromanyetik Spektrum.....	23
Şekil 3.3: a_1 , a_2 , a_3 Vektörleri İle Tanımlanan İlkel Hücrelerin Oluşturduğu Üç Boyutlu Örgü Yapısı	27
Şekil 3.4: Birim Hücrede Eksen Ve Açılar.....	27
Şekil 3.5: Bravais Örgüleri	28
Şekil 3.6: Kübik Bir Kristalde Bazı Önemli Düzlemlerin Miller İndisleri	29
Şekil 3.7: DFT Hesaplarının Öz-Tutarlı Çözüm Şeması.....	40
Şekil 3.8: Pseudopotansiyel Ve Pseudo Dalga Fonksiyonu Şematik Gösterimi	48
Şekil 3.9: Pseudopotansiyel Üretimini Tarif Eden Akış Diyagramı	49
Şekil 3.10: Ferromanyetik Bir Kristal İçindeki Manyetik Momentler	51
Şekil 3.11: Antiferromanyetik Düzenlerin Şematik Gösterimi.	51
Şekil 3.12: Ferrimanyetik Düzenlerin Şematik Gösterimi.	52
Şekil 3.13: Yasak Enerji Aralıklarına Göre Katıların Sınıflandırılması.....	54
Şekil 3.14: EMI Koruma Mekanizmasının Şematik Gösterimi.....	59
Şekil 4.1: FeB(1) Birim Hücresi.....	65
Şekil 4.2: FeB(1) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.	65

Şekil 4.3: FeB(2) Birim Hücresi.....	66
Şekil 4.4: FeB(2) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.	66
Şekil 4.5: Fe ₂ B(1) Birim Hücresi	67
Şekil 4.6: Fe ₂ B(1) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.	67
Şekil 4.7: Fe ₂ B(2) Birim Hücresi.	68
Şekil 4.8: Fe ₂ B(2) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.	68
Şekil 4.9: MZMC Simülasyonu Akış Şeması.....	73
Şekil 5.1: FeB(1) İçin Kısmı (PDOS) Ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).	78
Şekil 5.2: FeB(1) İçin Elektronik Bant Yapısı.	79
Şekil 5.3: FeB(1)'nin Manyetik Duyarlılığı Ve Curie Sıcaklığı.	80
Şekil 5.4: FeB(2) İçin Kısmı (PDOS) Ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).	81
Şekil 5.5: FeB(2) İçin Elektronik Bant Yapısı.	82
Şekil 5.6: FeB(2)'nin Manyetik Duyarlılığı Ve Curie Sıcaklığı.	83
Şekil 5.7: Fe ₂ B(1) İçin Kısmı (PDOS) Ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).	84
Şekil 5.8: Fe ₂ B(1) İçin Elektronik Bant Yapısı.	85
Şekil 5.9: Fe ₂ B(1)'in Manyetik Duyarlılığı Ve Curie Sıcaklığı.....	86
Şekil 5.10: Fe ₂ B(2) İçin Kısmı (PDOS) Ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).	87
Şekil 5.11: Fe ₂ B(2) İçin Elektronik Bant Yapısı.	88
Şekil 5.12: Fe ₂ B(2)'nin Manyetik Duyarlılığı Ve Curie Sıcaklığı.....	89
Şekil 5.13: FeB(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısmının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.	90
Şekil 5.14: FeB(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısmının (ϵ'') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.	91

Şekil 5.15: FeB(1) için $\alpha(\omega)$, $k(\omega)$, $L(\omega)$ ve $n(\omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.	92
Şekil 5.16: FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.	93
Şekil 5.17: FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (ϵ'') Enerjiye Bağlı Değişimi.	94
Şekil 5.18: FeB(2) İçin $\alpha(\omega)$, $k(\omega)$, $L(\omega)$ Ve $n(\omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.	96
Şekil 5.19: Fe ₂ B(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.	97
Şekil 5.20: Fe ₂ B(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (ϵ'') Enerjiye Bağlı Değişimi.	98
Şekil 5.21: Fe ₂ B(1) İçin $\alpha(\omega)$, $k(\omega)$, $L(\omega)$ Ve $n(\omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.	99
Şekil 5.22: Fe ₂ B(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.	101
Şekil 5.23: Fe ₂ B(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (ϵ'') Enerjiye Bağlı Değişimi.	102
Şekil 5.24: Fe ₂ B(2) İçin $\alpha(\omega)/\text{eV}$ $k(\omega)/\text{eV}$ $L(\omega)/\text{eV}$ $n(\omega)/\text{eV}$ Grafiği.....	103
Şekil 5.25: FeB(1)'in Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	105
Şekil 5.26: FeB(1)'in Görünür Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.....	107
Şekil 5.27: FeB(1)'in Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.....	109
Şekil 5.28: FeB(2)'nin Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	111
Şekil 5.29: FeB(2)'nin Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Etkinliliği.	113
Şekil 5.30: FeB(2)'nin Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.....	115

Şekil 5.31: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.....	117
Şekil 5.32: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Etkinliliği.....	119
Şekil 5.33: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	121
Şekil 5.34: $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	123
Şekil 5.35: $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	125
Şekil 5.36: $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.	127
Şekil 5.37: $\text{FeB}(1)$, $\text{FeB}(2)$, $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Ve $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin $[001]$ İçin Toplam Kalkanlama Performansı.....	129
Şekil 5.38: $\text{FeB}(1)$, $\text{FeB}(2)$, $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Ve $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin $[010]$ İçin Toplam Kalkanlama Performansı.....	130
Şekil 5.39: $\text{FeB}(1)$, $\text{FeB}(2)$, $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Ve $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin $[100]$ İçin Toplam Kalkanlama Performansı.....	131
Şekil 5.40: $\text{FeB}(1)$, $\text{FeB}(2)$, $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Ve $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin $[001]$, $[010]$, $[100]$ Durumlarındaki SE_T Performansları.	132
Şekil 5.41: Polarizasyon Durumlarındaki Maksimum SE_T Değerleri.	133

KISALTMALAR

dB	:	Desibel
DFT	:	Yoğunluk Fonksiyon Teorisi
EMD	:	Elektromanyetik Dalga
EMI	:	Elektromanyetik Girişim
EMR	:	Elektromanyetik Radyasyon
FiM	:	Ferrimanyetik
GGA	:	Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
IR	:	Kızıl Ötesi
MZMC	:	Markov Zinciri Monte Carlo Metodu
nm	:	Nanometre
PDOS	:	Kısmi Durum Yoğunluğu
TDOS	:	Toplam Durum Yoğunluğu
SE _A	:	Soğurmadan Kaynaklı Kalkanlama Etkililiği
SE _R	:	Yansımadan Kaynaklı Kalkanlama Etkililiği
SE _T	:	Toplam Kalkanlama Etkililiği
UV	:	Ultraviyole

SEMBOL LİSTESİ

c	:	Işık Hızı
λ	:	Dalgaboyu
ω	:	Açısal Frekans
ρ	:	Elektron Yoğunluğu
ψ	:	Dalga Fonksiyonu
ε	:	Dielektrik Fonksiyonu
T_c	:	Curie Sıcaklığı
$\hat{H}$	:	Hamiltoniyen Operatörü
$\hbar$	:	İndirgenmiş Planck Sabiti
$n(\omega)$	:	Kırılma İndisi
$k(\omega)$	:	Sönümleme Katsayısı
$\alpha(\omega)$	:	Soğurma Katsayısı
$R(\omega)$	:	Yansıma Değeri
$L(\omega)$	:	Enerji Kayıp Fonksiyonu
E_0	:	Temel Durum Enerjisi
E_{HF}	:	Hartree-Fock Enerjisi
E_{XC}	:	Değiş-Tokuş Kolerasyon Enerjisi
J_{ij}	:	Takas Sabiti

1. GİRİŞ VE AMAÇ

1.1 GİRİŞ

Bir kaynaktan dalga ya da parçacık halinde yayımlanan enerjiye radyasyon denir. Belirli bir kütle ve enerjiye sahip, hızla hareket edebilen, alfa, beta ve nötron radyasyonları gibi parçacık ya da elektromanyetik dalga formunda olabilen iyonizan radyasyon, karşılaştığı atomu etkileyerek çekirdek ya da yörüngeleri ile tepkimeye giren yüksek enerjili radyasyon çeşididir. Kütsüz radyasyon çeşidi olan gama ve X ışınları ise elektromanyetik dalga formuna sahiplerdir. Diğer bir radyasyon türü ise, elektromanyetik dalga formunda olan ve karşılaştıkları atomların çekirdek ve yörüngelerinde herhangi bir değişikliğe neden olmayan düşük enerjili noniyonizan radyasyondur. Bu radyasyon türünün en bilinen örnekleri radio dalgaları, kızıl ötesi dalgalar, mor ötesi ışık ve mikrodalgalar [1, 2].

Elektromanyetik kirliliği (radyasyonu) oluşturan ve ayrı ayrı ölçülebilen iki temel bileşen elektrik alan ve manyetik alandır [3].

Elektrikle çalışan tüm cihazlar, akım taşıyan iletkenler, yüksek gerilim hatları, radyo-TV vericileri, mikro dalga fırınlar, Wi-Fi erişim sistemleri, tasarruflu ampuller, endüstriyel ve tıbbi tanılama amacı ile kullanılan cihazlar başlıca elektromanyetik alan kaynaklarıdır. Tüm bu cihazların yanı sıra özellikle 1990'lerden başlayarak hızla yaygınlaşmış olan kablosuz telekomünikasyon sistemleri şehirlerde ve hatta kırsal kesimlerde bile elektromanyetik kirlilikte büyük bir artışa neden olmuştur [4, 5].

Günlük hayatta maruz kalınan ve sağlığımızı etkileyen elektromanyetik radyasyon (EMR) iki farklı frekans bandından oluşur. Bunlar genellikle 300 Hz'e kadar frekansa sahip olan, zamana göre değişen; elektrikli cihazlar, yüksek gerilim hatları ve trafolar tarafından üretilen çok düşük frekanslı (ELF) band ve baz istasyonları, cep telefonları, radyo ve TV vericilerinden kaynaklanan 3 kHz'den 300 GHz'e kadar yüksek frekansa sahip radyo frekansı (RF) ile mikrodalgadır (MW) [3, 5, 6].

Doku yüzeyine çarpan elektromanyetik dalganın (EMW) bir kısmı yansırken bir kısmı da vücut tarafından emilir. Dokunun elektriksel özelliklerine bağlı olarak değişen EMW'nin hızı ve dalga boyu nedeni ile dokuda moleküler hareket ve sürtünmeden kaynaklı termal etki meydana getirir. Dokunun bu ısı etkisine uzun süre maruz kalması dokuda hasara neden olur. Dalganın alan kuvvetinin dokuda ısı meydana getirebilecek sürtünmeyi yaratamaması

durumunda ise iyonlar, moleküler dipoller, kolloid parçacıklar gibi sürekli elektrik alan içerisinde hareketli halde bulunan yükler de termal olmayan etkilere maruz kalır. Organizmanın özelliğine bağlı olarak termal olmayan etkiler, termal etkilerden daha güçlü olabilirler [6]. Elektromanyetik alanların stres, uykusuzluk, migren, cilt problemleri, hafıza kaybı, kilo alımı gibi kısa sürede hissedilen etkilerinin yanı sıra; uzun süre maruz kalınmasının moleküler ve kimyasal bağlar, hücre yapısı ve immün sistem üzerindeki etkileri neticesinde lösemi, beyin tümörü, kalp rahatsızlıkları, Parkinson, Alzheimer, kanser, hamilelikte düşük riskinin artması gibi rahatsızlıklara neden olduğu birçok bilimsel araştırma ile kanıtlanmıştır [19] [7]. Ekim 2001’de IARC (Uluslararası Kanser Araştırma Ajansı) ELF manyetik alanları 2B sınıfı kanserojen etken olarak tanımlamış, yine Dünya Sağlık Örgütü (WHO) 2004’de ELF manyetik alanlarının çocuk lösemisini 2 kat arttırdığını duyurmuştur [3].

Kalkanlama materyalleri üzerine yapılan çalışmalar farklı sektörlerin (eğitim, inşaat, tekstil vb.) özel kullanım amaçlarına göre çeşitlilik göstermektedir. Belirli bir EM dalga aralığına ait dalgalardan arındırılmış olan laboratuvarlarda ölçüm üzerindeki hatayı azaltmak için kalkanlama yapılmış olan güvenli bölgeler oluşturmak gerekmektedir. Bu özellikleri sağlayacak kalkanlama materyalleri geliştirmek için çalışmalar devam etmektedir [8, 9].

“Elektrosmog” olarak da isimlendirilen ve yaygın bir sosyal sorun haline gelen elektromanyetik kirlilik, sadece sağlığımızı tehdit etmekle kalmayıp aynı zamanda akıllı cihazların çalışmasına verdiği olumsuzluklar nedeni ile de son yıllarda en hızlı artan insan kaynaklı çevresel mağduriyettir [5, 7, 10, 11]. Nesneler interneti (IoT) ve 5G gibi teknolojiler nedeni ile eklenen yeni radyo frekansları bu kirliliği daha da hızlı bir şekilde arttırmaya devam etmektedir [10]. Ayrıca elektromanyetik kirlilik çeşitli kaynaklardan yayılarak istemsiz ve irademiz dışında yaşam ortamlarımızda sürekli olarak varlığını sürdürmektedir [3].

Tüm dünyada ciddi bir probleme dönüşen elektromanyetik kirlilik ile başa çıkabilmek EMI kalkanlama malzemelerinin kullanılması ile mümkün olabilir [12]. Elektromanyetik kirliliğe uzun süreli maruz kalmanın canlılar için oluşturacağı riskleri ortadan kaldırabilmek ve hassas sistemlerin bu dalgaların neden olabileceği parazitlerden etkilenmeyeceği izole edilmiş bölgelere ihtiyaç vardır. Elektromanyetik dalgaların geçişini yüksek oranda engelleyebilen malzemeler için “elektromanyetik kalkan” terimi kullanılır [13].

Elektromanyetik alanın nüfuziyetini sınırlamak amacı ile iki ortamın birbirinden izole edilmesi “kalkanlama” ya da elektrik-elektronik mühendisliğinde sıkça kullanıldığı haliyle “ekranlama” olarak tanımlanır [7].

Kalkanlanması (izole edilmesi) istenen alan kalkanlama malzemeleri ile tamamen kaplanarak ortamın elektromanyetik dalga ile iletişimi kesilmektedir. Kalkanlama işlemi stratejik öneme sahip kapalı alanlar, uzaktan müdahalenin engellenerek veri güvenliğinin sağlanması gereken bilgi işlem merkezleri, askeri uygulamalar, elektromanyetik dalgalara karşı hassasiyet taşıyabilecek hastaların bulunduğu hastane ortamları, elektronik cihazların parazitlenmesini engellemenin önemli olduğu hassas ekipman kasaları gibi elektromanyetik radyasyondan etkilenecek yerlerde karşımıza çıkmaktadır [13].

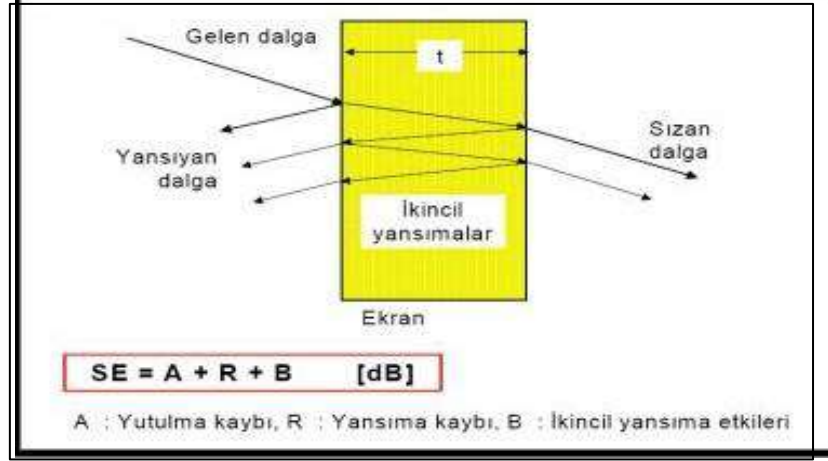
Kalkan olarak kullanılan iletken malzemenin yüzeyinden yansıtma ve saçılma özellikleri kullanılarak geri yansıtılması ve bu dalgaların soğularak malzeme içerisinde hapsedilmesi elektromanyetik kalkanlama stratejileridir. Elektromanyetik dalganın dışarıdan-içeriye ve içeriden-dışarıya nüfuziyetinin kısıtlanması ilkesine göre çalışırlar [13]. Elektromanyetik kirliliği azaltmak için yansıma ve çoklu yansıtma ilkesinden ziyade dalganın soğurulması daha sürdürülebilir strateji olarak kabul edilir [11].

Kaçak alanların azaltılması amacı ile kullanılan ekranlamanın ne kadar etkili olduğunu ekranlama etkinliği (EE) veya shielding efficiency (SE) parametreleri ile belirtilir ve birim olarak desibel (dB) kullanılır [7]. Ekranlama etkinliğini gösteren logaritmik bir değer olan SE frekans ile değişmektedir [14].

Ekranlama etkinliği Eşitlik 1.1’de gösterilen formül ile hesaplanır.

$$SE_{dB} = 10 \log_{10} \left(\frac{E_{ekransız}}{E_{ekranlı}} \right) \quad (1.1)$$

Ekranlamanın olmadığı durumun (ekransız) ve ekranlamanın yapıldığı durumun (ekranlı) oranını alırken aynı noktadan ölçülen elektrik alan genliği kullanılır. Formülden de anlaşılacağı üzere ekranlama etkinliğinin iyi olması pozitif yüksek SE değerinden anlaşılacağı gibi negatif değerlikli SE ise ekranlanması istenen sinyalin daha da yükselerek çınlama etkisi yaratacağı anlamına gelir [7].



Şekil 1.1: Kalınlığı t Olan Bir Duvarda Ekranlama Etkinliği Bileşenleri [7].

Şekil de gösterildiği üzere t kalınlıklı kayıplı bir duvarda manyetik dalgalar yansıma, yutulma ve ardışıl yansımalar şeklinde kayba uğrarlar. Ekranlamanın etkililiği dalga frekansına, elektromanyetik dalgayı yayan kaynağın gücüne ve ekranlama için kullanılan malzemenin özelliklerine bağlıdır. 30 MHz den daha düşük frekanslarda önemli hale gelen manyetik ekranlamada ki zayıflama dalga frekansı ile azaldığı için ekran katmanı içindeki direncin olabildiğince düşük tutulması önemlidir. 30 MHz den daha büyük olan frekanslarda önemli hale gelen elektriksel alanın ekranlanmasında ise katmandan geçirilmesi esnasında ortaya çıkabilecek açıklıklar ve delikler frekansa bağlı olarak ekranlama kalitesini etkilemektedir. Dalgaların malzemeye olan nüfuzunu minimize etme amacı ile yapılan ekranlamada kullanılacak olan malzemelerin yüksek elektriksel iletkenliğe sahip olması gerekir [7].

Ortalama ekranlama etkinliği değerinin 30 dB olması yeterli görülmekle birlikte, uygulamada 40 dB üzerindeki ekranlama etkililiğinin elektromanyetik radyasyonun neden olduğu buzucu etkiden kurtulmak için yeterli görülmüştür. Ancak özel uygulama alanları olan telefon kabloları için bu değer 80-90 dB, askeri sistemler için ise 100-120 dB' e kadar çıkabilmektedir. Elektromanyetik kalkanlamada kullanılan malzemeler; 80-120 dB ekranlama etkinliğine sahip (çelik, bakır, paslanmaz çelik gibi malzemelerden yapılmış ve tamamen metal kaplı malzemeler) yüksek performanslı malzemeler, 20-40 dB ekranlama etkinliğine sahip (iletken metal tabakalar ya da metal parçacıklı plastikler) standart performanslı malzemeler ve 15-30 dB ekranlama etkinliğine sahip (metalleştirilmiş kumaş yapılar, iletken kâğıt malzemeler, iletken polimerler) zayıf performanslı malzemeler olarak sıralanabilir. Ekranlama performansı, kullanılan malzemenin cinsine, kalkan oluştururken

malzemelerin birbirleriyle birleřtilirme řekline ve elektromanyetik dalganın frekansına baęlı olarak deęiřiklik gsterir [15].

300 MHz'den byk yksek frekanslarda iyi elektrik iletme zellięindeki malzemeler elektromanyetik kalkan davranıřı sergilerler. Uygulamada yksek iletkenlięe sahip malzemeler elektrik bileřeni (E) ve manyetik bileřeni (H) eř zamanlı olarak azaltırlar. Ancak frekansın 30 MHz'den kk olduęu durumlarda ise manyetik bileřenin (H) azaltılması yalnızca ferro-manyetik malzemelerin kullanımı ile yapılabilmektedir [16]. Sadece elektrik bileřeninin (E) azaltılmasının yeterli olduęu uygulamalarda, kalkanlama iřlemi iin yksek iletkenlikteki bir katman kullanmak yeterli olabilmektedir. Hatta ince bir metal perde grevi gren alminyum folyo bile bazen gerekli elektriksel ekranlamayı saęlayabilir. Manyetik ekranlama ise ferro-manyetik malzemelerden oluřturulan filtreler ile saęlanabilir [7].

Koruyucu muhafazaların yapımında yaygın olarak mu-metal, pirin, alminyum, gmř, nikel, paslanmaz elik, metalize plastikler ve iletken karbon/grafit kompozitler kullanılmıřtır. Elektriksel dielektrik sabitinin (permittivite) ve manyetik geirgenlik (permeabilite) deęerlerinin elektromanyetik kalkanlamadaki etkilerini gz nne alırsak, iletkenlik deęeri yksek olan metaller, karbon trevleri, iletken polimerler, polimer kompozitler ve yksek permeabilite deęerine sahip manyetik malzemeler elektromanyetik kalkanlama malzemesi olarak kullanılmaya uygun adaylardır. Metaller ve karbon trevleri iyi kalkanlama performansları nedeniyle iletken polimer kompozitler ise dřk maliyetleri, kolay iřlenebilmeleri ve fiziksel avantajları nedeni ile ne ıkmaktadır. Ancak bu malzemelerin kırılganlık, dřk darbe direnci, korozyon gibi sınırlılıkları vardır [13, 17].

Birok uygulamada elektrięi ve ısıyı ok iyi iletmeleri nedeni ile metaller kullanılır. Elektrikli cihazlarda ve yksek hızlara sahip ekipmanlarda biriken statik elektrik metal paraların topraklanması ile nlenir. Yksek frekanslı elektromanyetik radyasyonun ekipmanlardan kaması ve bařıboř radyasyondan ekipmanların korunması iin de metal kalkanlar ve kapaklar kullanılır [18]. İletkenlięi 5.7×10^7 S/m olan 2 mm kalınlıęındaki bakır levha frekansı 100 MHz olan elektromanyetik dalga iin; malzeme ierisinde gerekleřen absorma kaynaklı kalkanlama (SE_A) performansı 66 dB, malzeme yzeyinde gerekleřen ve yansımadan dolayı meydana gelen kalkanlama (SE_R) performansı 88 dB, toplam kalkanlama etkinlięi (SE_T) performansı da 154 dB olarak llmřtr. Bu deęerler MHz ve GHz seviyesinde kalkanlama yapılması istenen birok endstriyel uygulamada kabul edilebilir

kalkanlama performansı sınırı olan 20 dB'in oldukça üzerindedir. Yüksek iletkenliğe sahip gümüş ve bakır için yansıma mekanizmasının etkili olduğu kalkanlama mekanizmasının, yüksek permeabilite değerine sahip nikel için ise absorplama mekanizmasının kalkanlama mekanizmasında daha etkin olduğu anlaşılmaktadır [13].

Metaller yüksek kalkanlama etkinliğine sahip olsalarda, yoğunlukları, uygulama zorlukları, yüksek maliyetleri, oksidasyona yatkın olmaları gibi dezavantajlarından dolayı endüstriyel uygulamalarda ve bilimsel çalışmalarda kalkanlama malzemesi olarak tercih edilmezler [17].

Alüminyum, bakır veya gümüşün polimer matrislerin içerisine gömülmesi ile elde edilen ince metal folyolar topraklama için revaçta olmakla birlikte bu malzemelerin koruma kapasiteleri folyoyu oluşturan malzemeye, kalınlığa ve topraklama düzeneğinin etkinliğine bağlıdır. Plastik muhafazalar EMI'yi yansıtmayan veya soğurmeyen doğal malzemeler olduğu için, termoplastikler tarafından engellenemeyen enerji dalgaları girişim sorunlarına neden olur. Elektromekanik kalkanmada kullanılabilmesi için plastik yüzeylerin folyo laminatlar ve bantlar, iyon kaplama, vakum metalleştirme, çinko alev püskürtme, çinko ark püskürtme, katot püskürtme, iletken boyalar, akımsız kaplama gibi teknikler kullanılarak metalleştirilmesinin ek yüzey hazırlığı ve özel ekipman gereksinimi gibi deavantajları bulunmaktadır. Bu nedenle plastiklerin iletken ile kaplanması, iletken dolgu maddeleri ile plastiğin birleştirilmesi ve kendinden iletken polimerler (ICP) yaklaşımları geliştirilerek EMI'den korunmaya çalışılmıştır [17].

1.2 PROBLEM TANIMI VE ÇÖZÜM

Elektromanyetik kalkanlama etkililiğinin (SE) mekanizması kalkan görevi gören malzemeye nüfuz eden elektromanyetik dalganın yansıtılması, soğurulması ve ikincil yansımaya (çoklu iç yansıma) maruz bırakılması üzerine kuruludur. FeB ve Fe₂B nano parçacıklar kullanılarak elde edilen tek katmanlı kristal örgü yapısı aşağıda belirtilen özellikleri göstermelidir.

1- Bor tabanına katkılanmış olan Fe sayesinde malzemenin elektriksel iletkenliği arttırılarak kalkanlama malzemesi olarak kullanılacak malzemelerde ki gerekli olan elektrikse iletkenlik seviyesine ulaşılabilir.

2- FeB ve Fe₂B nano parçacıkları atomik morfolojileri gereği ferromanyetik özellikte de yüksek performanslı manyetik doygunluğa sahiptir.

3- MBene üyesi olan FeB ve Fe₂B kullanılarak elde edilen film yapılı malzemeler yapısal ve optik özellikleri gereği EM spektrumun belirli bir bölgesi için elektromanyetik radyasyonun kalkanlanması için kullanılabilir.

FeB ve Fe₂B için yürütülecek olan bu araştırmada ab-initio yöntemler benimsenerek malzemelerin yapısal ve optik özelliklerinin belirlenmesi kalkanlama etkililiğinin ölçülmesi için gereklidir.

1.3 TEZİN KATKISI

Bu tez çalışmasından elde edilecek teorik bilgiler sayesinde FeB ve Fe₂B nano parçacıkların yapısal ve optik özelliklerinin yanı sıra geniş bir EM spektrum aralığında ki elektromanyetik radyasyonu kalkanlama kabiliyetleri literatüre kazandırılacaktır. Bu sayede MXene ailesinin en yeni üyesi olan MBene üzerine yürütülecek olan deneysel çalışmaların daha etkili, ucuz ve bilinçli yürütebilmesine katkı sağlanmış olacaktır.

1.4 TEZİN AMACI

Bu tez çalışmasında, MXene/MBene yapısındaki Fe_xB ailesinin üyeleri olan FeB ve Fe₂B nano parçacıklar kullanılarak elde edilmiş olan tek katmanlı, 2D film yapılı malzemelerin elektromanyetik kalkanlama etkililiği (SE), elektromanyetik radyasyonun malzeme ile nüfuz ettiği [001], [010] ve [100] perspektif yüzeyleri için ayrı ayrı hesaplanacaktır. Tek katmanlı FeB ve Fe₂B film yapılı malzemelerin yapısal, elektriksel, manyetik ve optik özellikleri ab-initio yöntemlerle kuantum mekaniksel tabanlı Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) kapsamında PAW pseudo potansiyelleri ve Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanılarak geniş EM spektrumda incelenecektir. Böylece Fe_xB yüzey tipi nano malzemeler için EMI zırlama etkinlikleri geniş bir spektrumda teorik olarak belirlenmiş olacaktır.

2. LİTERATÜR TARAMASI

2.1 GEÇMİŞ ÇALIŞMALAR

Literatüre bakıldığında elektromanyetik kalkanlama ile ilgili çalışmalarda başta karbon malzemeler olmak üzere, metaller, iletken polimerler ve iletken polimer kompozitlerin (İPK) sıklıkla kullanıldığı görülmektedir.

Elektriksel dielektrik sabitinin (permittivite) ϵ ve manyetik geçirgenlik (permeabilite) μ değerlerinin elektromanyetik kalkanlamadaki etkilerini göz önüne alırsak, iletkenlik değeri yüksek olan metaller, karbon türevleri, iletken polimerler, polimer kompozitler ve yüksek permeabilite değerine sahip manyetik malzemeler elektromanyetik kalkanlama malzemesi olarak kullanılmaya uygun adaylardır. Metaller ve karbon türevleri iyi kalkanlama performansları nedeniyle iletken polimer kompozitler ise düşük maliyetleri, kolay işlenebilmeleri ve fiziksel avantajları nedeni ile öne çıkmaktadır [13].

Nanokompozit malzemeler hafif ve esnek olmaları, korozyona dayanıklılıkları, kolay uygulanabilir yapıda olmaları gibi avantajlarından dolayı kalkanlama malzemesi olarak metallerin önüne geçerek kalkanlamada kullanılan popüler malzemeler olmuşlardır [19].

Karbon türevleri olan karbon siyahı, karbon elyafı, grafit ve grafenin kolay işlenebilir olması, düşük yoğunlukları, ucuz olmaları ve korozyondan etkilenmemeleri gibi avantajları nedeniyle elektromanyetik kalkanlama için uygun adaylar olarak görülmüşlerdir. Ancak grafit ve bazı grafit türevleri haricindeki malzemelerin dış etkenlere dayanımlarının sağlanabilmesi için taşıyıcı bir faz ya da bağlayıcıya ihtiyaç duymaları bilimsel araştırmalar ve endüstriyel uygulamalardaki ilerleyişlerini durdurmuştur [13].

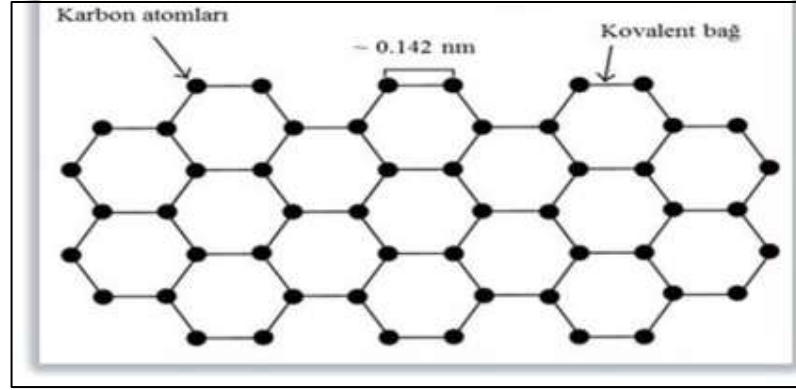
EMI için önemli olan fiziksel niceliklerin kontrol edilebilmesi için geçiş elementlerinin katkılındığı ya da kompozit hale getirildiği yapılar önemli yere sahiptir. Bununla birlikte EMI verimliliği ölçümü de kalkanlama kabiliyetini belirten önemli parametrelerden biridir. Özellikle geçiş elementlerinden olan demirin, Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , karbonil demir, FeO gibi bileşenlerinin biyouyumluluk ve biyobozunurluk özellikleri sebebi ile su tedavileri, kataliz ve EMI kalkanlaması gibi tıp, ilaç, elektronik, enerji ve araştırma alanlarındaki çeşitli uygulamaları sebebiyle son birkaç yıldır araştırmacıların ilgisini çekmektedir [20].

Son yıllarda konuyla ilgili çalışmalarda polimer kompozit esaslı malzemelerin kullanımı oldukça artmış, özellikle İPK'ların düşük yoğunluk, yüksek fiziksel ve kimyasal kararlılıkları, düşük maliyetleri ve seri üretime uygunlukları gibi avantajlarından dolayı diğer alternatiflerden daha ön plana çıktığı görülmektedir. Etkin kalkanlama yapabilmesi için yüksek elektriksel geçirgenliğe sahip polimer kompozitlerin geliştirilmesine ihtiyaç duyulmuştur. Polimer faza iletken dolgunun yüksek oranda kullanılması yüksek iletkenliğe sahip polimer kompozit elde etmemizi sağlasa da bu dolgu malzemesinin artması beraberinde kompozit malzemenin kırılabilirliğinin artması, darbe dayanımının kötüleşmesi, zor işlenebilirlik gibi dezavantajlara neden olur. Bu nedenle literatürde çalışmalar en az dolgu malzemesi kullanılarak en yüksek iletkenliğin yakalanması üzerine yoğunlaşmıştır. Bununla birlikte düşük maliyet, geniş frekans aralığında düşük kalınlıkta yüksek kalkanlama performansının elde edilebilmesi, kolay işlenebilir olması, fiziksel ve kimyasal kararlılığının uzun süre korunabilmesi gibi özellikler malzemenin endüstriyel olarak tercih edilebilirliğini etkileyen unsurlar olduğu için çalışmalardaki kısıtlar olarak karşımıza çıkmaktadır [13].

Monomerlerin ard arda dizilmesi ile oluşturulan uzun zincirli yapıdaki polimerler pek çok alanda kullanıldığı gibi elektronik parçaların iç kısımlarında da sıklıkla kullanılır. Plastik yüzeyi iletken bir malzeme ile kaplayarak elde edilen ve polimer gövdenin iletken dolgu malzemesi ile katkılandırılması yöntemleri ile elde edilmiş olan kompozit malzemelerin ekranlamada kullanımı oldukça yaygındır. Bakır veya nikel gibi uygun bir metallerin çok küçük partikülleri ile yüklenerek taşıyıcılığı artırılmış olan metalik mürekkebin plastik muhafazaya sahip elektronik aletlerde muhafazanın iç yüzeyine püskürtülerek kaplanması ile elde edilen sürekli iletken tabaka sayesinde etkili bir kalkanlama sağlanabilmektedir. Yükün dağıtılması ve elektromanyetik enerjinin ekranlanması amacıyla termoplastik malzeme kullanımı da yaygındır [21, 22].

Grafitin elektronik davranışlarını Philips Wallace'ın 1947 yılında araştırmasından sonra [23] termodinamik kararsızlığı nedeni ile sentezlenemeyeceği inancına rağmen Kostya S. Novoselov ve Andre Geim tarafından 2004'te tek tabaka halinde sentezlenebilmiş olan grafen sergilediği fiziksel ve kimyasal özellikleri sayesinde dikkat çekicidir. 0.42 nm kalınlığındaki grafen çelikten 100 kat daha güçlü olmakla birlikte bükülebilir, esnetilebilir, şeffaf ve hafiftir. Grafen üzerinde gözlemlenen kuantumsal olgular (kütlesiz Dirac fermiyonları, anormal kuantum hall etkisi, Klein paradoksu gibi) malzemeyi daha da ilgi

çekici hale getirmiş ve bilim camiasında çığır açmasını sağlamıştır [24]. Şekil 2.1’de tek tabakalı grafenin şematik görüntüsü verilmiştir.



Şekil 2.1: Tek Tabakalı Grafenin Şematik Görüntüsü [25].

Düzlemsel 2D tek tabakalı sp^2 -bağlı karbon atomlarından oluşan bal peteği kafes yapısına sahip grafen grafit, karbon nanotüp ve fullerenin yapı taşı olup genellikle 8 ve daha fazla tabakanın üst üste getirilmesi ile 3D grafit yapı da oluşturulabilmektedir. Aralarında 0.335 nm mesafe bulunan bu tabakalar arasında van der Waals etkileşimleri de gözlemlenmektedir [26].

Elektronik cihazlarda kullanılan yarıiletken malzemeler (silikon gibi) ile kıyaslandığında, grafenin imkân verdiği yük hareketliliği, ısıya ve mekanik etkilere karşı dayanıklılığı çok daha üstündür. $15000\text{cm}^2/\text{Vs}$ gibi yüksek kapasitedeki yük taşıyıcılık mobilitesi, 750C° - 2000C° arasındaki yüksek sıcaklık direnci, 5000 W/mK değerindeki yüksek termal iletkenliği ve yüksek gerilme direnci grafenin önde gelen üstünlüklerindendir [27]. Bu üstünlükler grafenin birçok alanda kullanılmaya başlamasına ve teknolojik ilerlemeye katkı sağlamasına neden olmuştur. Grafenin bu başarısı aynı zamanda akıllı malzemeler ve iki boyutlu tek tabakalı malzemelerin de önün açarak yeni malzemelerin keşfine zemin hazırlamıştır. Bu malzemelerin en dikkat çekenlerinin başında siyah fosforen [28] ve VA grup elementlerinin [29] oluşturduğu yapılar gelmektedir.

Grafenin düz yapısı ve büyük yüzey alanına sahip yapıları ile elektronik, manyetik, optik, optoelektronik, termoelektrik, katalizör ve enerji depolama sistemlerindeki umut vadeden uygulamaları nedeni ile grafene olan aşırı ilgi son yıllarda iki boyutlu (2D) malzemelere olan ilgiyi ve merakı iyice artırmıştır. 2D malzemelerin keşfi ve üretim sürecinin en ilgi çekici

eklemeleri geçiş metali karbürleri, nitrürler ve karbonitrür yapıları (yani MXene'ler) dir [30, 31].

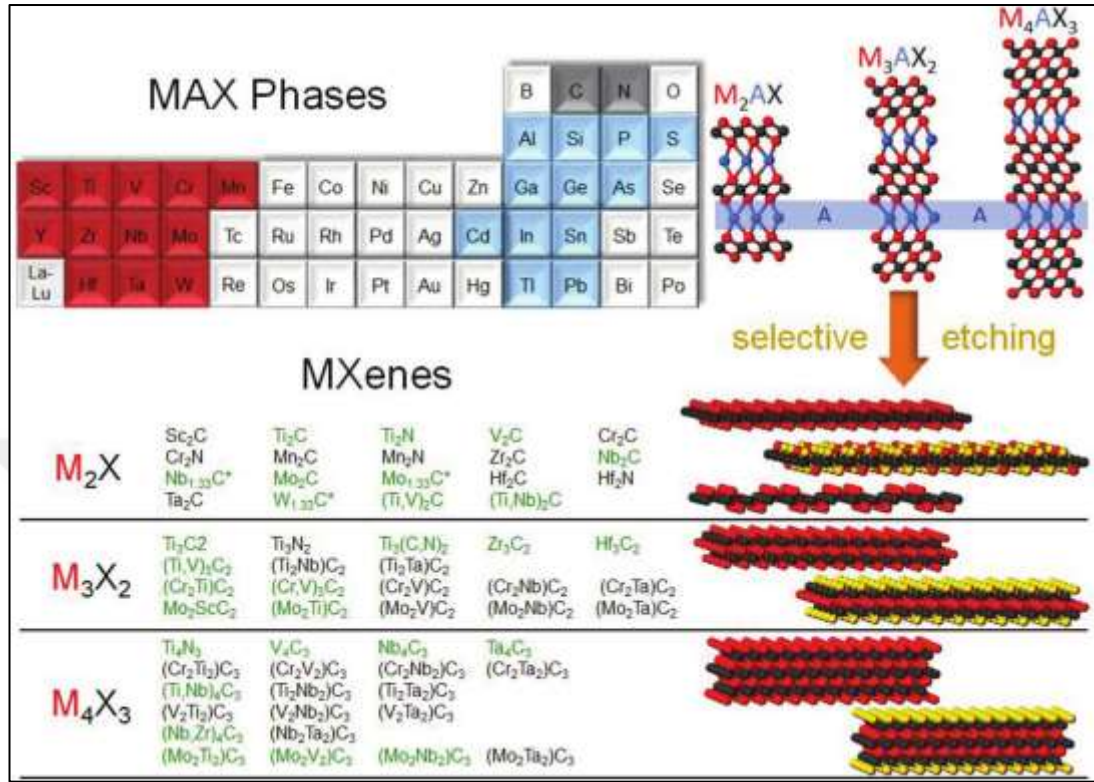
İki boyutlu malzeme sınıfına ait olan MXene'ler (geçiş metali karbür, nitrür veya karbonitrür) geniş yelpazedeki uygulama alanları sebebi ile son yıllarda dikkat çekmektedirler. İlk kez Naguib ve arkadaşları tarafından 2011 yılında yapılan çalışma da [32] geçiş metali karbür (MXene) yapısı olan Ti_3C_2 , P63/mmc uzay grubunda bulunan katmanlı altıgen üçlü karbürün oda sıcaklığında sulu hidroflorik asit kullanılmasıyla Ti_3AlC_2 'den Al atomlarının seçici olarak aşındırılması ile sentezlemiştir.

MAX fazlarının toplu katmanlı ebeveynlerinden seçici olarak aşındırılması ile elde edilen atomik katmanlı MXene'lerin şu ana kadar teorik olarak 70'den fazla olduğu tahmin edilmekle birlikte 19 tanesi deneysel olarak sentezlenebilmiştir. Bileşimlerine göre adlandırılan MAX fazlarında; M bir geçiş metali, A çoğunlukla 3A ve 4A sütunlarında bulunan bir element X ise karbon (C) veya nitrojen (N) dir [33, 34]. Devam eden çalışmalar sonucunda X'in diğer elementleri de içine alacak şekilde genişleyerek MXene çeşitliliğinin daha da artması muhtemeldir.

MAX fazlarının seçici olarak aşındırılması ile elde edilen geçiş metali karbür, nitrür veya karbonitrür yapıları $M_{n+1}X_n$ ($n=1-3$) genel kimyasal formülüne sahiptirler. M bir (Sc, Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta... gibi) geçiş metali, X ise karbon (C) veya azot (N) atomlarını temsil etmektedir. MXene'ler 1 nanometreden daha küçük atomik tabakadan oluşabileceği gibi birden fazla tabakanın oluşturduğu yığının yanal boyutu mikrometreler seviyesine kadar çıkabilmektedir. Özünde iletken kil gibi davranan MXene yapılar geçiş metali karbürlerin/nitrürlerin metalik iletkenliği ile hidroksil/oksijen/fluor sonlu yüzeylerin hidrofilik yapısını benzersiz bir şekilde birleştirir. Oksijen (O), hidroksik (OH), flor (F) termine grupları (T) ile sonlandırılan yüzey fonksiyonel grupları da dahil edildiğinde $M_{n+1}X_nT_x$ şeklinde formüle edilen yapılar geçiş metallerinin elektriksel iletkenlik gibi üstün özelliklerini karbon, nitrür ve karbonitrürler gibi büyük gruplara taşıyarak fonksiyonel sonlandırma grupları ile hidrofilik özelliğin ortaya çıkmasını sağlarlar [24].

Yüksek kimyasal kararlılık, yüksek elektrik iletkenliği ve çevre dostu olması gibi özellikler barındıran MXene'ler titanyum karbürün (Ti_3C_2) keşfinden günümüze kadar hızla ilgi odağı haline gelmiş ve fizik, nanotıp, çevre bilimi, enerji gibi birçok uygulama alanı bulmuştur.

Teorik olarak 100'den fazla MXene yapı sentezlenerek 30'dan fazlası deneysel olarak sentezlenebilmiş ve hala çalışmalar devam etmektedir.



Şekil 2.2: MAX Ve MXene Yapıları İle İlgili Raporlanan Çalışmalar [35].

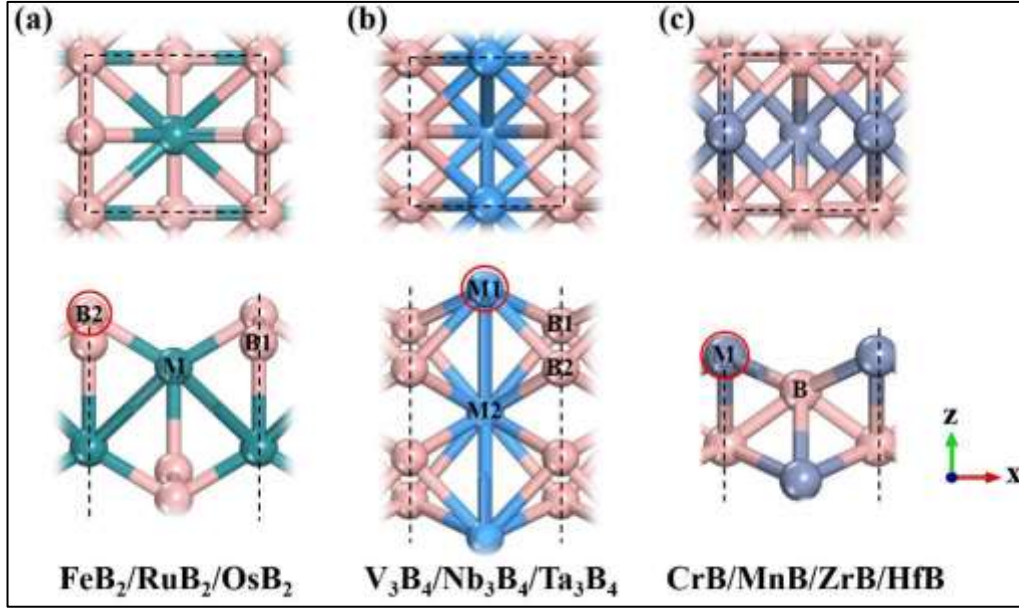
Şekil 2.2’de gösterildiği üzere kırmızı ile gösterilen 12 geçiş metali, mavi ile gösterilen 12 grup A elementi ve siyah ile gösterilen 2 tane X elementinin kombinasyonlarının ile elde edilen M₂AX, M₃AX₂ veya M₄AX₃ yapılarına sahip 100’e yakın MAX fazının olduğu raporlanmıştır. Yeşil ile gösterilen MXene yapıları ise MAX fazlarından A katmanının seçici olarak aşındırılması ile deneysel olarak sentezlenebilmişlerdir. Bunlardan çok daha fazlası ise teorik olarak tahmin edilebilmiştir [24].

Hidrofilik yapısı, geniş özgül alanı ve bol miktardaki aktif yüzeyi ile MXene’lerin radyonüklidler dahil çeşitli çevresel kirleticileri absorbe edebilme yeteneğine sahip olduğunu yapılan araştırmalar ile ortaya konulmuştur [36].

MAB fazlarındaki A atom katmanlarının (A çoğu zaman alüminyumdur) seçici olarak çıkarılması ile elde edilebilen MBene’lerin tamamı elektron transfer verimliliği yüksek iyi metalik özellik sergilemektedirler. MBene yapısında ki M bir geçiş metalini B ise borunu temsil etmektedir [31].

Malzeme sentez yöntemlerinin de gelişmesi ve rasyonel tasarımlar sonucunda gün geçtikçe yüksek verimliliğe sahip katalizörlerin tasarlanabilmektedir. Bu çalışmalar arasında tek atomlu katalizörler (SAC'ler), tek metal atomları ve desteklerin koordinasyon türleri arasındaki güçlü etkileşim ve büyük yük aktarımından kaynaklanan benzersiz elektronik yapı nedeniyle büyük ilgi görmüşlerdir. Benzersiz elektronik yapısal özelliklere sahip SAC'ler tamamen açığa çıkmış ve dağılmış aktif bölgelere sahip olmaları nedeniyle de çeşitli reaksiyonlardaki katalitik performansları ile dikkate değer artışlar sergilemektedirler [31, 37].

MXene sonrası malzemeler olan MBene'ler azot ve karbon yerine boru kullanan malzemelerdir. 2 boyutlu (2D) geçiş metali borürleri üçlü borür grubundan elde edilebildiği için MBenes olarak adlandırılmaktadır. MBene'ler borun 2D malzemelerin performanslarındaki rolünü keşfetme fırsatı sunmaktadırlar. Periyodik tablonun beşinci elementi olan borun değerlik elektron sayısı karbondan bir azottan ise iki azdır. Atom boyu, elektronegatifliği ve elektron eksikliği nedeniyle içerisinde bor bulunan 2D malzemeleri diğer 2D malzemelere göre belirgin şekilde farklı özellikler göstermektedir. 2D malzemelerin çoğu düz veya bükülmüş petek yapılı grafen analoglar iken borofen altıgen delik düzenlemelere sahip üçgen bir kafes yapısına sahiptir [30, 38]. Ancak borun bu altıgen delik girişleri ve metal alt tabakanın pasifleşmesinde çözülebilen fazla elektron dengesi bor bazlı 2D malzemelerin sentezindeki en büyük zorluğa neden olmaktadır. 2D bor bazlı sistemleri elde etmenin pratik bir yolu bor ve çeşitli geçiş metallerinden birinin kullanılmasıdır. Bu durumda geçiş metal, bor tabakasını stabilize etmek için bora elektron verirken, aynı zamanda geçiş metali merkezi koordineli bir şekilde 2D borür malzemelerin çeşitliliğine katkı sağlamış olur [30].



Şekil 2.3: Farklı Tipteki Panellerin Üstten (Üstteki Üç Şekil) ve Yandan (Altteki Üç Şekil) Görünümleri [39].

Şekil 2.3’de gösterilmiş olan MBene yapıları; (a) FeB_2 , OsB_2 , RuB_2 , (b) V_3B_4 , Nb_3B_4 , Ta_3B_4 ve (c) CrB , MnB , ZrB ve HfB ’ aittir. Burada pembe renkte olanlar Bor (B) atomunu; turkuaz, açık mavi ve mor renkte olanlar ise metal atomlarını göstermektedir. MBene’nin birim hücrelerinin yanal boyutları kesik çizgiler ve kutular ile, N_2 adaptasyonu için aktif bölgeler ise kırmızı dairelerle gösterilmiştir [39].

2D geçiş metali borürlerini elde ederken de çoğunlukla MAX fazlarından MXene’lerin elde edildiği geleneksel kimyasal aşındırma yöntemleri kullanılmaktadır [30]. Bu aşamaya gelmek için gerekli en önemli hazırlık ise kolay aşınabilen katmanlardan oluşmuş kristal yapıdaki üçlü borürlerin bulunabilmesidir. Son zamanlarda MAB fazı olarak kullanılan Cr_2AlB_2 , Cr_3AlB_4 , Cr_4AlB_6 , WAlB , MoAlB , Mn_2AlB_2 ve Fe_2AlB_2 tek kristalli üçlü borürlerine ait MAX analogları başarıyla üretilmiştir [40]. Bu yapıları baktığımızda hepsinin 2 boyutlu geçiş metali borürlerini oluşturmaya en uygun malzemelerden biri olan alüminyum katmanı içerdiğini görürüz. MAB aşamalarından borometalik 2D MBene’ler elde edilmesi ile ilgili yapılan araştırmalarda özellikle MnB , HfB , ZrB , Au_2B , Mo_2B , Nb_5B_4 , Ta_3B_4 , V_3B_4 , OsB_2 , FeB_2 ve RuB_2 tatmin edici stabiliteleri ile ön plana çıkmaktadırlar. Özellikle MnB ’un güçlü ferromanyetik (FM) özellik sergilemesi, metalik davranışını ve ferromanyetik durumunu yüksek Curie sıcaklığında bile koruyabilmesi de ayrıca dikkate değerdir [30].

Alamada ve arkadaşları tarafından 2018 yılında yürütülen çalışma [41] ile Mo_2B_2 , Zhang ve arkadaşları tarafından 2018 yılında yürütülen çalışma [42] ile Cr_2B_2 ve Wang ve arkadaşları tarafından 2019 yılında yürütülen çalışma [43] ile Ti_2B_2 deneysel olarak üretilenmiştir.

Bury ve arkadaşları 2023 de yapmış oldukları çalışmada başlangıç fazı olarak kullandıkları MoAlB ' ye $\text{HCl}/\text{H}_2\text{O}_2$ sulu çözeltisini 24, 28 ve 72 saat boyunca uygulayarak alüminyum atomunun komşu elementler ile kurmuş olduğu kalıcı bağa rağmen tek ve çoklu katman olarak MBene özelliğine sahip pullanmayı elde edebilmeyi başarmışlardır. Bu sayede ortorombik kafes düzeyine sahip Mo_2B_2 MBene üyesini ortaya çıkarmışlardır. Bu çalışmanın diğer başarısı da Mo_2B_2 içerisinde bulunan Mo oksidinin direk olarak 1,2 eV ve dolaylı olarak 0,2 eV optik bant boşluklarında organik kirletici madde olarak kullanılan metilen mavisinin ayrıştırılmasında olağanüstü fotokatalitik etki göstermesidir. Ayrıca sulu çözeltiye 48 saat boyunca maruz bırakılarak elde edilen MBene'nin fotokatalizörü ultraviyole ve simüle edilmiş beyaz ışık ışınımı altında hibritleştirilmiş MXene'lerden bile daha hızlı ve daha üstün ayrıştırma performansı sağladığı gözlemlenmiştir. Yine bu MBene'nin görünür ışığın tüm spektrumunda kirletici maddeyi reaktif oksijen türlerine dönüştürmeyi başarmıştır. Elde edilen bu sonuçlar, MBenes'in çevresel iyileştirme uygulamaları için deneysel zemin hazırlamıştır [44].

Li ve arkadaşları yaptıkları çalışmada [45] karbon nanotüp polimer kompozitleri (SWNT) üreterek malzemenin elektromanyetik girişimi (EMI) ve ekranlama etkinliğini (SE) 10 MHz-1,5 GHz aralığındaki frekansta test etmişler ve malzemenin 20 dB'den daha büyük ekranlama etkisi sergilediğini gözlemlemişlerdir.

Luo ve Chung yaptıkları çalışmada [46] 3.1 mm kalınlıktaki esnek grafit levha, nikel levha ve bakır levhanın 1-2 GHz bandındaki toplam kalkanlama performansını karşılaştırmışlardır. En yüksek kalkanlama etkisini grafitin en düşük kalkanlama etkisini ise nikelin sağladığını gözlemlemişlerdir. Yine aynı çalışmada grafitin farklı formlarını da birbirleri ile karşılaştırdıklarında en iyi toplam kalkanlama performansını esnek grafitin sergilediğini belirtmişlerdir.

Shen, Zhai ve Zheng yaptıkları çalışmada [47] termal iletkenlik ile elektromanyetik dalganın kalkanlama arasındaki ilişkiyi grafit oksit filmlerini kullanarak elde ettikleri birkaç katmanlı grafit yapı üzerinde incelemişlerdir. 8.1 μm kalınlığındaki film yapı dalganın

büyük bir kısmını absorbe ederek 20 dB toplam kalkanlama etkinliği sağlamıştır. Film yapının kalınlaştırılması ile daha etkin bir kalkanlamanın yapılabilecek olması heyecan verici olsa da film tabakanın hazırlanma zorluğu, yüksek maliyet ve malzemenin mekanik dayanımının düşük olması gibi dezavantajlara sahiptir. Bu dezavantajlar saf karbon tabanlı malzeme çalışmalarında sıklıkla karşımıza çıkmaktadır.

Xu ve arkadaşları yaptıkları çalışmada [48] ham grafitin üzerine nano ölçekte demir (Fe) katkılayarak elde ettikleri kompozit yapının ham grafitte göre daha yüksek frekanslarda dahi daha iyi kalkanlama etkinliği sergilediğini ancak katkılanan demir oranının %50'nin üzerine çıkması durumunda iletkenliğe bağlı olarak kalkanlama etkinliğinin kötüleştiğini gözlemlemişlerdir.

Yang, Chen ve Parng optik mikroskop ve taramalı elektron mikroskobu kullanarak fiber dağılımında inceleyerek yapmış oldukları çalışmada [49] aynı lif uzunluğuna ve ağırlık yüzdesine sahip paslanmaz çelik liflerden (SSF) oluşturulmuş ABS disk ile nikel kaplı grafit liflerden (NGF) oluşturulmuş ABS diskin kalkanlama etkinliğini gözlemlemişler ve paslanmaz çelik liflerin daha iyi performans sergilediğini belirlemişlerdir.

Al-Ghamdi ve arkadaşları esnek yapıda nanokompozit kalkanlama malzemesi elde etmek için yaptıkları çalışmada [50] grafen nano tabakaları (GN) hafif ve esnek yapıdaki akrilonitril bütadien kauçuk (NBR) matrisine geleneksel kauçuk merdaneli öğütme tekniği kullanarak dahil etmişler ve NBR/GN nanokompozitlerini elde etmişlerdir. Malzemenin 1 GHz- 12 GHz frekans aralığında dielektrik özelliklerini ve kalınlığın kalkanlamaya etkisini incelemişlerdir. Grafen nano tabakanın malzemeye eklenmesi ile malzemenin mekanik ve elektriksel özellikleri önemli ölçüde gelişmiştir. Elde edilen hafif ve esnek nanokompozit malzemenin (NBR/GN) uçaklarda ve mikroelektronik uygulamalarında oldukça etkili mikrodalga koruyucu kalkan olarak kullanılabileceğini belirtmişlerdir.

Singh ve arkadaşlarının çok düşük yoğunluğa sahip gözenekli yüksek EMI kompozit malzemelerle yaptıkları çalışmalarda, gözenekli parçacıkların iletken malzemelerle kaplanması, yüksek EMI kalkanlaması etkinliğinin artmasına yol açtığı fark edilmiştir [51].

Sankaran ve arkadaşları, poliviniliden florür nanokompozit filmleri ile güçlendirilmiş altıgen bor nitrür nanopartiküllerin elektriksel ve elektromanyetik kalkanlama özelliklerini X-band frekans skalasında (8-12 GHz) incelemiş ve h-BNnP/PVDF nano-kompozit filmlerin düşük maliyetli EMI kalkanlama malzemesi olarak kullanılabileceğini göstermişlerdir [52].

Ou ve arkadaşları iç içe yapılı iki tabakalı CNTF ve tek katmanlı GaInSn CNTF/GaInSn kompozit filminin EMI kalkanlama verimliliğini, X bandında yaklaşık 55 dB olarak bulmuşlardır. Bu değer iki tabakalı CNTF'lerden 20 dB daha yüksek bir değer olduğu için gömülü GaInSn LM katmanının varlığı CNTF'nin EMI kalkanlama verimliliğini büyük ölçüde arttırmıştır [53].

Glosh ve arkadaşları, sadece 30 katmana sahip 0.29 mm kalınlığındaki kumaş için uyguladıkları daldırıp-kaplama işlemine göre, DC iletkenliğini yaklaşık 1.701 S.cm⁻¹ ve EMI kalkanlama verimliliğini 27.3 dB olarak hesaplamışlardır. Elde edilen kumaş, hücre zarını tahrip ederek ve bakterilerin solunum sistemini bloke ederek antibakteriyel etki göstermiştir. RACf-30 pamuklu kumaş, E. coli'ye karşı 1.0 cm' lik bir inhibisyon bölgesi oluşturmaktadır [8].

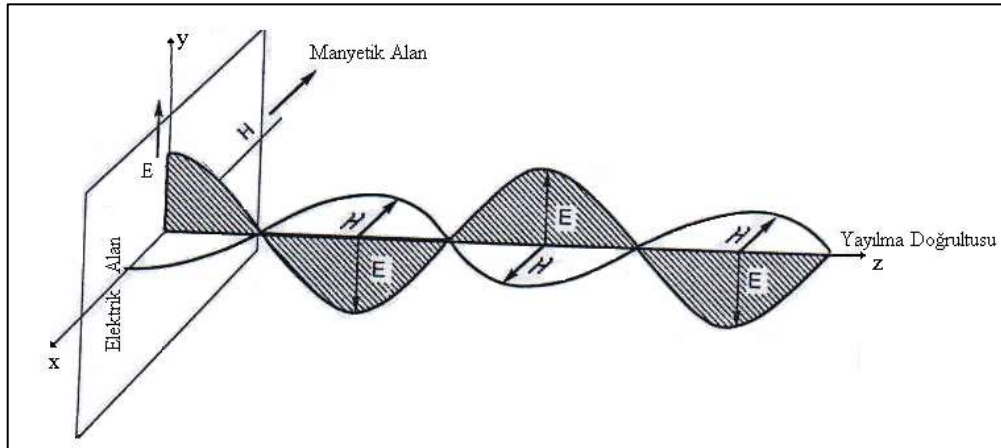
Guan ve arkadaşları, elektromanyetik radyasyonun etki alanını daraltmak ve olumsuz etkilerini azaltmak için EMI kalkanlama ve soğurma özelliklerine sahip çimento içerikli malzemelerinin geliştirilmesi üzerine çalışmalar yapmışlardır [54].

Zornoza ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada, Portland çimento macununa grafit tozu ve üç tip karbon fiber, uçucu kül (%5.6, %15.9, ve %24.3 Fe₂O₃ ile birlikte) ayrı ayrı ve beraber eklenerek oluşturulan malzemenin etkili bir EMI kalkanlama sağladığı bulunmuştur. Ayrıca, kalkanlama verimliliği malzemenin kalınlığı ile de arttığı gözlemlenmiştir [9].

3. TEORİK BİLGİLER

3.1 ELEKTROMANYETİK DALGALAR

Boş uzayda ışık hızı ile ilerleyen, pozitif ve negatif yüklerin oluşturduğu elektrik alan ve hareket eden yüklerin oluşturduğu akımın neden olduğu manyetik alan bileşenlerine sahip olan enine dalgalara elektromanyetik dalgalar (EMD) denir [55, 56]. Hayatımızda önemli rol oynayan elektromanyetik dalgalar doğal ve insan yapımı kaynaklardan üretilir ve yayılırlar. Doğal elektromanyetik dalga kaynakları; güneş, bazı uzak yıldızlar ve atmosferik etkileşimler (yıldırım) dir. Doğal olmayan elektromanyetik dalga kaynaklarının başlıcaları ise; elektrik akımı taşıyan yer altı ve yerüstü elektrik hatları, TV ve bilgisayarlar, elektrikli ev aletleri (Elektrikli süpürge, saç kurutma makinası, traş makinesi, blender vb.), mikro dalga fırınlar, tıbbi görüntüleme cihazları, radyo ve TV vericileri, telsiz haberleşme sistemleri, hücresel telefon sistemleri (GSM Baz istasyonları ve GSM telefon cihazları) dir [57]. Elektromanyetik dalga ve elektromanyetik radyasyon aynı fiziksel olguyu işaret ettikleri için birbirleri yerine kullanılabilirler ve EMR şeklinde kısaltılabilir. Elektromanyetik dalganın Şekil 3.1’de verilmiş olan şematik gösteriminde elektrik alan E, manyetik alan ise H harfi ile gösterilmiştir.



Şekil 3.1: Elektromanyetik Dalga [58].

3.1.1 Elektromanyetik Dalgaların Özellikleri

Enerji ve momentum taşıma özelliği olan elektromanyetik dalgalar, birbirlerine ve yayılma doğrultusuna dik olan elektrik alan ve manyetik alanın bileşkesi formunda olup bir doğru boyunca yayılırlar. Elektrik alan ve manyetik alan değişimi aynı fazda olan elektromanyetik dalgalarda, manyetik alan ve elektrik alan birlikte artıp birlikte azalma davranışı sergilerler

Elektromanyetik dalgalarda sıklıkla kullanılan nicelikler şunlardır:

Frekans (ν): Elektromanyetik dalgaların bir saniyede yaptığı salınım sayısına (kendilerini tekrarlama sıklığına) frekans denilmektedir. Frekansın birimi Hertz (Hz)'dir.

Dalgaboyu (λ): Elektromanyetik dalgaların bir salınımda aldıkları yola dalgaboyu denilmektedir. Dalgaboyunun birimi metre (m) dir.

Şiddet (I): Elektromanyetik dalga'nın şiddeti, birim yüzeyden geçen ortalama güç olarak tanımlanır.

Eşitlik 3.1 elektrik alan genliğine (E_0) bağlı elektromanyetik dalga şiddetini;

$$I = \langle S \rangle = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2 \quad (3.1)$$

Eşitlik 3.2 ise manyetik alan genliğine (B_0) bağlı elektromanyetik dalga şiddetini;

$$I = \langle S \rangle = \frac{\frac{1}{2} c B_0^2}{\mu_0} \quad (3.2)$$

göstermektedir.

Yaptığı çalışmalar ve elde ettiği eşitliklerle elektro manyetik teoriye büyük katkılar sunan James Clerk Maxwell elektromanyetik dalgaların hızını bugünkü değerine ($2,99792458 \times 10^8$ m/s) çok yakın olacak şekilde ortaya koymuştur [57].

3.1.2 Maxwell Eşitlikleri

Maxwell eşitlikleri, serbest uzayda herhangi bir dielektrik ve manyetik malzemenin olmadığı ortamlar gözetilerek ifade edilir. Aşağıdaki eşitliklerde; elektrik alan $\vec{E}$, manyetik alan $\vec{B}$, uzaysal yük yoğunluğu ρ , elektriksel geçirgenlik ϵ_0 , manyetik geçirgenlik μ_0 ve akım yoğunluğu $\vec{j}$ ile gösterilmiştir. Ayrıca elektrik akısı Φ_E , toplam yük Q , yüzey alanı $\vec{A}$ ve elektrik alanı yayılımı $\nabla \cdot \vec{E}$ 'dir.

- i. Eşitlik (Gauss Yasası): Herhangi kapalı bir yüzeyden geçen toplam elektrik akısının, bu yüzey içindeki net yükün ϵ_0 'a bölümüne eşit olduğunu ifade eder. Gauss Yasası eşitlikleri olan integral eşitlikleri ve türev eşitliği Eşitlik 3.3'de gösterilmiştir.

$$\oint_s \vec{E} \cdot d\vec{A} = -\frac{Q}{\epsilon_0}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.3)$$

- ii. Eşitlik (Manyetik Gauss Yasası): Kapalı bir yüzeyden geçen net manyetik akının sıfır olduğunu bildirir. Manyetik Gauss Yasası eşitlikleri olan integral eşitliği ve türev eşitliği Eşitlik 3.4’de gösterilmiştir.

$$\oint_s \vec{B} \cdot d\vec{A} = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.4)$$

- iii. Eşitlik (Faraday Yasası): Değişen bir manyetik alanın oluşturduğu elektrik alanı tanımlar. Faraday Yasası eşitlikleri olan integral eşitliği ve türev eşitliği Eşitlik 3.5’de gösterilmiştir.

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{s} = -\frac{d\vec{B}}{dt}, \quad \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.5)$$

- iv. Eşitlik (Amper Yasası): Değişen elektrik alanı ve elektrik akımları tarafından oluşturulan manyetik alanın oluşumunu tanımlar. Amper Yasası eşitlikleri olan integral eşitliği ve türev eşitliği Eşitlik 3.6’da gösterilmiştir.

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{s} = \mu_0 I + \epsilon_0 \mu_0 \frac{d\phi_E}{dt}, \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (3.6)$$

3.1.3 Elektromanyetik Dalga Eşitliği

Elektromanyetik dalgaların bir ortam boyunca ya da bir vakum ortamı içerisinde yayılmasını açıklayan, ikinci dereceden kısmı diferansiyel eşitliklere elektromanyetik dalga eşitliği denir. Yük ve akım bulunmayan boş uzayda Maxwell eşitliklerinden; Faraday Yasası ve Amper Yasası’nın rotasyoneli alınarak Laplace operatör (∇^2) cinsinden aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (3.7)$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \quad (3.8)$$

Eşitliklerinde verildiği gibi elektrik alan Eşitlik 3.7 ve manyetik alan Eşitlik 3.8 için ayrı ayrı elde edilmiş olur. Elektrik alan ve manyetik alan için Eşitlik 3.9 incelendiğinde bu eşitliğin doğruluğu gözlenmiş olur.

$$\nabla^2 f = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \quad (3.9)$$

Eşitlik 3.9 “Klasik Dalga Eşitliği” olarak isimlendirilir ve c, ışık hızıyla ilerleyen bir dalganın hareketini belirtir. Dalganın hızı,

$$c_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 2,9979.10^8 \frac{m}{s} \quad (3.10)$$

bağıntısı ile ifade edilir [59].

Bütün elektromanyetik dalgalar frekans ve dalga boyundan bağımsız olarak ışık hızında hareket ederler.

3.1.4 Elektromanyetik Dalganın Taşıdığı Enerji Ve Momentum

Elektromanyetik dalgalar taşıdıkları enerjiyi uzayda yayılırken karşılaştıkları cisimlere aktarabilirler. Bir elektromanyetik dalgadaki enerji akış hızı Poynting vektörü ($\vec{S}$) ile tanımlanır. Poynting vektörü ve birimi Eşitlik 3.11’de gösterilmiştir.

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} (\vec{E} \times \vec{B}) \quad \left(\frac{joule}{saniye.metre^2} \right) \quad (3.11)$$

Birim yüzey başına gücü ifade eden Poynting vektörünün büyüklüğü aynı zamanda akış yönüne dik olan birim yüzeyden, enerjinin geçiş hızını da ifade eder. $\vec{S}$ vektörünün yönü, dalganın yayılma doğrultusu boyuncadır. Elektromanyetik dalganın enerjisi,

$$U = \frac{1}{2} \left(\epsilon_0 E^2 + \frac{B^2}{\mu_0} \right) \quad (3.12)$$

elektromanyetik dalganın momentumu ise,

$$\vec{P} = \epsilon_0 \mu_0 \vec{S} = \frac{1}{c^2} \vec{S} \quad (3.13)$$

bağıntısı ile verilir [57].

Elektromanyetik dalganın güç akı yoğunluğu, dalganın hareket doğrultusuna dik olan yüzeydeki birim alana düşen güç miktarıdır. Birimi watt/metre²'dir.

Poynting vektörü ($\vec{S}$) ile elektrik ve manyetik alan şiddeti arasındaki ilişki basitçe;

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = \frac{E^2}{377} \frac{\text{watt}}{\text{metre}^2} \quad (3.14)$$

şeklindedir.

Eşitlik 3.14'de görüldüğü gibi elektromanyetik dalganın boşluktaki yayılmasına karşı gösterilen direnç değeri 377 Ω dur. Bu değere boşluğun direnci de denilir.

3.1.5 Elektromanyetik Dalga Polarizasyonu Ve Yayılımı

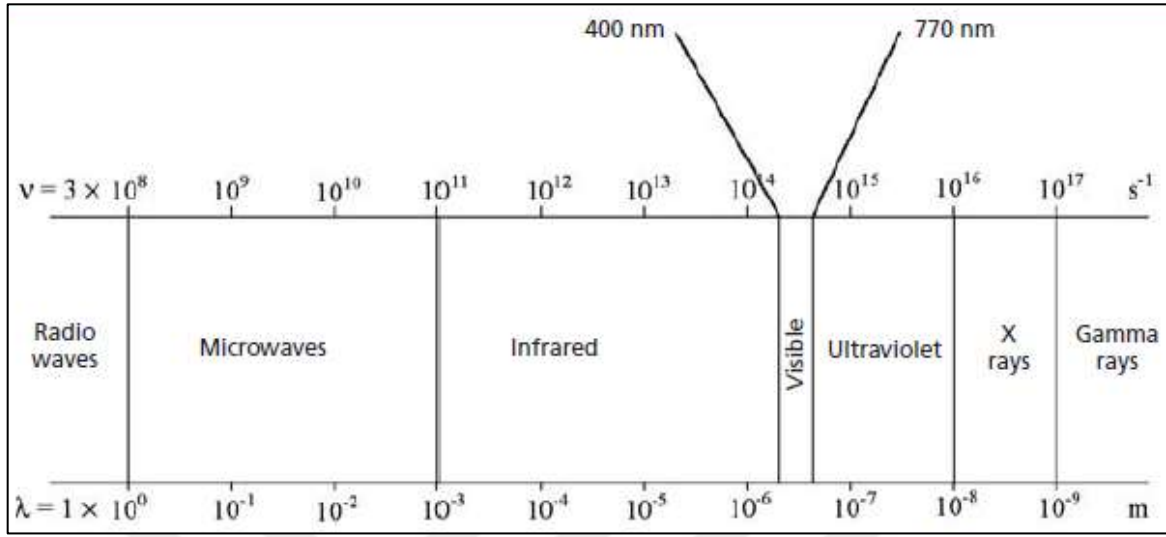
Enine dalgalar olan EMD'larda, boyuna dalgaların aksine titreşen elektrik ve manyetik alan vektörleri dalganın yayılma doğrultusuna diktir. Bu nedenle EMD'lar düzlemsel polarize olurlar. Düzlemsel dalga yayılımında elektrik alanın bir noktadaki zamanla değişen davranışına polarizasyon, elektrik alan vektörünün zamanla çizdiği şekle ise dalga polarizasyonu denir. Elektrik alanın yönü doğrusal ise doğrusal polarizasyon, dairesel bir hareket yapıyorsa dairesel polarizasyon, eliptik bir hareket gösteriyorsa eliptik polarizasyon oluşur. Elektromanyetik dalgalar ilerledikleri ortamda çeşitli engellerle karşılaşır. Ortam da ilerleyen EMD'lar çeşitli engellerle karşılaşsa da hareketlerini devam ettirme eğilimi gösterirler. Karşılaştıkları engel çeşitlerine göre durum değiştiren elektromanyetik dalgalar yansıma, kırımın, kırılma ve saçılma şeklinde ortamla etkileşime girerler [57].

3.1.6 Elektromanyetik Spektrum

Elektromanyetik spektrum sürekli bir enerji ortamıdır. Elektromanyetik enerji, nanometre (nm) mertebesinde başlayıp kilometre (km) mertebesine kadar uzanır ve ışık hızında hareket edebilir [60].

Elektromanyetik dalga spektrumu, elektromanyetik dalgaların dalga boyu, frekans ve enerji aralıklarına göre sıralanması ile oluşturulmuş ve bu aralıklara özel isimler verilmiştir. Bu

aralıklar, radyo frekansı bölgesi (RF), mikrodalga bölgesi, infrared bölgesi, görünür ve morötesi bölge, x-ışınları bölgesi ve gama ışınları bölgesidir [61].



Şekil 3.2: Elektromanyetik Spektrum [62].

Radyo frekansı bölgesi; dalga boyları 1mm- 10^4 km arasında olan dalgaları barındıran bölgedir. Frekans olarak 30 Hz-300 GHz aralığındadır. Özel elektronik devrelerle elde edilen radyo dalgaları her yerde bulunabilir. Radyo, Tv, Telsiz vb. sinyallerinin iletiminde taşıyıcı dalga olarak kullanılırlar. Önemli biyolojik etkileri bulunmamaktadır [61, 63].

Mikrodalga bölgesi; Dalga boyu 50 mm-30 cm arasında olan ve özel elektronik lambalar kullanılarak elde edilen mikro dalgaları barındıran bölgedir. Radar dalgaları olarak da isimlendirilen bu dalgalar radar sistemlerinde sıklıkla kullanılırlar. 10 mW/cm^2 den büyük şiddetli ışımaları canlılar üzerinde olumsuz etkiler yaratır. Bunun yanı sıra 2,45 GHz frekansındaki mikrodalgalar fizik tedavi amacı ile kullanılmaktadır. Mikro dalga fırınlarda ve kablosuz uzak mesafe iletişim için kullanılırlar [61, 63].

İnfrared bölgesi; Dalga boyları 700 nm-1 mm arasında değişen ve kızılötesi (IR) ışınlar olarak da adlandırılan dalgaları barındıran bölgedir. Güneş ışığı spektrumundan ve sıcak cisimlerin yüzeylerinden salınırlar [61, 63].

Görünür bölge; 360 nm-750 nm aralığındaki dalga boylarını barındıran bölgedir. Güneş ışınlarının spektrumundan ve atomların ısı etkisinde uyarılmaları sonucu salınırlar. Gözle algılanabildiği gibi fotoğraf kağıdına etkileri ve fotoelektrik olay gibi etkileri takip edebilen cihazlar yardımı ile de dedekte edilebilirler. Güneş ışığındaki görünür ışık fotosentez yolu

yaşamın temel enerji kaynağını oluşturur. Madde analiz yöntemi olarak, görünür ışık salma ve soğurma spektrumlarının spektrofotometrik olarak incelenmesi sıklıkla kullanılır. Görünür ışık mor ile başlayan ve kırmızıyla biten renler barındırır [60, 61, 63].

Morötesi (UV) bölge; 60nm-380nm aralığındaki dalga boylarını barındıran bölgedir. Güneş spektrumunda bulunan bu ışınlar aynı zamanda gaz boşalma tüpleri ve orta hızdaki elektronların metallere çarpması sonucu da salınırlar. Fotoğraf plakları ile elektronik devre elemanları üzerine etkileri ile dedekte edilebilen morötesi ışınlar, atomlarda elektronik enerji düzeyleri arasındaki geçişlerle de de ilgilidir. Güneşten gelen morötesi ışınları büyük oranda soğuran ozon tabakası hayatı koruyan bir kılıftır. Kısa dalga boyundaki morötesi radyasyona fazla maruz kalınması canlı sağlığı için risk teşkil eder [61, 63].

X-ışınları bölgesi; 0.01-10 nm dalga boyuna sahip dalgaları barındıran bölgedir. X-ışınları, yüksek enerjili elektronların metal bir yüzeye çarpmaları sonucu elde edilirler. Sürekli X-ışınlarını atom çekirdeği yakınlarına kadar girin hızlı elektronların burada frenleyici bir ivme etkisine maruz bırakılması ile elde edebiliriz. X ışınlarının canlı üzerindeki dolaylı etkisi ölümcül boyutlara ulaşabilir [61, 63].

Gama ışınları; 10^{-1} - 10^{-5} nm aralığında dalga boyundaki dalgaları barındıran gama ışınları radyoaktif izotopların çekirdek dönüşümlerinde ortaya çıkan ışınlardan oluşurlar. Girişim kabiliyetleri çok yüksek olan gama ışınları, iyonlaşma odaları ve fotoğraf kağıdına etkileri sayesinde dedekte edilebilirler. Elektromanyetik spektrumun en yüksek enerjili bölgesinde yer alırlar [63, 64].

3.1.7 Elektromanyetik Radyasyon

Maddenin temel yapısını oluşturan atomların çekirdeğindeki nötronlar sayıca protonlardan oldukça fazla ise oluşturdukları madde kararsız yapıdadır. Bu tür maddeler daha kararlı hale geçme eğilimindedirler. Bunu başarmak için çekirdeklerindeki nötronları alfa, beta, gama ışımaları yaparak parçalamaya çalışırlar. Bu şekilde ışın saçan maddelere “radyoaktif madde” saçıkları alfa, beta ve gama gibi ışınlara ise “radyasyon” denir.

Elektromanyetik radyasyonun en küçük birimi fotondur ve boşlukta düz bir çizgi boyunca ışık hızında yayılırlar. Elektromanyetik dalgalar, frekanslarıyla doğru orantılı, dalga

boylarıyla ters orantılı olmak üzere geçtikleri ortama enerjilerini aktarırlar. Enerji soğurma, saçılma etkileri ve boşluk da uzaklığın karesi ile ters orantılı olarak azalır.

Elektromanyetik radyasyon iyonlaştırıcı (nükleer) radyasyon ve iyonlaştırıcı olmayan (elektromanyetik) radyasyon olmak üzere iki gruptadır. İçerisinden geçtiği maddeye enerji aktaran ve maddenin atomlarında X ve gama-ışınları ile α , β ve nötron parçacıklarının yayılması nedeniyle doğrudan veya dolaylı iyonlaştırma etkisine neden olan radyasyon türü iyonlaştırıcı (nükleer) radyasyondur. Bu tür radyasyonun düşük dozları (rem) bile canlılar üzerinde çok ciddi etkileri yaratır.

Yeteri kadar büyük enerjiye sahip olmayan elektromanyetik (iyonlaştırıcı olmayan) radyasyon, madde ile etkileşmesinde moleküler seviyede kimyasal bağları koparamadığı için iyonlaştırıcı radyasyon kadar büyük bir etkiye neden olmaz. Elektromanyetik (iyonlaştırıcı olmayan) radyasyon; radyo dalgaları, mikrodalgalar, kızıl ötesi ışık, mor ötesi ışık (ultraviyole) ve görünür ışık ailesini barındırır. Elektromanyetik ışıyım yayan kaynakların başlıcaları; elektrik enerjisi ileten ya da enerjiyle çalışan her türlü araç ve gereç, enerji nakil hatları ve trafo istasyonları, elektrikli trenler, TV ve bilgisayar ekranları, indüksiyon fırınları, indüksiyon kaynak makineleri, (radyo, TV ve telsiz) verici istasyonlarının antenleri, sürekli ve darbeli radar sistemleri, uydu iletişim sistemleri, tedavi amacıyla kullanılan tıbbi elektrikli cihazlar, mikrodalga fırınlar, GSM haberleşme sistemlerinde kullanılan temel baz istasyonu antenleri ve cep telefonu antenleridir. Bu kaynaklardan yayılan elektromanyetik radyasyonun çevre ve canlı üzerinde yaratmış oldukları riskler halen detaylı araştırılmalarına konu olmakla birlikte, riskin boyutu barındırdıkları manyetik alanın şiddetine, yoğunluklarına, frekanslarına ve maruz kalınan süreye göre değişkenlik göstermektedir [63].

3.1.8 Elektromanyetik Girişim (EMI)

Elektrik, elektronik cihazlar ve elektromekanik sistemler çalışırken elektromanyetik enerji açığa çıkarırlar. Yayılan bu enerji ortamda mevcut olan diğer cihaz ve sistemlerle etkileşime girerek onların kararlı çalışmaları ve performansları üzerinde olumsuz etkilere neden olur. Bu etkileşime elektromanyetik girişim (EMI) denir. Teknolojinin yaygın kullanımıyla birlikte özellikle radyo frekansı aralığını kullanan cihazların sayısı hızla artmıştır. Bunun sonucu olarak kullanılabilir frekans spektrumundaki aşırı yoğunluk yeni frekans bantlarının da kullanılmasını zorunlu hale getirmiştir. Artan bu yoğunluktan kaynaklanan EM

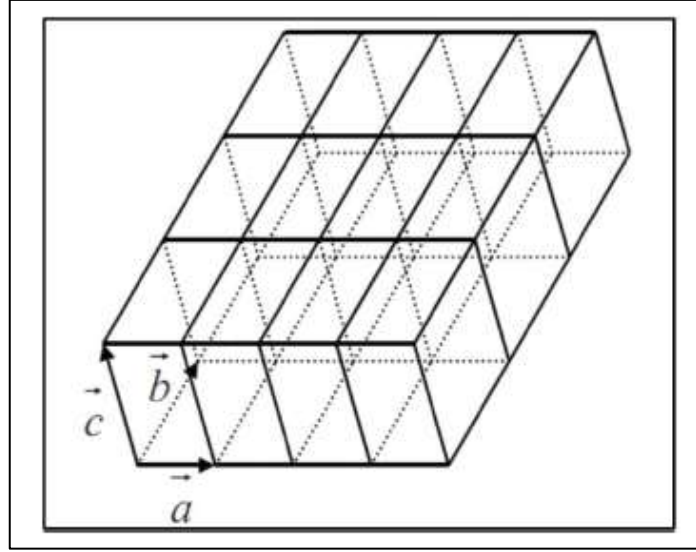
emisyolların ortama verilmesi çevrede bulunan cihaz ve sistemler için ciddi bir sorun haline gelmekle birlikte, saęlık ve gvenlik problemlerini de beraberinde getirmiştir. Elektronik cihazlar alıřırken ortama elektromanyetik dalga yaydıkları gibi dięer sistemlerin retmiř oldukları radyasyondan da etkilenirler. Bu nedenle cihazların alıřtıkları ortamlarda ki elektrik ve manyetik alan řiddetlerinin belirli seviyelerin zerinde olması istenmez. Bir cihazın veya sistemin bulunduęu ortamdaki elektromanyetik radyasyondan etkilenmeden ve bu ortama ek bir radyasyon katkısı yapmadan alıřmasını srdrebilmesine “elektromanyetik uyumluluk (EMC)” olarak isimlendirilir [65, 66].

3.2 KRİSTAL YAPI

Katıhal fizięinin cisimlerin temel zelliklerini anlamamıza yardım eden basit model hesaplamalarının sonucunda ortaya ıkan kristaller,  boyutlu uzayda atomların periyodik olarak dizilmesi ile oluřan yapılardır. Aynı atom veya atom gruplarının peř peře birbirleriyle baęlanması sonucu oluřan kristal yapı  boyutlu bir rgdr. Kristallerin yapısı, atomların belirli aralıklarla dizilmiř noktalar dizisine (rg) yerřeltirilmesi ile belirlenir ve temsil edilir. $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$, $\vec{a_3}$ gibi  temel teleme vetr ile  boyutlu bir kristal yapıyı tanımlayabiliriz. Her rg noktasında bulunan ve  boyutlu bu rgnn btm dęm noktasında ortaya konulan atomlar grubuna “baz” denir. Bu bazın bileřim yn ve yerleřimi bire bir benzerdir. Kristal yapı ise bir uzay rgsnn atomlarının btn dęm noktasına bir baz yerleřtirilerek elde edilir.

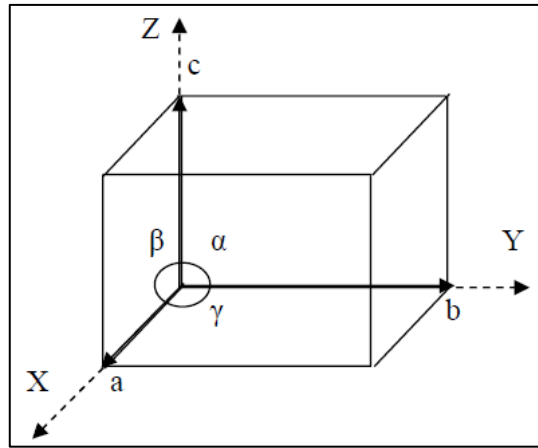
rg + Baz = Kristal Yapı

İlkel hcre (birim hcre) ise $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$, $\vec{a_3}$ ilkel eksenleri ile oluřturulmuř  boyutlu kristal yapının en dřk hacime sahip paralelkenardan oluřan prizmadan ibarettir. řekil 3.3 $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$, $\vec{a_3}$ vektrler ile tanımlanan ve ilkel hcreler ile oluřturulmuř  boyutlu bir rg yapısını gstermektedir.



Şekil 3.3: $\vec{a_1}$, $\vec{a_2}$, $\vec{a_3}$ Vektörleri İle Tanımlanan İlkel Hücrelerin Oluşturduğu Üç Boyutlu Örgü Yapısı [67].

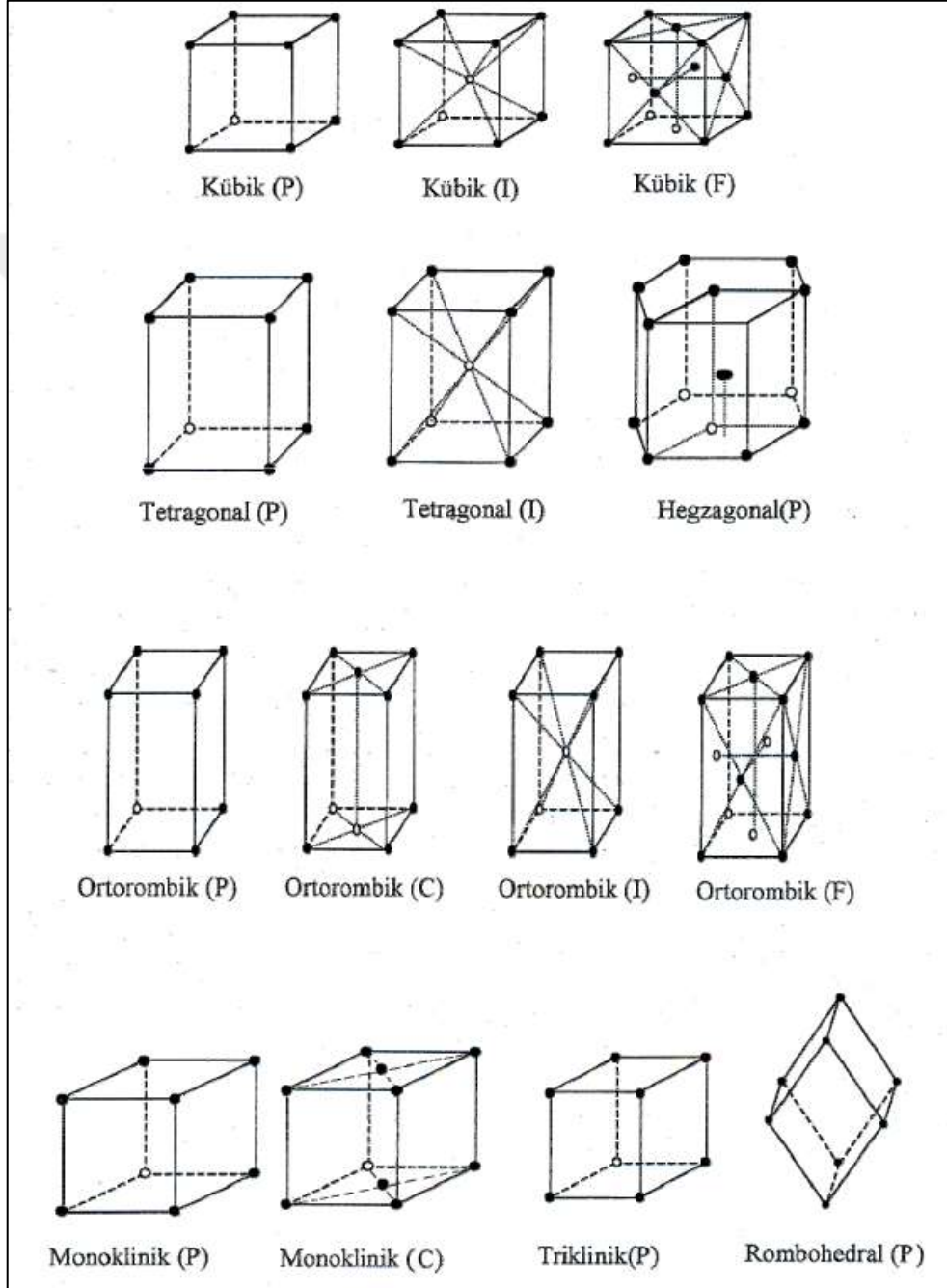
İlkel hücreler ile tüm uzayın içini kaplayabilmek kristallerin öteleme hareketlerinin tekrarlanması ile mümkündür. Her zaman bir örgü noktası barındırmak zorunda olan ilkel hücrenin içindeki baza ise “ilkel baz” denir. Bu bazların $\vec{a}$, $\vec{b}$ ve $\vec{c}$ vektörleri yardımıyla birden fazla tekrarlanmasıyla kristal elde edilir. Şekil 3.4’de gösterildiği gibi bir noktadan ortaya çıkan $\vec{a}$, $\vec{b}$ ve $\vec{c}$ vektörlerinin oluşturduğu paralelyüzde $\vec{b}$ ve $\vec{c}$ vektörleri arasındaki açı (α), $\vec{a}$ ve $\vec{c}$ vektörleri arasındaki açı (β) ve $\vec{a}$ ve $\vec{b}$ vektörleri arasındaki açı (γ) dır.



Şekil 3.4: Birim Hücrede Eksen Ve Açılar [68].

3.2.1 Kristal Sistemleri Ve Bravais Örgüleri

Kristalleri $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ vektörleri ve α , β , γ açıları göz önüne alınarak yedi farklı kombinasyonda toplamak mümkündür. Oluşturulan bu gruplamaya “yedi kristal sistemi” adı verilir [69]. Kristal sınıflarındaki atomların farklı düzenlenmesi ile elde edilen 14 farklı kristal örgüye “Bravais Örgüleri” adı verilir [70]. Şekil 3.5’de Bravais örgüleri gösterilmektedir.



Şekil 3.5: Bravais Örgüleri [68].

14 tane farklı kristal örgü yapısını barındıran Bravais örgülerine daha yakından bakmak gerekirse, üçü kübik ($a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ P, I, F), ikisi monoklinik ($a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ P, C); dördü ortorombik ($a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ P, C, F, I); biri triklinik ($a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ P); ikisi tetragonal ($a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ P, I); biri rombohedral ($a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ P) ve biri de hekzagonal ($a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ P) formda olduğu görülür. Burada basit (primitif) örgü 'P', yüzey merkezli örgü 'F', cisim merkezli örgü 'I' ve taban merkezli örgü ise 'C' sembolleriyle gösterilmiştir.

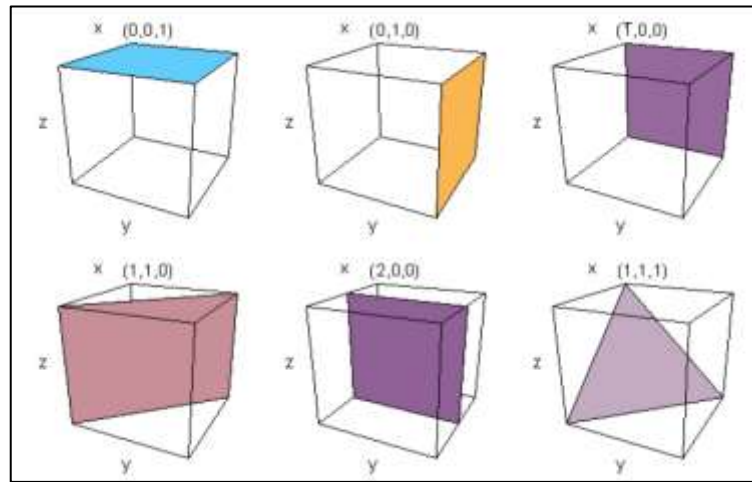
3.2.2 Miller İndisleri

Her doğrultu ve düzlemde farklı özellik gösteren kristal yapıların analizleri yapılırken, her bir düzlem indisleri ile tanımlanmaktadır. Miller indisleri olarak adlandırılan bu indisler h, k, l harfleri ile gösterilir. Miller indisleri kullanılarak ters örgü uzayındaki bir K vektörü;

$$\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (3.15)$$

şeklinde yazılabilir.

Miller indisleme yapılırken; belirtilmek istenen düzlemlerin kristal eksenini kestiği noktalar a_1 , a_2 , a_3 örgü sabitleri cinsinden bulunduktan sonra bu sayıların tersleri alınarak, aynı orana sahip en küçük üç tam sayı elde edecek şekilde indirgenir. Böylece (hkl) ile gösterilen bu sayı kümesi o düzlemin indisi olur. Kübik bir kristaldeki bazı önemli düzlemlerin indisleri Şekil 3.6'da gösterilmiştir [71].



Şekil 3.6: Kübik Bir Kristalde Bazı Önemli Düzlemlerin Miller İndisleri [71].

3.3 AB-İTİTİO YÖNTEMLER

Ab-initio kelime anlamı olarak ‘başlangıçtan itibaren’ anlamına gelmektedir. Ab-initio yöntemler ile yapılan hesaplar fiziğin temel ilkelerinden yola çıkılarak gerçekleştirildiği için, herhangi bir önsel kabullenim içermez. Ab-initio yöntemler deneysel verilerin kullanılmadığı, teorik veriler üzerine kurulmuş olan kuantum kimyasal hesaplamalardır. Karmaşık bir fonksiyonun daha basit bir fonksiyona indirgenmesi ile elde edilen matematiksel ifadeleri kullanan ab-initio yöntemde molekül küçüldükçe ve bütün yaklaşımlar yeterli küçüklükten yola çıkılarak yapıyorsa hesaplamalar kesin bir sonuca yaklaşır. Ab-initio yönteminde Hartree-Fock Yaklaşımı ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) olarak iki farklı yaklaşım kullanılmaktadır [72].

3.3.1 Hartree-Fock Yaklaşımı

Hartree-Fock yaklaşımı [73] çok elektronlu sistemlerin dalga fonksiyonlarının tam çözümünün zorluğunu aşmak için, çok elektronlu bir sistemde elektronların potansiyelinin sadece elektronun çekirdek ile olan uzaklığına bağlı olduğunu varsayar. Böylece her elektron ortalama bir potansiyel değeri ile diğer elektronlardan bağımsız olarak hareket edecektir. Bu yaklaşımla çok parçacık dalga fonksiyonları, Slater determinantı kullanılarak çözümü mümkün olan tek parçacık dalga fonksiyonlarından elde edilebilir.

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \begin{bmatrix} \psi_1(r_1)\psi_1(r_2) & \dots & \dots & \psi_1(r_N) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(r_1)\psi_N(r_2) & \dots & \dots & \psi_N(r_N) \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

Hartree yaklaşımında, i. elektrona etki eden potansiyel, iyon potansiyeli ile Hartree potansiyelinin toplamı olarak tanımlanmıştır:

$$V_i(r) = V_{iyon}(r) + V_H(r) \quad (3.17)$$

Hartree potansiyeli;

$$V_H(r) = - \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr' \quad (3.18)$$

Hartree potansiyelindeki i. elektrona etki eden yoğunluk terimi şöyle ifade edilir:

$$n(r') = \sum_{i \neq j} |\psi_j(r')|^2 \quad (3.19)$$

Böylece Hartree eşitliği şöyle yazılabilir:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{iyon}(r)\right]\psi_i(r) + \sum_{j \neq i} \int \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r - r'|} dr' \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (3.20)$$

Hartree-Fock yaklaşımında ise sistemin dalga fonksiyonu antisimetri özelliğini de sağlayacak şekilde Eşitlik 3.16'daki Slater determinantı ile tanımlanabilir. Böylece Hartree eşitliğine ek olarak değiş-tokuş terimi gelir ve Hartree-Fock eşitliği şu şekilde yazılabilir:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{iyon}(r)\right]\psi_i(r) + \sum_{j \neq i} \int \frac{|\psi_j(r')|^2}{|r - r'|} dr' \psi_i(r) + \sum_j \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int \frac{\psi_j^*(r') \psi_i^*(r')}{|r - r'|} \psi_j(r) dr' = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (3.21)$$

Sistemin dalga fonksiyonunu tek bir slater determinant ile tanımlayan Hartree-Fock yaklaşımında, gerçek elektron-elektron etkisi yani elektronlar arasındaki korelasyon potansiyeli tanımlarken dikkate alınmaz. Sistemin dalga fonksiyonu oluşturulduktan sonra, bu dalga fonksiyonu ile her elektrona etkiyen potansiyel hesaplanır. Hesaplanan bu potansiyel kullanılarak çözülen Schrödinger eşitliği kullanılarak yeni dalga fonksiyonları üretilir. Üretilen bu dalga fonksiyonu ile üretilen yeni potansiyeller Schrödinger eşitliği kullanılarak tekrar çözülür ve en uygun dalga fonksiyonu bulunur. Hassas çözüme ulaşmak için bu işlemlerin ardarda tekrarlanır. Hassas çözüm ile elde edilen dalga fonksiyonu ile bir önceki dalga fonksiyonu üst üste geliyor ise bundan sonra yapılacak tüm hesaplar aynı sonucu verir. Karşılıklı olarak birbirini düzelten yaklaşım basamakları nedeniyle bu yaklaşıma öz tutarlı alan metodu da (scf) denilir [72].

3.3.1.1 Korelasyon enerjisi

Hartree-Fock yaklaşımında gerçekte var olan etkileşen elektron sistemini göz ardı eder. Korelasyon enerjisi denilen bu etkileşimden kaynaklanan enerji E_c ,

$$E_c = E_0 - E_{HF} \quad (3.22)$$

şeklinde yazılır. Burada E_0 temel durum enerjisi, E_{HF} ise Hartree-Fock enerjisidir. Hartree-Fock enerjisi için $E_{HF} \geq E_0$ eşitsizliği daima geçerlidir, bu nedenle korelasyon enerjisi negatif ($E_c \leq 0$) değer alır [74].

3.3.2 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT) 1920'lerde Thomas ve Fermi'nin çalışmalarını temel alan Hohenberg-Kohn teoremleri [75] ve bu teoremlerin devamı niteliğindeki Kohn-Sham teoremleri [76] üzerine kurulmuştur. Birbiri ile etkileşen birden çok elektronu bulunan sistemlerin kuantum mekaniksel olarak incelenmesinde sıklıkla kullanılan bu teorinin temel fikri etkileşen bir elektronlar sistemini çok-cisim dalga fonksiyonları yoluyla değil elektron yoğunluğu olarak tanımlamaktır. Hohenberg ve Kohn tarafından iki farklı teoride ispatlandığı üzere, DFT birden fazla elektrona sahip sistemin bütün özellikleri taban durum elektron yoğunluğu olan ve pozisyonun skaler bir fonksiyonu olarak yazılan $n_o(r)$ 'nin bir fonksiyoneli olarak yazılabileceği ilkesine dayanır. Yani DFT, çok elektronlu sistemlerin taban durum özelliklerini belirlemek için elektron yük yoğunluğu $\rho(\vec{r})$ 'yi temel değişken olarak kabul etmektedir. Bu ispat birden fazla sayıda elektron içeren sistemlerde kesin ve tam bir fonksiyonele rastlanamayan ve fonksiyonellerin nasıl oluşturulabileceğini açıklamaktan uzaktır. Yoğunluk fonksiyonel teorisi günümüzdeki geniş uygulanabilirliğine Walter Kohn ve Lu Jeu Sham'ın yaklaşımları sayesinde ulaşmıştır. Metaller, yarıiletkenler ve yalıtkanların temel durum özelliklerini belirlemede oldukça başarılı olan DFT sadece bulk hacimli malzemelere değil protein ve karbon nano tüpler gibi kompleks materyallere de uygulanabilir [75, 76].

Sistemin taban durum enerjisi DFT fonksiyonelinin minimizasyonu ile elde edilir. DFT bunu yaparken bazı teorem ve yaklaşımlar kullanır. Bunların başlıcaları Thomas-Fermi-Dirac Yaklaşımı, Hohenberg-Kohn Teoremleri, Kohn-Shan Yaklaşımı ve Hellmann-Feynman Teoremi'dir.

3.3.2.1 Thomas-Fermi-Dirac yaklaşımı

Hartree-Fock yöntemlerinin geliştirildiği döneme denk gelen yıllarda Thomas (1927) ve Fermi (1928) birbirinden bağımsız olarak geliştirdikleri yöntemler, elektron sayısının çok fazla olduğu sistemlerde, sistemi istatistiksel argümanlarla betimlemenin daha uygun

olabileceği fikrine dayanmaktadır [77, 78]. Gerçekte çoğu sistem fazla elektron içermektedir.

Birim hacme düşen elektron sayısını elektron yoğunluğu (ρ) olarak tanımladıktan sonra, çok sayıda elektron barındıran sistemde elektron yoğunluğunu konumun bir fonksiyonu şeklinde ($\rho = \rho(r)$) elde edilebilir. Yarıklasik yaklaşım olarak da isimlendirilen bu tanımlamaya göre elektronların klasik parçacıklar gibi uzaysal koordinatlara sahip oldukları varsayılarak elektron yoğunluğu tanımı yapılmıştır. Bu yarıklasik yaklaşım aynı zamanda sistemin enerjisini elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak tanımlarken de oldukça işe yaramaktadır [79]. Thomas-Fermi-Dirac Yaklaşımı aşağıda belirtildiği şekliyle formülize edilebilir.

Elektron yoğunluğu ile noktasal yük olarak ele alınan çekirdekler arasındaki potansiyel enerji:

$$V_{ne}[\rho(r)] = \sum_{I=1}^P \int \frac{Z_I}{|r - r_I|} \rho(r) d^3(r) \quad (3.23)$$

ve iki farklı noktadaki elektron yoğunlukları arasındaki potansiyel enerji:

$$V_{ee}[\rho(r)] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} d^3(r_1)d^3(r_2) \quad (3.24)$$

olarak yazılır. Eşitlik 3.23 ve 3.24 sadece Coulomb etkileşimlerini ifade etmektedir.

Thomas ve Fermi kinetik enerji ve değiş-tokuş enerjisini oluşturmak için problem çözümünde o günlerde Schrödinger eşitlikleri iyi bilinen homojen elektron gazını kullanmışlardır. E_α homojen olmayan sistemler de Eşitlik 3.25'de gösterildiği gibi tanımlanmıştır.

$$E_\alpha[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_\alpha[\rho(r)] dr \quad (3.25)$$

Kinetik enerji, değiş-tokuş enerjisi ve korelasyon katkılarını barındıran α indeksi kullanılarak; lokal enerji yoğunluğunun ε_α tüm uzay üzerinden integrali alınmaktadır.

Enerjinin ve enerji yoğunluğunun, elektron yoğunluğu fonksiyonuna bağlı birer fonksiyonel olduğunu köseli parantezler aracılığıyla gösterilir. Homojen elektron dağılımında olduğu gibi katı yapılarında her noktada aynı elektron yoğunluğuna sahip olduğu varsayımına dayanan Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ilk defa böylece kullanılmıştır [80].

Thomas-Fermi homojen elektron gazı için kinetik enerjiyi Eşitlik 3.26’da gösterildiği gibi ifade etmişlerdir [77].

$$T = \frac{3}{5} \rho \varepsilon_F \quad (3.26)$$

Fermi seviyesine bağlı elektron yoğunluğu (ρ) Eşitlik 3.27’de gösterildiği gibi elde edilmiştir [81].

$$\rho = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon_F^{3/2} \quad (3.27)$$

Kinetik enerji, elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak Eşitlik 3.28’de gösterildiği gibi hesaplanmış olur [79].

$$T[\rho(r)] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho(r)^{5/3} d^3(r) \quad (3.28)$$

Eşitlik 3.28’de gösterilmiş olan sistemin Hamiltonyeninin kinetik enerji ve Eşitlik 3.23 ve Eşitlik 3.24’de gösterilmiş olan potansiyel enerji kısımları böylece tamamlanmıştır. Sistemin enerji fonksiyoneli tanımlanırken eksik kalan değiş-tokuş potansiyelini Dirac (1930) ve Slater (1951)’de yapmış oldukları çalışmalarla tamamlamışlardır [79]. Korelasyon ise 1938’de Winger tarafından fonksiyonele dahil edilmiştir [77]. Böylece sistemin elektron yoğunluğuna bağlı enerji fonksiyoneli Eşitlik 3.29’daki halini almıştır.

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + V_{ne}[\rho(r)] + E_X[\rho(r)] + E_C[\rho(r)] \quad (3.29)$$

Enerjiyi minimum yapan yoğunluk değeri varyasyonel prensibiyle enerji fonksiyoneli kullanılarak elde edilir. Minimum enerjiyi elde edebildiğimiz yoğunluğun herhangi bir varyasyonu fonksiyonel olarak ifade edilen enerji için bir çözüm üretir. Bu nedenle homojen elektron dağılımı kullanılarak çözüme gitmek çok daha kolaydır. Eşitlik 3.30’da gösterildiği

gibi tüm uzay için alınan yoğunluk integralinin toplam yükü vermesi, minimizasyon yapmak için gerekli şarttır.

$$N = \int_{r=0}^{\infty} \rho(r) d^3(r) \quad (3.30)$$

O yıllarda sezgisel bir yaklaşım olan enerjinin tek bir değişken cinsinden yazılabilmesi fikrinin sağlam matematiksel temellere dayandırılması için uzun bir süre geçmesi gerekmiştir [80].

3.3.2.2 Hohenberg-Kohn teoremleri

Hohenberg ve Kohn 1964 yılında, Thomas ve Fermi tarafından yapılmış olan çalışmaları esas alarak iki önemli matematiksel teoremi ispatlayarak DFT'nin temellerini atmışlardır [72, 74]. Hohenberg-Kohn teoremlerinin [75] ilki dış potansiyelin etkisi altındaki elektronları içeren sistemlerle ilgilidir. Hohenberg-Kohn'un 1. teoremi “Bir $v(\vec{r})$ dış potansiyelindeki elektronlar sistemi için bu dış potansiyel bir sabit ile, $n(\vec{r})$ temel durum elektron yoğunluğu tarafından belirlenir.” şeklindedir. Bu teoreme göre; dış potansiyel ve dolayısıyla buna bağlı olan toplam enerji, elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak yazılabilir:

$$E[n(r)] = \int n(r) V_{dış}(r) dr + F[n(r)] \quad (3.31)$$

Bu eşitlikteki $F[n(r)]$ Hohenberg-Kohn fonksiyoneli ifade eder.

Deklem 3.31'de taban-durum dalga fonksiyonu ile taban-durum elektron yoğunluğu arasındaki ilişki açıkça görülmektedir. Elektron yoğunluğunu $n(\vec{r})$ şeklinde bir fonksiyonu olarak belirtirsek, taban-durum enerjisi $E[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli olarak ifade edilebilir, bu nedenden dolayı bu teorem “Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi” olarak da isimlendirilir. Bu teorem sayesinde üçün katları olacak şekilde değişkene bağlı bir dalga fonksiyonu yerine üç tane uzaysal değişken içeren tek bir fonksiyon (elektron yoğunluk fonksiyonu) ile Schrödinger eşitliğini çözmek mümkün hale gelir. Teorem bu çözüm kolaylığını sağladığı için ayrıca önemlidir [82].

Hohenberg-Kohn'un 2. Teoremi [75]; "Tüm elektron sistemleri için, $n(\vec{r})$ elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olan bir $E[n(\vec{r})]$ evrensel fonksiyonel tanımlanabilir. Temel durum enerjisi, verilen bir $v(\vec{r})$ dış potansiyeli için global minimumdur ve enerji fonksiyoneli minimize eden $n(\vec{r})$ yoğunluğu temel durum yoğunluğudur." şeklindedir. Bu ikinci teoreme göre $E[n(\vec{r})]$ fonksiyoneli uyarılmış elektron durumları hariç; tek başına temel durum enerjisini ve elektron yoğunluğunun durum enerjisi üzerine etkisini belirlemek için yeterlidir [83]. Böylece sistemi taban durum enerjisini toplam enerji fonksiyonelinin minimum değerinden elde etmek mümkündür [72, 74].

3.3.2.3. Kohn-Sham yaklaşımı

Kohn ve Sham 1965 yılında [76] Schrödinger eşitliklerinin çözümünün daha zor olduğu çok elektronlu sistemler için, elektronların birbirleriyle olan etkileşimlerini de dikkate alarak değişim ve korelasyon etkilerinin de içerisinde olduğu yeni bir formülasyon geliştirmişlerdir. Bu yaklaşımda bir elektron için çözülen Schrödinger eşitliği kullanılarak, bütün elektronlar için yaklaşık bir dalga fonksiyonu elde edilir. Kohn-Sham yaklaşımına ait formülasyon Schrödinger eşitliklerindeki toplam simgelerinin içermez. Çünkü bu eşitliklerin çözümleri sadece üç uzaysal değişkene bağlı olan $\phi_i(\vec{r})$ tek-elektron dalga fonksiyonlarıdır. Kohn-Sham yaklaşımının sağladığı bir diğer fayda ise, temel değişkeni olan elektron yoğunluğu kullanılarak, diğer tüm terimlerin bu değişken cinsinden ifade edilebilmesidir [72, 74]. Tek-elektron dalga fonksiyonları kullanılarak elektron yoğunluğu aşağıdaki gibi belirlenir [74]:

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (3.32)$$

Tek-elektron eşitliği ise

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' + V_{xc}(\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (3.33)$$

biçimindedir. Tek elektron eşitliklerine yapılan değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli olan $V_{xc}(\vec{r})$ şu şekilde tanımlanır:

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\vec{r})} \quad (3.34)$$

Eşitlik 3.32, Eşitlik 3.33 ve Eşitlik 3.34 aynı zamanda Kohn-Sham öz-uyum Eşitlikleri olarak bilinirler. Kohn-Sham özellikle Hohenberg-Kohn teoremlerindeki Eşitlik 3.31'de bulunan $F[n(r)]$ terimindeki eksikliği gidermek amacıyla bu yaklaşımı geliştirmişlerdir. Kohn-Sham yaklaşımlarında Hohenberg-Kohn fonksiyoneli ifade eden $F[n(r)]$ terimini; Eşitlik 3.35'de gösterildiği gibi kinetik enerji $T[n(r)]$, Coulomb potansiyeli E_{coul} ve değiş-tokuş-korelasyon enerjisi E_{XC} 'yi ayrı ayrı barındıracak şekilde yeniden düzenlemişlerdir.

$$E[n(r)] = T[n(r)] + E_{coul} + E_{XC} + \int n(r)V_{dış}(r)dr \quad (3.35)$$

Böylece Kohn-Sham potansiyeli V_{KS} olarak da bilinen ve Eşitlik 3.36'da gösterilmiş olan efektif bir potansiyel tanımlanmıştır.

$$V_{KS} = V_{coul} + V_{XC} + V_{dış} \quad (3.36)$$

Bu eşitlikte yer alan Coulomb potansiyeli;

$$V_{coul} = \frac{\delta E_{coul}}{\delta n} = \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr' \quad (3.37)$$

değiş-tokuş-korelasyon potansiyeli,

$$V_{XC} = \frac{\delta E_{XC}}{\delta n} \quad (3.38)$$

dış potansiyel,

$$V_{dış} = \frac{\delta E_{dış}}{\delta n} \quad (3.39)$$

şeklinde gösterilir.

Eşitlik 3.37, Eşitlik 3.38 ve Eşitlik 3.39; Eşitlik 3.36'da yerine yazılırsa elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olan Kohn-Sham potansiyeli aşağıdaki şekilde gösterilebilir [72].

$$V_{KS} = \frac{\delta E_{coul}}{\delta n} + \frac{\delta E_{XC}}{\delta n} + \frac{\delta E_{dış}}{\delta n} \quad (3.40)$$

3.3.2.4 Hellmann-Feynman teoremi

Hellman-Feynman teoremi, enerjinin keyfi bir λ parametresine göre türevinin, sistemin Hamiltoniyeninin türevinin beklenen değerine eşit olacağını ifade eder [72].

$$\frac{dE}{d\lambda} = \oint \psi^*(\lambda) \frac{dH\lambda}{d\lambda} \psi(\lambda) d\tau \quad (3.41)$$

Bu ifadede λ yerine x alırsak enerjinin konuma göre türevi kuvveti vereceğinden bu teorem ile atom üzerine etki eden kuvvet bulunabilir.

$$F = -\langle \psi \left| \frac{\partial H_{KS}}{\partial x} \right| \psi \rangle \quad (3.42)$$

DFT hesaplarında verilen bir atomik geometrinin optimizasyonu için Hellman-Feynman teorisi büyük öneme sahiptir.

3.3.3 Değiş-Tokuş Korelasyon Enerjisinin Önemi

Değiş-tokuş korelasyon enerjisi E_{XC} ; etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemi, elektron-elektron etkileşimi varmış gibi kabul edilmesi stratejisine dayanır. Değiş-tokuş korelasyon enerjisini [84],

$$E_{XC}[n(\vec{r})] = (T[n(\vec{r})] - T_s[n(\vec{r})]) + V_{e-e}[n(\vec{r})] - V_H[n(\vec{r})] \quad (3.43)$$

olarak ifade edebiliriz. Eşitlikteki ilk terim olan $(T[n(\vec{r})] - T_s[n(\vec{r})])$ elektron yük yoğunluğu fonksiyoneline bağlı kinetik enerjiyi, $V_{e-e}[n(\vec{r})]$ elektron-elektron etkileşme enerjisini ve $V_H[n(\vec{r})]$ Hartree enerjisini ifade eder. Değiş-tokuş korelasyon enerjinin (E_{XC}) bilinmesi sistemin taban durum enerjisinin bulunabilmesi için gereklidir [84]. Bu nedenle bilinmezlikten kurtulmak ve sistemin elektron dağılımı ve (E_{XC})'nin gerçeğe yakın şekilde belirlenebilmesi için yaygın olarak iki yaklaşım kullanılmaktadır. Bu yaklaşımlardan biri yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) diğeri ise yaklaşım ise genelleştirilmiş gradyent yaklaşımıdır (GGA).

3.3.3.1 DFT hesaplarının öz-tutarlı çözümü

DFT hesaplarında dikkate alınan sistem için Kohn-Sham eşitlikleri öz-tutarlı olarak çözülmelidir. Şekil 3.7’de öz-tutarlı hesabın adımları gösterilmiştir. Buna göre çözüm kısaca şöyle olmalıdır [72]:

- a. Sisteme tahmini bir başlangıç yoğunluğu $n(\vec{r})$ verilir.
- b. Eşitlik 3.40’dan Kohn-Sham potansiyeli (efektif potansiyel) hesaplanarak Hamiltonyen elde edilir.
- c. Elde edilen Hamiltonyen için Schrödinger eşitliği çözülür.
- d. Schrödinger eşitliğinin çözümüyle elde edilen dalga fonksiyonu ile yeni yoğunluk elde edilir.
- e. Elde edilen yoğunluk bitirme ölçütü sağlamıyorsa bu yeni yoğunluk ile yeniden efektif potansiyel oluşturularak adımlar tekrarlanır.
- f. En son elde edilen yoğunluk $n(\vec{r})$ daha önce bulunan ile örtüşüyorsa yani öz-tutarlı ise sistemin yoğunluğu bulunmuş olur.

Algoritma sonucunda üretilmiş olan elektron yoğunluğu $n(\vec{r})$ Eşitlik 3.18’de verilmiş olan Hartree potansiyelinde yerine yazılarak, sistemin taban durum enerjisi hesaplanır. Sistemin öz-tutarlı yoğunluğu bulunurken, Hellman-Feynman eşitliği (Eşitlik 3.41) kullanılarak sistem üzerindeki kuvvet (Eşitlik 3.42) de hesaplanır. Dikkate alınan sistemi oluşturan atomlar üzerindeki kuvvet (F) belli bir eşik değerinin altına düştüğünde, algoritma atomları daha fazla hareket ettirmeksizin, taban durumu konfigürasyonu için öz-tutarlı olarak elektronik taban durumunu hesaplayacaktır [72].



Şekil 3.7: DFT Hesaplarının Öz-Tutarlı Çözüm Şeması [72].

Bu yöntemin kesinliğini bozan etken Eşitlik 3.40’da belirtilmiş olan Kohn-Sham potansiyelindeki (V_{KS}) değiş-tokuş-korelasyon enerjisi E_{XC} terimidir.

$$E_{XC}[n] = \int n(r) \epsilon_{XC}[n(r)] dr \quad (3.44)$$

Bu eşitlikde elektron yoğunluğu $n(r)$, değiş-tokuş-korelasyon enerji yoğunluğu $\epsilon_{XC}[n(r)]$ ile gösterilmiştir.

Değiş-tokuş ve korelasyon terimi bilinmediği için bu ifadeyi enerjinin fonksiyoneli şeklinde ($E_{XC}[n]$) yazmak oldukça zordur. Kohn-Sham teoreminin en önemli kısmı bu terimi gerçekçi bir şekilde yazabilmektir. Bunu yapabilmek için çeşitli yaklaşımlar geliştirilmiştir. Bunlardan en yaygın kullanılanları Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) ve Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) dır. LDA yaklaşımı etkileşim enerjileri için türdeş olan elektron gazının çözümlerinden faydalanırken, GGA yaklaşımı yerel yoğunluğun yanı sıra yoğunluktaki değişimi (gradyan) de dikkate alır [72, 74].

Bu tez çalışmasında genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır.

3.3.3.2 Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) sistemin her bir yerel bölgesinin elektron yoğunluğunun aynı yoğunluğa sahip olan homojen elektron gazının davranışına yakın özellikler gösterdiğini önerir. Bir molekül veya katıdaki her bir noktanın belirli bir elektron yoğunluğuna sahip olduğu kabul edilen bu yaklaşıma göre her noktadaki elektronun, çevresindeki aynı yoğunluklu diğer elektronlarla aynı çok cisim etkileşimine maruz kalmaktadır. LDA'ya göre tüm moleküllerin veya bir katının toplam değiş-tokuş-korelasyon enerjisi, bütün hacim elemanları üzerinden alınacak katkıların integrali olarak verilirken, değiş-tokuş-korelasyon enerji yoğunluğu ise sadece yerel bir bölgedeki elektron yoğunluğuna bağlıdır.

LDA'da değiş-tokuş korelasyon enerjisi,

$$E_{XC}^{LDA}[n] = \int d^3r n(r) e_{XC}^{unif}(n(r)) \quad (3.45)$$

şeklinde verilir.

Buradaki $e_{XC}^{unif}(n)$ terimi, uzaysal olarak düzgün bir yoğunluğuna sahip olan elektron gazındaki parçacık başına düşen toplam değiş-tokuş korelasyon enerjisidir. Bu enerji Monte-Carlo hesaplamalarından elde edilebilir.

Bir hacim elemanından gelen katkı, yerel elektron yoğunluğuna bağlı olarak farklı olabilir. Eşitlik 1.30'da yer alan E_{XC} 'yi hesaplamak için literatürde farklı yöntemler mevcuttur. Bunlar arasında en çok kullanılan yaklaşım [85] yaklaşımıdır. Değiş-tokuş-korelasyon enerjisi (E_{XC}) iki kısma ayrıldığında;

$$E_{XC} = E_X + E_C \quad (3.46)$$

şeklinde yazılabilir.

Eşitlik 3.46'da aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisi (değiş-tokuş enerjisi) E_X ile, farklı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisi ise (korelasyon enerjisi) E_C ile gösterilmiştir [86]. Buradaki E_X ve E_C Hartree biriminde;

$$E_X = \frac{0.4582}{\tau_s} \quad (3.47)$$

$$E_c = \begin{cases} -0.0480 + 0.0311 \ln \tau_s, & \tau_s \geq 1, \\ -0.0116 \tau_s + 0.0020 \ln \tau_s, & \tau_s < 1, \end{cases} \quad (3.48)$$

şeklindedir. Eşitliklerde yer alan τ_s yoğunlukla ilişkili olup, bu ilişki;

$$\rho^{-1} = \frac{4\pi}{3} \tau_s^3 \quad (3.49)$$

şeklindedir. Değiş tokuş-korelasyon potansiyeli ise,

$$V_{XC} = E_{XC} - \frac{\tau_s}{3} \frac{dE_{XC}}{d\tau_s} \quad (3.50)$$

şeklinde ifade edilir.

LDA ile yapılan hesaplamalar ile deney sonuçları kıyaslandığında, atomlar arası bağlanma için elektron katkısını, bağlanma enerjisini, bant aralığını, fonon frekanslarını deney sonuçlarına göre daha büyük bulur. Kristal bulk örgü sabitini ise genellikle daha düşük bulur. Yine LDA yüzey ve ara yüzey hesaplamalarında ve dinamik hesaplamalar için fonon dispersiyon bağıntısı hesaplamalarında nispeten iyi sonuçlar verse de dielektrik sabitleri ve buna bağlı büyüklüklerin hesaplamalarında, zayıf bağlar ve Hidrojen bağlar hesaplamalarında çok iyi sonuçlar vermemektedir. LDA sabit elektron yoğunluğuna sahip olan saf metaller için kesin ve doğru sonuçlar verme başarısını, değişen elektron yoğunluğuna sahip sistemler için gösterememektedir [72, 87].

3.3.3.3 Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA)

Yerel yoğunluk yaklaşımından (LDA) bir adım daha ileri gidilerek oluşturulmuş olan genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA), LDA'ya ek olarak, her noktada elektronik yük yoğunluğunun (ρ) yanı sıra bu yoğunluğun gradyanının da ($|\nabla n(\vec{r})|$) hesaplanması gerektiği fikrine dayanır. Yoğunluk gradyenti büyük değerlere sahip olan malzemeler olabilir. Bazı malzemelerde yoğunluk gradyenti büyük değerlere sahip olabilir. Yoğunluğun uzaysal değişimini hesaba katan GGA, her türlü sistemlerde LDA'dan daha iyi sonuçlar

üretmesine de pek çok sistem için bağ uzunluklarını ve toplam enerjiyi daha tahmin ettiği görülmüştür [87, 88].

Fonksiyonellerin daha da geliştirilmesine katkı sağlamış olan GGA'da spin polarizesiz sistemler için değiş-tokuş korelasyon enerjisi:

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int d^3r f(n(r), \nabla n(r)) \quad (3.51)$$

şeklinde verilir.

LDA' da e_{xc}^{unif} inputu tek olmasına rağmen, GGA' da f fonksiyonu tek değildir ve pek çok farklı form önerilmiştir. GGA'nın elektronik yük yoğunluğu gradyanını da içine alan ve daha açık biçimde ifade eden diğer genel yaklaşım formülasyonu,

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int F_{xc}[n(\vec{r}), |\nabla n(\vec{r})|](d\vec{r}) \quad (3.52)$$

şeklinde gösterilir.

Birçok bilim insanının üzerinde çalışmış olduğu değiş-tokuş korelasyon enerjisi fonksiyoneli (F_{xc}) yerel yoğunluk yaklaşımı üzerine eklenerek Eşitlik 3.33'de gösterilmiş olan GGA'ya ait genel yaklaşım gösterimi elde edilmiştir [89].

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_x^{unif} F_{xc}(r_s, s) d\vec{r} \quad (3.53)$$

GGA üzerine devam eden gelişmeler sonucunda “meta-GGA” olarak isimlendirilen yeni bir fonksiyonel sınıfı önerilmiştir. meta-GGA fonksiyonelleri, yoğunluk ve birinci mertebeden gradyente bağlı olmalarının yanı sıra,

$$\tau(r) = \frac{1}{2} \sum_i^{occ} |\nabla \varphi_i(r)|^2 \quad (3.54)$$

şeklinde ifade edilen Kohn-Sham orbitallerinin kinetik enerji yoğunluğuna da bağlıdır. Bu durumda meta-GGA fonksiyoneli,

$$E_{XC}^{MGA}[n] = \int d^3r g(n(r), \tau(r)) \quad (3.55)$$

şeklinde olmaktadır.

Yeni bir değişkenin tanımlanması ile fonksiyonel formda kazanılan ilave esneklik, yaklaşıma daha fazla özelliğin dahil edilmesini ve diğer sonuçları etkilemeden bazı fiziksel özellikler için GGA'nın doğruluğunu artırmayı sağlamıştır. Yoğunluk fonksiyoneli olan LDA ve GGA'ya ek olarak meta-GGA'lar Kohn-Sham orbitallerine de bağlıdır. “meta-GGA” bu eklemeye rağmen hala DFT bölgesi içerisindedir. Çünkü Kohn-Sham eşitliğinde orbitaller Kohn-Sham potansiyelinin fonksiyoneli ve Hohenberg-Kohn teoremi gereği aynı zamanda yoğunluk fonksiyonelleridir. Üzerinde yoğun araştırmalar yapılan orbital fonksiyonelleri ve/veya gerçek yoğunluk fonksiyonelleri içerisinde en iyi bilinen orbital fonksiyonellerinin başında Eşitlik 3.56'da genel formu verilmiş olan “tam-değiş-tokuş-enerji” fonksiyoneli gelir.

$$E_x^{Exx}[n] = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d^3r \int d^3r' x \sum_{ij}^{occ} \frac{\varphi_{i\sigma}(r) \varphi_{i\sigma}^*(r') \varphi_{j\sigma}^*(r)}{|r - r'|} \quad (3.56)$$

Toplam enerji fonksiyoneli korelasyon ihmal edilip değiş-tokuş fonksiyoneli kullanılırsa Hartree-Fock fonksiyoneli elde edilir. Ancak tam değiş-tokuş değerine ulaşmak için Hartree-Fock orbitallerinden ziyade Kohn-Sham eşitliği kullanılır. Ortonormalite dışında bir sınırlama olmaksızın minimizasyondan elde edilen Hartree-Fock orbitalleri sayesinde, yerel olmayan Hartree-Fock potansiyelini elde ederiz. Aynı fonksiyoneli minimize ederek ve ek sınırlamalara tabi tutarak tam değiş-tokuş orbitallerini elde edebiliriz. Yani yerel potansiyellerden tek-parçacık orbitallerini elde edebiliriz. Bu sebeple toplam Hartree-Fock enerjisi her zaman tam değiş-tokuş enerjisinden azda olsa küçük çıkar. Yine her iki yaklaşım kıyaslanırsa, orbitaller ve orbital öz değerleri gibi tek parçacık özellikleri bu iki yaklaşım için birbirinden oldukça farklı şekilde elde edilir. Örneğin, Kohn-Sham tam enerji spektrumları, deneysel sonuçlara Hartree-Fock spektrumlarından daha yakındır. Bu da bize DFT'nin tam değiş-tokuş korelasyonunu dahil edebilmek için, Hartree-Fock spektrumundan daha uygun olduğunu gösterir.

GGA hesaplarında bağ uzunlukları ve örgü sabitleri katılar ve moleküller üzerine yapılan çalışmalarda deneysel sonuçlardan büyük, bulk modülü ise küçük çıkmaktadır. GGA'nın en iyi başarısını demirin manyetik momentini hesaplarken göstermiştir. Kristal yapısı bcc olan demirin taban durumunu GGA ferromanyetik olarak önerdiği halde, LDA fcc kristal yapıda taban-durumunun manyetik olmadığını önermiştir. Yine Hidrojen bağlarının tanımlanmasında GGA yaklaşımı büyük katkılar sağlamıştır. Zayıf bağlar öngören GGA yüzey enerji hesaplamalarında, LDA'dan daha düşük sonuçlar vermektedir. GGA'nın kohesif enerji hesaplamalarındaki doğruluğu LDA'dan biraz daha iyidir. Basit metallerin bant yapılarını LDA'da GGA'da deneysel sonuçlara oldukça yakın bulma yeteneğinde olmasına rağmen yarı iletkenlerin bant aralığını her iki yaklaşım da deneysel sonuçlardan daha düşük hesaplamaktadırlar.

DFT'de kullanılan her iki yaklaşımda tam çözüm yapabilme kabiliyetine ulaşabilirlerse, DFT'nin tam çözüm yapabilme yeteneğine katkı sağlayacakları açıktır. Bunun yanı sıra pahalı bilgisayar sistemleri gerektirseler de bant aralığı hesaplamalarında, tam değişim ve zamana bağlı DFT (ZB-DFT) ve Green Fonksiyonu (GW) metotları daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu eksiklik, meta-GGA veya hibrid fonksiyoneller gibi “tam değiş-tokuş fonksiyoneli” kullanılarak giderilebilir [87].

3.3.4 Düzlem Dalga Baz Setleri Ve Bloch Teoremi

Düzlem dalgaların doğrusal kombinasyonundan oluşan düzlem dalga baz seti temel baz setlerinden biri olup, ab-initio metodunun hesaplamalarında kullanılır. Sonsuz uzaysal boyuta sahip olan düzlem dalga baz setleri bütün uzayı kapsadıkları için atom çekirdeklerini merkez olarak kullanmazlar. Düzlem dalga seti kullanılırken periyodik sınır şartlarını belirlemek gerekir. Çünkü sonlu bir sistem için sonlu düzlem dalga seti kullanılamaz. Bu nedenden dolayı bilgisayar ortamında Kohn-Sham orbitalleri genellikle seçilen baz fonksiyonlarının toplamı olarak temsil edilir [90]. Tek elektronlu Kohn-Sham orbitallerinin düzlem dalgalar kullanılarak doğrusal açılımı Eşitlik 3.57'de gösterildiği şekilde formüle edilir.

$$\psi_i(\vec{r}) = \sum_{\alpha=1}^{Nf} C_{i\alpha} \varphi_{\alpha}(\vec{r}) \quad (3.57)$$

Eşitlik 3.57’de dalga fonksiyonunu belirleyen parametre i , bazdaki orbital sayısı N_f , $C_{i\alpha}$ baz fonksiyonlarının açılımındaki katsayılar $C_{i\alpha}$ ile gösterilmiştir. Periyodik sınır şartları ve Bloch Teoremine göre [91] dalga fonksiyonu:

$$\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_{\alpha=1}^{N_f} C_{i\alpha} \varphi_{\alpha}(\vec{r}) \quad (3.58)$$

şeklindedir. Brillouin bölgesindeki dalga vektörü $\vec{k}$ ile temsil edilmektedir. $\varphi_{\alpha}(\vec{r})$ fonksiyonu periyodik olduğu için bu fonksiyonu Eşitlik 3.59’da gösterildiği gibi Fourier serisi şeklinde açabiliriz.

$$\varphi_{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{G}} C_k(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (3.59)$$

Eşitlik 3.59’da ilkel birim hücre hacmi Ω , ters örgü vektörü $\vec{G}$, Fourier dönüşüm katsayıları ise $C_k(\vec{G})$ şeklinde gösterilmiştir. Böylece düzlem dalga baz fonksiyonları;

$$\varphi_{\vec{G}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (3.60)$$

şeklinde tanımlanır [92].

Kinetik enerji matrisini diklik şartlarını yerine getiren düzlem dalga baz fonksiyonlarını kullanarak elde ederiz. Yine de oluşturmuş olduğumuz kinetik enerji matrisine kesilim enerjisi şeklinde isimlendirdiğimiz (E_{cut}) sınırlılıklar koymamız gerekir. Bunu yapmadığımız takdirde baz setimiz sonsuz sayıda düzlem dalga içerir. Kesilim enerjisi Eşitlik 2.48’de gösterildiği şekilde formüle edilir.

$$E_{cut} = \frac{1}{2} |\vec{k} + \vec{G}|^2 < E_{cut} \quad (3.61)$$

3.3.5 Pseudopotansiyel Yaklaşım

Kor bölgesindeki güçlü titreşimleri tanımlamak için sınırlı düzlem dalga baz setleri kullanmak yetersiz kalır. Yapılan hesaplamaların gerçek değerlere yakınsayabilmesi ve güvenilir olması için çok sayıda düzlem dalga kullanmak hesaplama süresini çok fazla uzatacağı için iyi bir strateji değildir. Bu zorluğu ve işlem maliyetini ortadan kaldırmak için

geliştirilmiş olan tekniklerin başında daha az sayıda düzlem dalga kullanarak sonuca ulaşan pseudopotansiyel yaklaşımı gelir [90, 93, 94]. Çekirdeğe sıkıca bağlanmış olan kor elektronlarının değerlik elektronlarına kıyasla katıların fiziksel özelliklerini daha az etkiledikleri bilinmektedir. Kor elektronlarının bulunduğu kor bölgesindeki valans dalga fonksiyonları güçlü iyonik potansiyel nedeniyle, çok hızlı titreşirler. Pauli dışarlama ilkesi gereği kor dalga fonksiyonları ve valans dalga fonksiyonları arasındaki ortogonalite bu yüksek hızdaki titreşim sayesinde korunur [95]. Pseudopotansiyel yaklaşımı, yüksek enerji salınımlarına sahip elektronların bulunduğu kor bölgesini elektron titreşiminin daha az olduğu düzgün bir pseudo kor bölgesi ile değiştirerek; Kohn-Sham Hamiltonyen matrisinin boyutlarının azaltılmasını hedeflemektedir. Pseudopotansiyel yaklaşımı bunu yaparken çekirdek etrafındaki kimyasal olarak aktif olmayan kor elektronlarını dışarıda tutarak, kordan kaynaklanan gerçek Coulomb potansiyeli yerine sadece değerlik elektronlarına etki eden ancak orijinal potansiyele benzeyen sahte potansiyel olarak da isimlendirilen pseudopotansiyel adını verdiğimiz yeni ve daha zayıf bir potansiyel kullanır. Bu yaklaşım donmuş çekirdek (frozen core) yaklaşımı olarak da düşünülebilir.

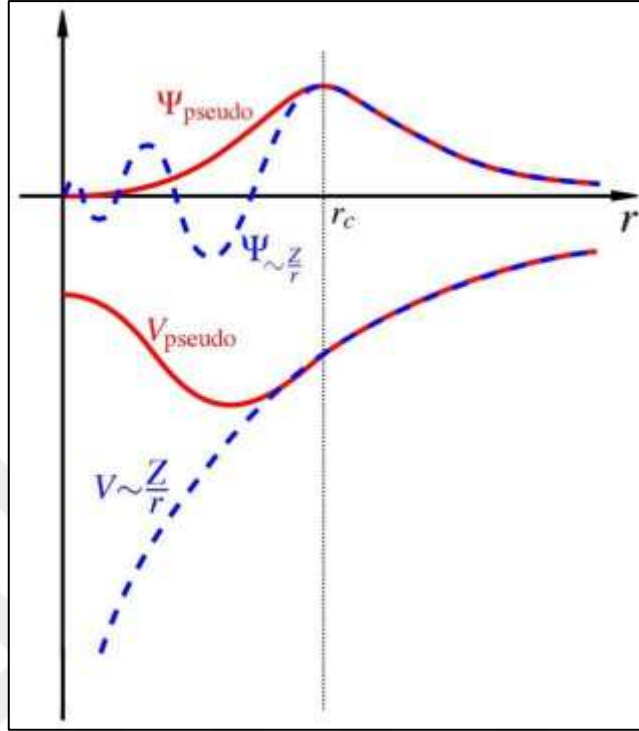
Pseudo dalga fonksiyonlarının saçılma özellikleri veya faz kaymaları, valans dalga fonksiyonlarının iyon ve kor elektronlarının saçılma özelliklerine denk olacak şekilde ideal olarak üretiliyor olmasına rağmen bu yolla üretilmiş olan pseudo dalga fonksiyonu kor bölgesinde radyal düğümleri barındırmaz. İyon ve kor elektronları tarafından kor bölgesinde üretilen toplam faz kayması, valans fonksiyonlarının bu bölgede sahip olduğu her bir düğüm için, iyon ve valans elektronları tarafından üretilen faz kaymasından π kadar büyük olacaktır. İki potansiyelin birbirine denk olduğu kor bölgesinin dışında kalan alanda bu iki potansiyeli birbirinden ayırmak güçtür. İyon kor tarafından üretilen faz kayması, valans dalga fonksiyonunun her bir açısal momentum bileşeni için farklı olduğundan dolayı pseudopotansiyelden saçılma, açısal momentuma bağlı olmak zorundadır.

Pseudopotansiyeli genel haliyle Eşitlik 3.62’de gösterildiği gibi yazılabilir.

$$V_{NL} = \sum_{lm} |lm\rangle V_1 \langle lm| \quad (3.62)$$

Burada, küresel harmonikler $|lm\rangle$, V_1 ise l açısal momentumu için pseudopotansiyeli temsil etmektedir. Dalga fonksiyonu, bu operatör ile elektronik dalga fonksiyonu üzerine etki

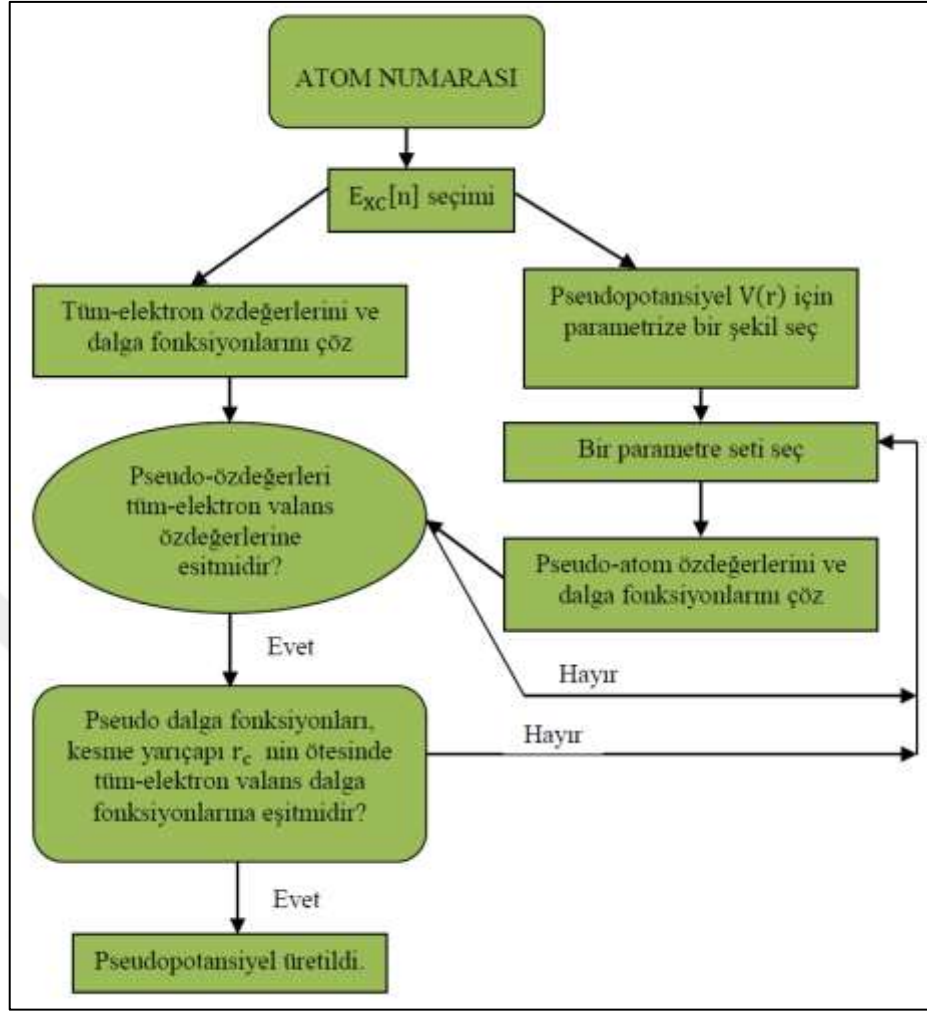
edilerek, her biri daha sonra uygun pseudopotansiyel V_1 ile çarpılan küresel harmonikler içerisinde ayrılır. Pseudopotansiyel'in sağladığı kolaylık Şekil 3.8'de görülebilmektedir.



Şekil 3.8: Pseudopotansiyel ve Pseudo Dalga Fonksiyonu Şematik Gösterimi [95].

Şekil 3.8'de gerçek dalga fonksiyonu ve potansiyeli devamlı kırmızı çizgilerle, sahte dalga fonksiyonu ve potansiyeli ise kesikli mavi çizgiler kullanılarak gösterilmiştir. r_c ise kor yarıçapıdır.

Çekirdeğe olan uzaklığın fonksiyonundan ibaret olan yerel pseudopotansiyeli, dalga fonksiyonunun tüm açısal momentum bileşenleri için aynı potansiyeli kullanır. Pseudopotansiyel için çok önemli olan yumuşaklığı ve düzgünlüğü korumak için farklı açısal momentum durumlarında ayarlanabilen faz kaymalarının miktarında sınırlamalar olsa da Yerel potansiyeli olan her bir açısal momentum durumu için, keyfi ve önceden belirlenmiş faz kaymalarını üretmek mümkündür. Düzgün ve yumuşak bir pseudopotansiyel olmadan, dalga fonksiyonlarını yeterli sayıda düzlem-dalga bazı kullanarak açmak oldukça güçtür [95, 96].



Şekil 3.9: Pseudopotansiyel Üretimini Tarif Eden Akış Diyagramı [95].

3.4 KATILARIN MANYETİK ÖZELLİKLERİ

Kristal yapıları, elektronik yapılarına göre ve aynı zamanda manyetik özelliklerine göre sınıflandırılmalı katılar; manyetik alan uygulandığında manyetik özelliklerinden dolayı atomik seviyelerinde ki tepkileri birbirinden farklıdır. Manyetik özelliklerine göre diyamanyetik, paramanyetik, ferromanyetik, ferrimanyetik ve antiferromanyetik olarak sınıflandırılabilen katılar içerisinde şayet diyamanyetik etki oldukça zayıfsa bu tür katılar genellikle manyetik olmayan katılar denir. Manyetik özellikleri (manyetizma) değiştikçe katılar birbirinden farklı davranışlar sergilerler.

3.4.1 Diyamanyetizma

Ortak etkilerinden dolayı çok güçlü bir etkiye sahip olabilen ve tüm katıların ortak özelliği olan diyamanyetizmadan kaynaklanan manyetizma, uygulanan manyetik alanın zıttı

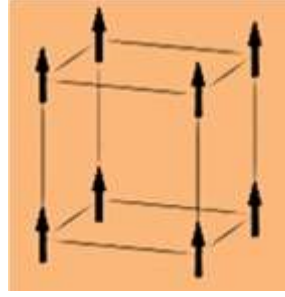
yönünde oluşur. Diyamanyetizmanın etkisi (mükemmel diyamanyetik katılar hariç) genellikle manyetizmanın diğer çeşitleriyle karşılaştırıldığında oldukça zayıftır. Manyetik alan altındaki atomların elektronlarının yörüngesel hareketlerinden meydana gelen diyamanyetizma, aynı zamanda elektronların bu yörüngesel hareketlerini kullanarak yeni ve uygulanan manyetik alana zıt yönlü yeni bir manyetik alan oluşumuna neden olacak mikroskobik ölçekli akım ilmeklerinin üretilmesine neden olur. Diyamanyetik etkiden başka manyetik etkinin bulunmadığı durumlarda diyamanyetik etki aynı zamanda rezidual manyetik etki olarak da adlandırılır.

3.4.2 Paramanyetizma

Atomların elektronlarının net spinleri sıfır değil ise, bu spinlerden kaynaklanan manyetik momentler, dış bir manyetik alanın etkisi altında kaldıklarında aynı hızaya gelmeye çalışarak paramanyetizmayı oluştururlar. Bir katı içerisinde bulunması durumunda diyamanyetizmadan daha güçlü etkiye sahip olan paramanyetizmanın neden olduğu manyetizasyon uygulanan manyetik alanın yönünde ve lineerdir. Ayrıca paramanyetizma uygulanan manyetik alanın şiddetiyle de doğru orantılıdır. Dışarıdan uygulanan manyetik alan süresince paramanyetik özellik taşıyan bir katıdaki manyetik momentler aynı hızaya gelmeye çalışırlar. Ancak uygulanan bu dış manyetik alan kaldırıldığı an bu dizilim son bulur.

3.4.3 Ferromanyetizma

Diyamanyetik ve paramanyetik etkilerle karşılaştırıldığında çok daha büyük bir etkiye sahip olan ferromanyetizma, bazı katılarda uygulanan manyetik alandan daha büyük bir şiddete sahip bir manyetizasyona neden olabilir. Ferromanyetik özellik gösteren en bilindik katılar demir (Fe), kobalt (Co) ve nikel (Ni) elementleridir. Atomların elektronlarının net spinlerinin sıfır olmamasından kaynaklanan ferromanyetizma, bazı katıların kalıcı olarak mıknatıslanmasının veya bir mıknatıs tarafından çekilme veya itilmesinin anlaşılmasında temel mekanizmadır. Net spinlerin sıfırdan farklı olmasından kaynaklanan manyetik momentler, bir dış manyetik alan uygulandığında aynı hızaya gelmeye çalışırlar. Uygulanan bu dış manyetik alan ortadan kalksa dahi manyetik momentlerin hizalanması bozulmaz. Bu özelliği gösterebilen katılar, kalıcı mıknatıslar, ferromanyetik ve ferrimanyetik malzemelerdir. Ferromanyetik bir katı içerisinde ki manyetik momentler Şekil 3.10'de gösterilmiştir. Örgü noktalarındaki oklar manyetik momentleri temsil etmektedir.

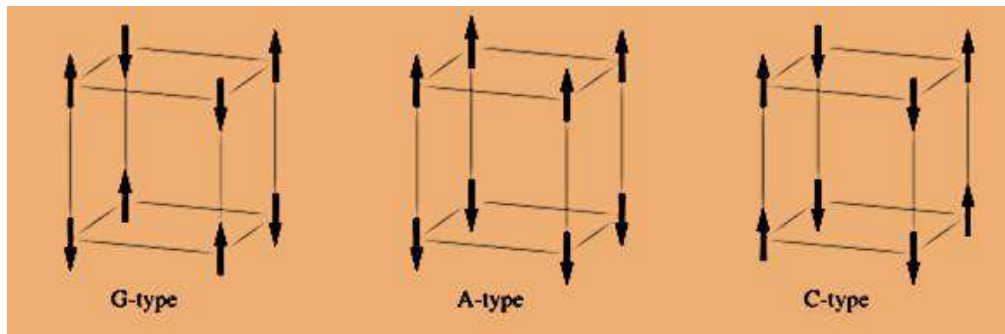


Şekil 3.10: Ferromanyetik Bir Kristal İçindeki Manyetik Momentler (Basit Kübik Kristal) [95].

Curie sıcaklığı (T_c) tüm ferromanyetik özellikli katıların karaktersitik özelliğidir. Curie sıcaklığının üzerine çıkıldığında, düzensiz fazdaki enerjideki düşüş ferromanyetik fazdaki enerjideki düşüşten daha fazla olacağı için malzeme ferromanyetik özelliğini kaybeder. Bu nedenden dolayı Curie sıcaklığına (T_c) ferromanyetik kritik sıcaklık da denilir.

3.4.4 Antiferromanyetizma

Antiferromanyetik özellikli bir katı birbirine zıt yönde yönelmiş, esasen büyük ve toplam manyetizasyonları sıfır olan iki adet ferromanyetik alt sisteme sahiptir. Bu nedenden dolayı bir antiferromıknatis tarafından üretilen bir manyetik alan yoktur. Antiferromıknatisların sıcaklıkları değiştirildiğinde diyamanyetik veya ferrimanyetik özellik sergilediği görülebilir. Manyetik momentlerin yönlerinin farklı yollarla düzenlenmesi ile katı içerisindeki toplam manyetizasyon sıfır yapılabilir. Antiferromanyetik düzenin Şekil 3.11’de soldan sağa doğru sırasıyla gösterildiği gibi G-tipi, A-tipi ve C-tipi olmak üzere üç farklı tipi vardır.



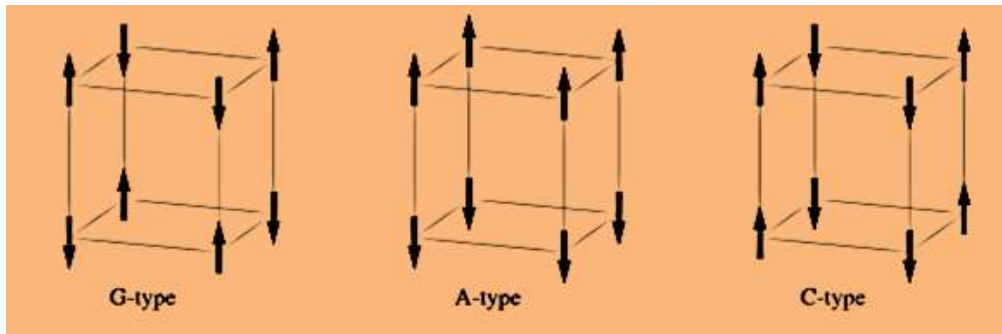
Şekil 3.11: Antiferromanyetik Düzenlerin Şematik Gösterimi (Basit Kübik Kristal) [95].

En yakın komşu manyetik momentlerin daima zıt yönlerde olduğu form G-tipi antiferromanyetik düzendir. A-tipi ve C-tipi antiferromanyetik düzende ise iki boyutlu örgü

düzlemindeki katı ferromanyetik görünümündedir. Düşük sıcaklıklarda meydana gelen antiferromanyetik düzen, Neel sıcaklığının (T_N) üzerindeki değerlerde ortadan kalkarak katı paramanyetik özellik kazanır. Bu nedenden dolayı Neel sıcaklığı (T_N) antiferromanyetik kritik sıcaklık olarak da isimlendirilir. Antiferromanyetizmayı en yakın komşu manyetik momentler arasındaki antiferromanyetik yer değiştirme etkileşimi olarak açıklayabiliriz. Bunun yanı sıra ferromanyetik ve antiferromanyetik form arasındaki yer değiştirme etkileşimi neticesinde çok daha kompleks manyetik yapılar ortaya çıkabilir. Manyetik alan altında kalan antiferromanyetik faz özellikleri taşıyan katı, manyetik alanın net manyetizasyonu sıfırdan farklı yaparak alt örgünün manyetizasyon değerinin diğer alt örgü manyetizasyon değerinden farklı olmasına neden olacağı için, bir çeşit ferrimanyetik gibi davranmaya başlayabilir. Antiferromagnetizmin manyetik duygunluğu Neel sıcaklığında en üst değerine çıkar. Eğer bu manyetik duygunluk değeri bu değerden saparak farklı bir değer alırsa ferromanyetik faza geçmeye başlamıştır diyebiliriz. Antiferromanyetik faza geçiş için ise bu farklılık yayılma duygunluğu (staggered susceptibility) içerisinde meydana gelir.

3.4.5 Ferrimanyetizma

Ferromanyetik alt sistemlerin manyetizasyonu tam olarak yok olmadığında ve net bir manyetizasyon meydana geldiğinde ferrimanyetizma özelliği ortaya çıkar. Antiferromanyetizmada olduğu gibi ferrimanyetik düzenlerinde Şekil 3.12’de gösterildiği gibi soldan sağa doğru sırasıyla G-tipi, A-tipi ve C-tipi olmak üzere üç farklı tipi vardır. Dikkat edilirse (manyetik momentlerin tam olarak yok olmadığı durumlar hariç) manyetik yapılar Şekil 3.11’de gösterilmiş olan yapıların aynısıdır.



Şekil 3.12: Ferrimanyetik Düzenlerin Şematik Gösterimi (Basit Kübik Kristal) [95].

3.5 KATILARIN ELEKTRONİK BANT YAPISI

Bir atomdaki elektronlar aşağıda tanıtılmış olan beş adet kuantum sayısı ile (n, l, m_l, s, m_s) temsil edilirler.

n : Orbitalin enerjisini ve büyüklüğünü tanımlayan; 1,2,3,... değerlerini alan baş kuantum sayısı

l : Orbitalin şeklini belirleyen; 0,1,2,...,($n-1$) değerlerini alan; yörünge açısal momentum kuantum sayısı

m_l : Orbitalin yönelmesini belirleyen; $-l$ 'den $+l$ 'ye kadar ($2l+1$) tane değer alabilen yörünge açısal momentumunun manyetik kuantum sayısı

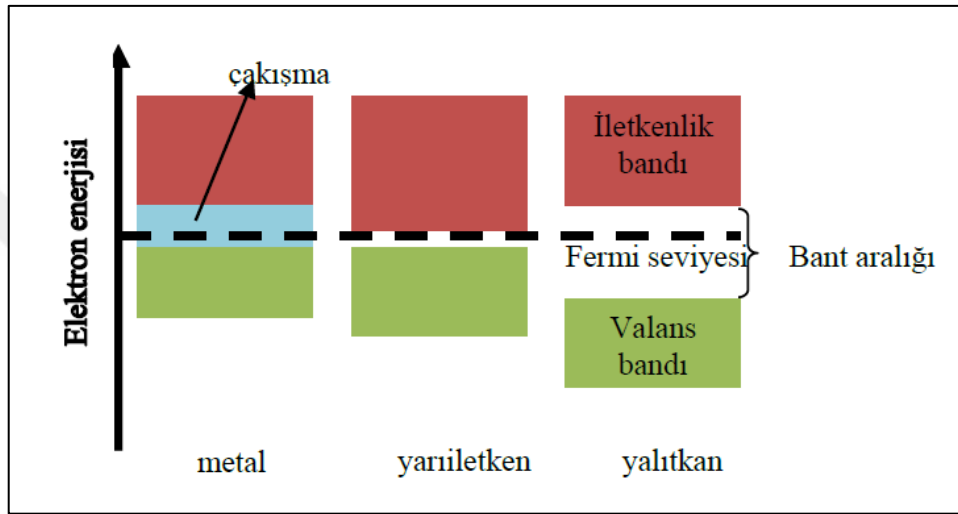
s : spin açısal momentum kuantum sayısı olarak adlandırılır ve $1/2$ değerini alır.

m_s : Elektronun dönme yönünü belirleyen; $+1/2$ ve $-1/2$ değerini alan spin açısal momentumunun manyetik kuantum sayısı

Elektronlar, yukarıda tanımlanan n ve l değerleri ile belirlenen ayırık enerji seviyelerini işgal edebilirler. Aynı beş kuantum sayısının aynı anda birden fazla elektron tarafından kullanılamaması Pauli dışarlama prensibinin gereğidir. Bunlardan birinin mutlaka farklı olması gerekmektedir. Bu prensip enerji seviyelerinin işgali içinde geçerlidir. Katı içerisinde ki kapalı bir hacime yakından bakarsak çok sayıda uyarılmamış atomun birbirine yakın durumda bulunduğunu görürüz. Birbirinden çok uzaktaki atomlar uyarılmış atom gibi davranırsa da birbirlerine yaklaştıkça, en dış yörüngedeki elektronlar enerjilerini etkileyecek şekilde birbirleriyle etkileşmeye başlarlar. Yaklaşık 10^{23} tane atom barındıran makroskobik bir kristal sadece birkaç eV kadarlık enerji seviyesi kaplar. Buda komşu enerji seviyelerinin birbirine çok yakın olmasına ve sürekli enerji bandı oluşturmuşçasına davranmasına neden olur. Benzer durum iç yörüngedeki elektronlar içinde geçerli olsa da bu bölgedeki elektronlar kendi çekirdeklerine daha yakın oldukları için etkileşme çok zayıf kalır. Bu sayede bu bölge ki bant daha küçük bir enerji aralığını kapsar. N tane atom birbirleriyle etkileşecek şekilde birbirine yaklaştırılırsa, atomik enerji seviyelerinin her biri birbirine yakın N tane alt seviyeye ayrılır. 10^{23} gibi çok büyük bir değere sahip olan N sayesinde alt seviyelerin birbirine aşırı yakın oluşu sayesinde enerji seviyelerindeki kesiklik sürekliliğe dönüşür ve sürekli bir enerji bandı gibi davranmaya başlar. Bu nedenden dolayı katıların atomlarındaki

kesikli enerji seviyeleri (1s, 2s, 2p ...) yerini katının spektrumunu oluşturacak olan sürekli enerji bantlarına (1s, 2s, 2p...) bırakır.

Enerji bantları elektron tarafından işgal edilemeyen ve yasak enerji aralığı olarak isimlendirilen, enerji bölgeleri oluşturacak şekilde birbirlerinden kesin bir şekilde ayrılabilirler. Katılar bu yasak enerji bant aralıklarındaki pozisyonlarına göre Şekil 3.13’de gösterildiği gibi sınıflandırılabilirler.



Şekil 3.13: Yasak Enerji Aralıklarına Göre Katıların Sınıflandırılması [95].

Metallerde izinli bant içinde bulunan Fermi enerjisi (E_F) sayesinde iletkenlik bandı ile valans bandı arasındaki boşluk (yasak aralık) yok denecek kadar küçüktür. Bu nedenden dolayı metallerin elektriksel iletkenlikleri oldukça yüksektir. Yalıtkanlarda elektronlar tarafından doldurulmuş olan valans bandı ile tamamen boş olan iletim bandı 3 eV ya da daha büyük değerdeki yasak enerji aralığı (E_g) ile birbirinden ayrılmış durumdadır. Fermi enerjisi bu yasak enerji aralığında yer alır. Yarıiletkenin bant yapısı yalıtkaninkine benzerdir. Sadece yalıtkandan daha küçük bir yasak enerji aralığı kullanır ve bu aralık değeri 0-3 eV kadardır. Bu küçük yasak bant aralığı termal yolla bile uyarıldığında valans bandından iletkenlik bandına elektron geçişine izin verebilir. Yarıiletken bu dar yasak enerji bandı sayesinde iletkenlik bandında birçok izinli enerji seviyesi bulabilen elektron sayesinde metallerde olduğu gibi elektriksel iletkenlik yeteneği kazanabilir. Bu formlar Şekil 3.13’de görselleştirilmiştir [95].

3.6 OPTİK ÖZELLİKLER

Bir kristalin optiksel tepkisi frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonu ile belirlenebilir. Frekansa bağlı kompleks dielektrik fonksiyonunu kullanmak bir kristalin optik özelliklerini belirlemenin ilk aşamasıdır [83].

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (3.63)$$

Eşitlik 3.63'ün bileşenleri olan kompleks dielektrik fonksiyonun reel kısmı ($\varepsilon_1(\omega)$) ve sanal kısmını ($\varepsilon_2(\omega)$) kullanarak bulmak istediğimiz tüm optik tepki bilgisine ulaşabiliriz. Eşitlik 3.64'de açık hali gösterilmiş olan dielektrik fonksiyonun reel $\varepsilon_1(\omega)$ ve sanal $\varepsilon_2(\omega)$ bileşenleri;

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \oint_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3.64)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \oint_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

aslında Kramers-Kronig bağıntılarıyla da gösterildiği üzere birbiriyle ilişkilidir. Eşitlik 3.64 genellikle tensör formundadır. Eşitlik 3.65'de gösterilmiş olan dielektrik tensörü;

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

şeklinde 2-ranklı 9 bileşenli yapıya sahiptir.

Katının üzerine düşen ışık, zamana bağlı elektromanyetik pertürbasyona neden olur ki bu duruma elektronların verdiği tepki bir katının optik özelliklerini belirler. Bu ilişkiden dolayı bir katının optik özelliklerini hesaplamak için kompleks dielektrik fonksiyonunu (optik tepki fonksiyonu) hesaplamak gerekir.

Dielektrik tensörünün bileşenlerinin sanal kısımları;

$$\text{Im}\epsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \text{Im}\epsilon_{xx} & \text{Im}\epsilon_{xy} & \text{Im}\epsilon_{xz} \\ \text{Im}\epsilon_{yx} & \text{Im}\epsilon_{yy} & \text{Im}\epsilon_{yz} \\ \text{Im}\epsilon_{zx} & \text{Im}\epsilon_{zy} & \text{Im}\epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

kullanılarak Eşitlik 3.64'de gösterilen Kramers-Kronig bağıntıları yardımıyla reel bileşenleri de hesaplanabilir.

Eşitlik 3.65'de verilmiş olan dielektrik tensörünün çeşitli kristal simetriler nedeniyle aslında maksimum 6 tane bağımsız bileşeni bulunur [97]. İzotropik veya optik eksenini bulunmayan kübik kristaller için; köşegen bileşenlerinin birbirine eşit olmasından dolayı kübik kristallerde dielektrik tensörü Eşitlik 3.67'de gösterildiği gibi tek bağımsız bileşene sahiptir.

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \epsilon \quad (3.67)$$

Tek optik eksenli sistemlerde (tetragonal, altıgen, trigonal vb.) dielektrik tensörünün Eşitlik 3.68'de gösterildiği üzere ikisi birbirine eşit olacak şekilde sadece 2 farklı bağımsız köşegen elemanları vardır.

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz} \quad (3.68)$$

İki optik eksene sahip ortorombik yapıdaki kristallerde ise Eşitlik 3.69'da gösterildiği üzere üç bağımsız bileşen oluşturacak şekilde köşegen elemanları birbirinden farklıdır.

$$\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz} \quad (3.69)$$

İki optik eksenini bulanan monoklinik kristaller köşegen olmayan bileşenlere de sahip oldukları için, Eşitlik 3.70'de gösterildiği gibi dört tane bağımsız bileşen barındırırlar.

$$\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \epsilon_{xz} = \epsilon_{zx} \quad (3.70)$$

İki optik eksenini bulanan triklinik sistemler Eşitlik 3.71'de gösterildiği gibi altı tane bağımsız bileşene sahiptir.

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx}, \epsilon_{xz} = \epsilon_{zx}, \epsilon_{yz} = \epsilon_{zy}, \epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz} \quad (3.71)$$

Dielektrik fonksiyonun reel $\epsilon_1(\omega)$ ve sanal kısımları $\epsilon_2(\omega)$; kırılma indisi $n(\omega)$, soğurma katsayısı $\alpha(\omega)$, sönümlenme katsayısı $k(\omega)$, yansıma $R(\omega)$ ve enerji-kayıp fonksiyonunu $L(\omega)$ hesaplamak için yeterlidir.

Dielektrik tensörünün bileşenleri kullanılarak; kırılma indisi ($n(\omega)$) Eşitlik 3.72’de, sönümlleme katsayısı ($k(\omega)$) Eşitlik 3.73’de, soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) Eşitlik 3.74’de, yansıma ($R(\omega)$) Eşitlik 3.75’de ve enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) Eşitlik 3.76’da gösterildiği gibi hesaplanabilir.

$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.72)$$

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.73)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.74)$$

$$R(\omega) = \frac{(n(\omega) - 1)^2 + k^2(\omega)}{(n(\omega) + 1)^2 + k^2(\omega)} \quad (3.75)$$

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]} \quad (3.76)$$

Soğurma süreci hakkında bilgi veren iki toplam kuralından [98]; ilki Eşitlik 3.77’de gösterilmiş olan ve birim hücre başına düşen valans elektronlarının etkin sayısını veren N_{eff} , diğeri ise Eşitlik 3.78’de gösterilmiş olan ve sıfır ile E_0 enerji aralığındaki bantlar arası geçişlerin dielektrik sabiti $\varepsilon(0)$ 'a katkısını belirleyen etkin optik dielektrik sabiti ε_{eff} ’dir.

$$N_{\text{eff}}(E) = \frac{2m\varepsilon_0}{\pi\hbar^2 e^2 N_a} \int_0^{E_0} \varepsilon_2(E) E dE \quad (3.77)$$

$$\varepsilon_{\text{eff}}(E) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{E_0} \varepsilon_2(E) E^{-1} dE \quad (3.78)$$

Eşitlik 3.77’de kristaldeki atomların yoğunluğu (N_a), elektronun yükü (e), elektronun kütlesi (m) ve boş uzayın dielektrik geçirgenliği ($\epsilon(0)$) ile gösterilmiştir [99].

3.7 ELEKTROMANYETİK KALKANLAMA ETKİNLİLİĞİ (SE)

Belirlenmiş bir alanın ya da malzemenin elektromanyetik girişimden etkilenmeyecek şekilde kaplanarak izole edilmesi işlemine zırhlama (kalkanlama) denir. Bu aynı zamanda elektromanyetik radyasyondan korunmanın en iyi yoludur. İletim yolundaki elektromanyetik dalganın yayılmasını veya nüfuziyetini engellemek için yapılan zırhlama malzemesine de kalkanlama malzemesi denir. Elektromanyetik dalganın bu vesileyle zayıflatılması kalkan olarak görev yapan malzemeye ulaşan radyasyonun ve bu malzeme ile etkileştikten sonraki radyasyonun güçlerinin birbirine oranı ise ekranlama etkinliği (SE) olarak isimlendirilir ve desibel (dB) cinsinden ifade edilir. Elektromanyetik dalga elektriksel gücü ve manyetik gücü içerisinde barındırdığı için kaybolan güç de elektriksel ve manyetik kayıp güçlerin toplamı kadardır. Ekranlama nedeniyle kaybolan bu toplam güç kaybı ise (SE_T) ile ifade edilir.

Birimi dB olan toplam elektromanyetik koruma etkililiği (SE_T) Eşitlik 3.79’da gösterildiği gibi gelen ve iletilen gücün (P) ya da elektrik alınının (E) logaritmik oranından ibarettir [100].

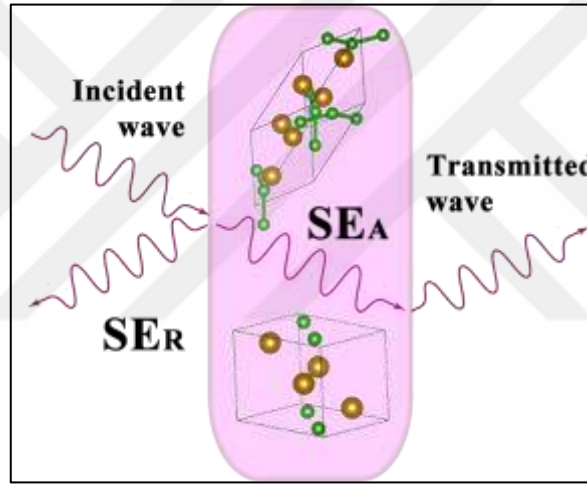
$$SE_T(dB) = 10 \log \frac{P_T}{P_I} = 20 \log \frac{E_T}{E_I} \quad (3.79)$$

Bu kaybın nedenlerinden biri kalkanlama malzemesine gelen dalganın bir kısmının malzeme tarafından ısı enerjisi şeklinde emilerek soğulması diğer nedeni ise malzemeye ulaşan dalganın hava ve malzeme arasındaki empedans uyumsuzluğu nedeniyle yansıtılmasıdır. Absorpsiyonun neden olduğu kayıp (SE_A), yansımanın neden olduğu kayıp ise (SE_R) ile ifade edilir. Kalkanlama malzemesinin kalınlığına bağlı olarak malzeme içerisine nüfuz edebilmiş olan radyasyon çoklu iç yansımada yapar ve bu eylemin neden olduğu çok küçük bir kayıp daha vardır ki bu da çoklu iç yansımanın (ikincil yansıma) neden olduğu kayıp (SE_M) dir. Ancak yansıma ve soğurmanın neden olduğu kaybın yanında çok küçük kaldığı için çoğu kez ihmal edilir [101, 102].

Schelkunoff’un teorisine göre, bazı elektromanyetik dalgaların direk olarak yansımasının nedeni uzaysal empedans ile koruyucu malzemenin doğal empedansı arasındaki uyumsuzluktur. Elektromanyetik dalganın yansımayan kısmı koruyucu malzeme tarafından

emilir. Bir iletken malzemedeki elektriksel dipol veya manyetik dipollerin elektromanyetik alan ile etkileşimi soğurma kaybına (SE_A) neden olur. Soğurmaya bağlı kalkanlama etkinliği (SE_A) elektromanyetik dalganın türünden bağımsız olsa da kullanılan kalkanın kalınlığı, iletkenliği, geçirgenliği ve gelen dalganın frekansının artması SE_A 'nın artmasına neden olur. Öte yandan yansımaya bağlı kalkanlama etkinliği (SE_R) kalkan olarak kullanılan malzemenin yüksek iletkenliği ve düşük geçirgenliği arttıkça artar. Emici tip koruyucu malzemelerde soğurma etkisinin yansımaya etkisinden büyük, yansıtıcı tip malzemelerde ise yansımaya etkisi soğurma etkisinden büyüktür [103].

Şekil 3.14'de EMI koruma mekanizmasının temelini oluşturan yansımaya (SE_R), soğurma (SE_A) ve çoklu iç yansımaların (SE_M) neden olduğu kalkanlama etkililiği gösterilmektedir.



Şekil 3.14: EMI Koruma Mekanizmasının Şematik Gösterimi.

Schelkunoff teorisine göre [104], toplam kalkanlama etkinliği (SE_T); yansımadan kaynaklı kalkanlama etkisi (SE_R), soğurmaya kaynaklı kalkanlama etkinliği (SE_A) ve çoklu iç yansımadan kaynaklı kalkanlama etkinliğinin (SE_M) sağlamış olduğu zayıflamaların toplamıdır [100].

$$SE_T = SE_R + SE_A + SE_M \quad (3.80)$$

SE_T değerinin 15 dB'den büyük olduğu durumlarda etkisi çok küçük olan çoklu yansımaya kaybı etkisi (SE_M) genellikle ihmal edilebilir [12, 101] Bu durumda toplam ekranlama etkinliği;

$$SE_T = SE_R + SE_A \quad (3.81)$$

şeklinde yazabiliriz.

Soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkisi Eşitlik 3.82’de, yansıtılmadan kaynaklı kalkanlama etkisi Eşitlik 3.83’de ve toplam etkililiği ise Eşitlik 3.84’de gösterilmiştir. Bu eşitliklerde T, kalkanlama malzemesinin iç kısmına giren giriş gücünün fraksiyonunu ifade eden iletim katsayısı, R ise kalkanın yüzeyinden yansıyan giriş gücünün fraksiyonunu ifade eden yansıma katsayısını gösterilmektedir [101].

$$SE_A = 10 \log \left(\frac{1-R}{T} \right) \quad (3.82)$$

$$SE_R = 10 \log \left(\frac{1}{1-R} \right) \quad (3.83)$$

$$SE_T(dB) = SE_A + SE_R = 10 \log \left(\frac{1}{T} \right) \quad (3.84)$$

4. MATERYAL VE YÖNTEM

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) Hohenbergin elektron yoğunluğunun potansiyeli dolayısıyla da Hamiltoniyen operatörünün ($\hat{H}$) bu sayede belirlenebileceği ve Kohn'un belirli bir yük yoğunluğu kullanılarak tün durumlardaki ψ_i fonksiyonun hesaplanabileceği, şeklinde iki temel teorem üzerine kurulmuştur [105]. Varyasyon prensibi üzerine temellendirilmiş olan ikinci teorem için; herhangi bir pozitif belirli bir ρ_t yoğunluğu için $\int \rho_t(r)dr = N$ geçerli olup $E(\rho_t) \geq E_0$ eşitsizliği sağlanmalıdır. Yani taban durum enerjisi E_0 sistemin enerjisi için bir test yoğunluk fonksiyonelininkinden ($E(\rho_t)$) daha düşüktür. Yoğunluk fonksiyon teoreminin temellerini oluşturan bu iki teorem; Langrange çarpanları ile birlikte μ elektronik kimyasal potansiyel olmak üzere $\delta[E(\rho) - \mu \int \rho(r)dr] = 0$ şeklinde özetlenebilir. $E(\rho)$ fonksiyoneli tahmin etmek için Kohn ve Lu Jeu Sham tarafından geliştirilen yöntem Kohn-Sham (KS) metodu olarak adlandırılır. KS metodu kabaca fiziksel sistem ile aynı yoğunluğa sahip olmak üzere birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan imgesel bir metottur. Tüm monoelektronik $\hat{h}_i^{KS}$ hamiltoniyenlerinin toplamı, toplam hamiltoniyeni (H_{KS}) verir. Bu hamiltoniyenler her spin-orbitali ψ_i^{KS} 'ye uygulanır ve taban durumu dalga fonksiyonu ψ_i^{KS} elde edilir. Bu durumda KS eşitliği elde edilmiş olur. Eşitlik 4.1'de KS eşitliği gösterilmektedir.

$$h_i^{KS}\psi_i^{KS} = \varepsilon_i^{KS}\psi_i^{KS} \quad (4.1)$$

n tane tek elektron orbitali ψ_i 'nin bir kombinasyonu olarak yoğunluk fonksiyonunu (ρ) tanımlayabiliriz.

DFT metodunun temel hedefi E_{KS} ifadesini minimize eden uygun enerjiyi bulmaktır. Enerji fonksiyoneli kinetik enerjiyi, elektron-elektron etkileşmesini ve dışsal potansiyel ile olan etkileşmeyi içerir. Burada kinetik enerji ve elektronlar arası etkileşim bilinmemektedir. Enerji minimizasyonunu bulabilmek için bunların iyi tahminlerinin elde edilmesi gerekmektedir. KS metodu ile kinetik enerji ve elektron yoğunluğu orbitaller aracılığıyla kesin olarak bilinebilir. Bu da bize enerji minimizasyonunu (taban durum enerjisi) verir.

Bu tezde Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Normalizasyon koşulunu sağlayan takas boşluğu negatif tanımlı bir fonksiyonel formudur. Böylece hem

yoğunluk hem de yoğunluğun gradyentine bağlı bir enerji fonksiyoneli fakat takas korelasyon boşluğunun analitik özelliklerini de korumaktadır. En popüler GGA fonksiyoneli bu çalışmada kullanılacak olan Perdev, Burke ve Ernzerhoff (PBE) [106]'dir.

4.1 GEOMETRİ OPTİMİZASYONU VE KAFES PARAMETRELERİNİN HESAPLANMASI

Kafes parametrelerinin, yani bağ uzunluklarının ve bağ açılarının belirlenmesi, bu yapısal özelliklerle doğrudan ilişkili olan malzemenin manyetik ve elektronik özelliklerinin anlaşılması için çok önemlidir. İlk adım DFT ile Geometri optimizasyonu [107] DFT ile yapılacak olan hesaplamaların ilk ve en önemli adımlarından birini oluşturur. Geometri optimizasyonundaki yakınsamanın derecesi diğer iş akışındaki DFT hesaplamaları için önem arz etmektedir. Orbitallerdeki elektron yoğunluğu ile kinetik enerji arasında ki ilişkiye DFT kullanarak bakabiliriz. Bunun için öncelikle Kohn-Sham metodunu kullanarak kinetik enerji ve elektron yoğunluğunu buluruz. Bu tezde popüler bir genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) olan fonksiyoneli olan Perdev-Burke-Ernzerhov (PBE) kullanılmıştır.

Orbital hibritleşme, doğrudan ya da dolaylı takas etkileşimleri, yük taşınımı ve spin yönelimleri gibi önemli fiziksel özellikler; atomlar arasındaki bağ uzunlukları ve açılarının değerlerinden etkilenmektedirler. Kristal alan teorisinde (CFT) d-orbitali; yüksek enerji bölgesi (e_g) ve düşük enerji bölgesi (t_{2g}) şeklinde iki parçaya ayrılabilir [108]. Geçiş elementlerinin bulunduğu yapılarda özellikle d-orbitalindeki dejenerasyon ortadan kaldırıldığında t_{2g} ve e_g arasındaki enerji farkı belirgin hale gelmektedir. Bu orbitallerdeki elektron yerleşimi bize eşlenmemiş spin ve toplam manyetik moment hakkında bilgi vermektedir.

DFT ile yapılan hesaplamalarda kesilim enerjisi, SCF tolerans, k-nokta sayısı, GGA-PBE fonksiyonları ve sözde potansiyel parametrelerinin tayini sonuçlar üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Perdev-Burke-Ernzerhov (PBE ve PBEsol) [106] fonksiyonundan Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) [109] içerisinde bulunan Koelling-Harmon relativistik düzeltmesi [110] seçilerek FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2) için ayrı ayrı yapılan hesaplamalar da kesme düzlem dalga temel seti 353.70 eV değerine ayarlanmıştır. SCF toleransı ise 10^{-6} eV/atom olarak ayarlanırken, maksimum kuvvet, maksimum gerilme ve maksimum yer değiştirme toleransları 0.03 eV/Å, 0.05 GPa ve 10^{-3} Å'dur. Enerji hesaplamaları aynı fonksiyonellerle ve geometri optimizasyonunda tercih edilen yaklaşımla

gerçekleştirilir. Enerji kesme 390 eV olarak ayarlanmıştır. Tüm hesaplamalar 9x9x12 k-noktalı ve spin polarizasyonlu OTFG Ultrasoft pseudopotansiyelleri ile gerçekleştirilmiştir. OTFG ultrasoft (on-the-fly ultrasoft) psödotansiyelleri [111], hesaplamaların daha düşük enerji kesintileriyle gerçekleştirilmesine izin verdiği için tercih edilmiştir. Ayrıca, hesaplamanın başından sonuna kadar aynı exchange-korelasyon fonksiyoneli kullandıkları için katı hal ve pseudo-atom hesaplamaları arasında tutarlı olmakla birlikte taban durum yapılarını tanımlamak için çok doğru sonuçlar verir.

4.1.1 Birim Hücre Yapısı Ve Nano Parçacıklar

Sistemin yapısal özellikleri manyetik özelliklerini dolaylı olsa da etkiler. Atonik motifolojinin bağ uzunlukları ve bağ açıları kullanılarak ortaya konulması malzemenin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde de büyük öneme sahiptir. Bu tez kapsamında atomik yapı ile kalkanlama etkililiğinin (SE) ilişkisi de bu sayede incelenebilmiştir.

Geometri optimizasyonu yapıldıktan sonra elde edilen kafes parametreleri olan bağ uzunlukları ve bağ açıları FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'ye ait birim hücre yapılarını oluşturmak için kullanılmıştır. Tek kristalli nano yapılar olan FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin birim hücreleri ve bu hücreleri kullanarak elde edilmiş olan örgü yapıları yardımıyla nano parçacıklar oluşturulmuş ve görselleştirilmiştir.

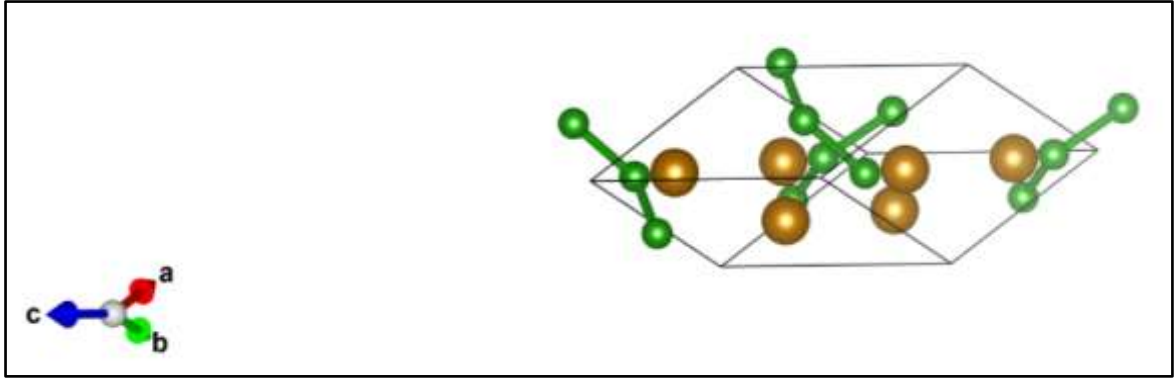
Görselleştirme için kullanışlı ve güvenilir bir araç olan GUI ara yüze sahip olan VESTA paket programı kullanılmıştır. Geometri optimizasyonu yapıldıktan sonra elde edildikten ve hesaplamalarda kullanılan ve uzay grupları belirtilen FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'ye ait birim hücre kafes parametreleri, birim hücre açıları, hacimleri ve yoğunlukları aşağıda Tablo 4.1'de gösterilmektedir.

Tablo 4.1: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) Kafes Parametreleri, Birim Hücre Açılı ve Birim Hücre Hacimleri.

Malzeme İsmi (Uzay grubu)	Kafes parametreleri (Å)	Birim hücre açılı (°)	Birim hücre hacmi (Å ³)
FeB(1) I4 ₁ /amd	a = 7.761 b = 7.761 c = 7.761	$\alpha = 158.227^\circ$ $\beta = 158.227^\circ$ $\gamma = 30.984^\circ$	V=64.280Å ³ d=6.888 gr/cm ³
FeB(2) cmcm	a = 4.022 b = 4.022 c = 2.958	$\alpha = 90.000^\circ$ $\beta = 90.000^\circ$ $\gamma = 137.865^\circ$	V=32.110Å ³ d=6.890gr/cm ³
Fe₂B(1) I4/mcm	a = 4.160° b = 4.160° c = 4.160°	$\alpha = 105.024^\circ$ $\beta = 105.024^\circ$ $\gamma = 118.786^\circ$	V=54.315Å ³ d=7.490 gr/cm ³
Fe₂B(2) P4/mmm	a = 3.494° b = 3.494° c = 2.507°	$\alpha = 90.000^\circ$ $\beta = 90.000^\circ$ $\gamma = 90.000^\circ$	V=30.605Å ³ d=6.650 gr/cm ³

Kristal yapının fiziksel özellikleri üzerinde örgü parametreleri olan bağ uzunlukları ve birim hücre açılı önemli rol oynar.

Şekil 4.1’de tetragonal kristal yapıdaki ve I4₁/amd uzay grubunda bulunan FeB(1)’in birim hücre yapısı; Şekil 4.2’de ise bu süper hücrelerin oluşturmuş olduğu örgünün a,b ve c projeksiyonları görülmektedir.

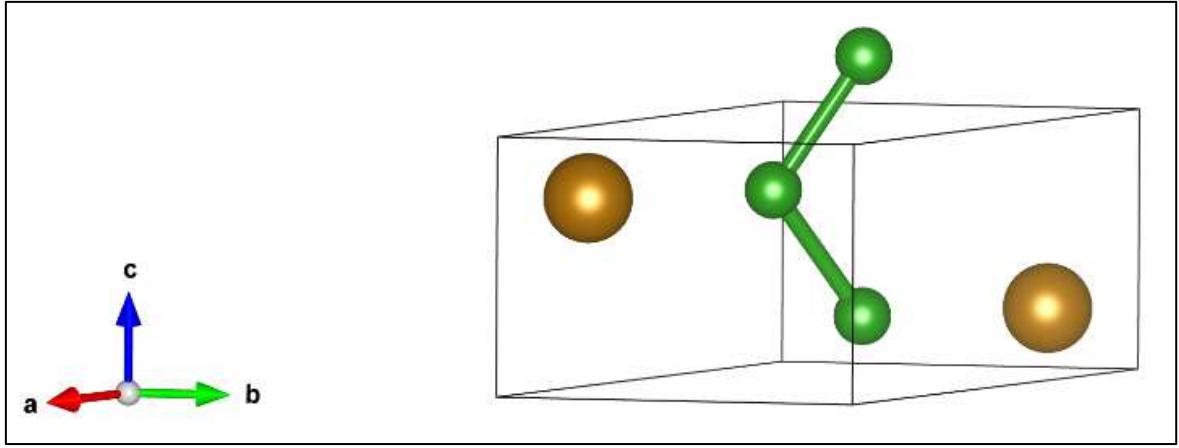


Şekil 4.1: FeB(1) Birim Hücresi (Sarı Renkli Atomlar Fe, Yeşil Renkli Atomlar İse B Atomunu Temsil Etmektedir.)

FeB(1) süper hücrelerinin a, b ve c projeksiyonlarının gösterimi		
a-projeksiyonu	b-projeksiyonu	c-projeksiyonu

Şekil 4.2: FeB(1) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.

Şekil 4.3’de ortorombik kristal yapıdaki ve cmcm uzay grubunda bulunan FeB(2)’nin birim hücre yapısı; Şekil 4.4’de ise bu süper hücrelerin oluşturmuş olduğu örgünün a,b ve c projeksiyonları görülmektedir.

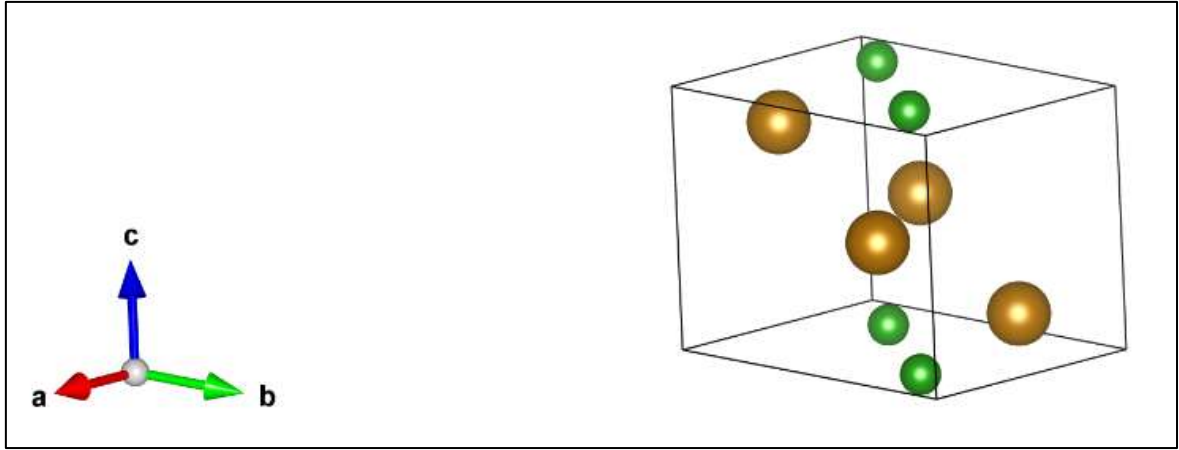


Şekil 4.3: FeB(2) Birim Hücresi.(Sarı Renkli Atomlar Fe, Yeşil Renkli Atomlar İse B Atomunu Temsil Etmektedir.)

FeB(2) süper hücrelerinin a, b ve c projeksiyonlarının gösterimi		
a-projeksiyonu	b-projeksiyonu	c-projeksiyonu

Şekil 4.4: FeB(2) Süper Hücrelerinin A, B ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.

Şekil 4.5’de tetragonal kristal yapıdaki ve $I4/mcm$ [140] uzay grubunda bulunan $Fe_2B(1)$ ’in birim hücre yapısı; Şekil 4.6’da ise bu süper hücrelerin oluşturmuş olduğu örgünün a,b ve c projeksiyonları görülmektedir.



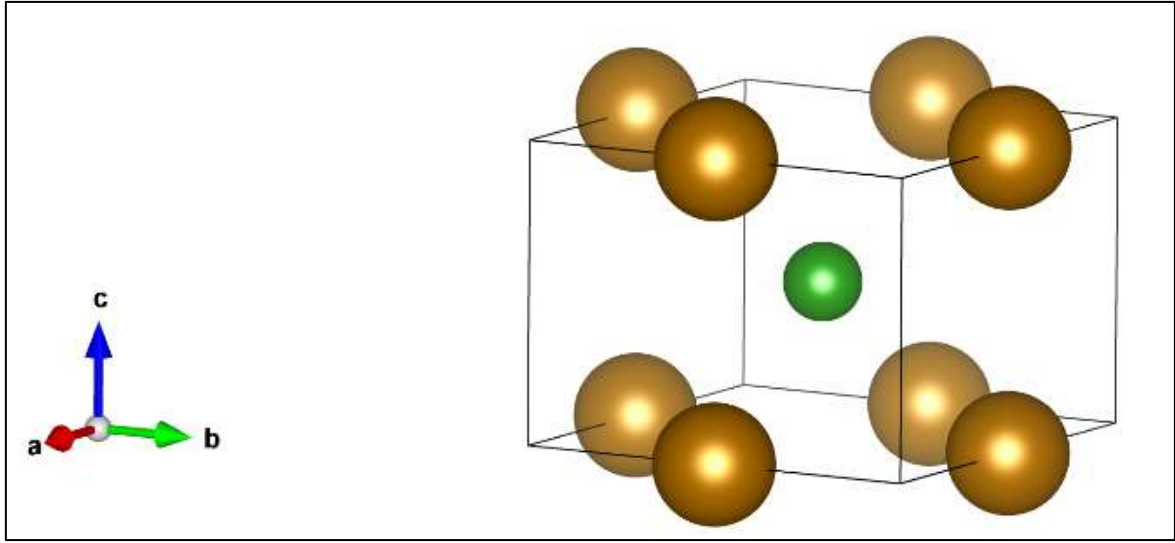
Şekil 4.5: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Birim Hücresi. (Sarı Renkli Atomlar FE, Yeşil Renkli Atomlar İse B Atomunu Temsil Etmektedir)

$\text{Fe}_2\text{B}(1)$ süper hücrelerinin a, b ve c projeksiyonlarının gösterimi		
a-projeksiyonu	b-projeksiyonu	c-projeksiyonu

Şekil 4.6: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Süper Hücrelerinin A, B ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.

Şekil4.7’de tetragonal kristal yapıdaki ve $P4/mmm$ uzay grubunda bulunan $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ ’in birim hücre yapısı; Şekil 4.8’de ise bu süper hücrelerin oluşturmuş olduğu örgünün a,b ve c projeksiyonları görül

mektedir.



Şekil 4.7: Fe₂B(2) Birim Hücresi. (Sarı Renkli Atomlar Fe, Yeşil Renkli Atomlar İse B Atomunu Temsil Etmektedir.)

Fe ₂ B(2) süper hücrelerinin a, b ve c projeksiyonlarının gösterimi		
a-projeksiyonu	b-projeksiyonu	c-projeksiyonu

Şekil 4.8: Fe₂B(2) Süper Hücrelerinin A, B Ve C Projeksiyonlarının Gösterimi.

4.2 ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLER VE TABAN DURUMU ÇÖZÜMÜ

Tek katmanlı demir (Fe) katkılı bor (B) ile elde edilmiş olan FeB ve Fe₂B formundaki film tabakaların kalkanlama etkililiğinin (SE) ölçülebilmesi ve iyi bir şekilde anlaşılabilmesi için elektronik, manyetik özelliklerinin de belirlenmesi gerekmektedir. Ab-initio yöntemler ile Fe katkılı borun yapısal, elektronik ve optik karakterizasyonu yapılarak gelen ω foton frekansına bağlı lineer dielektrik fonksiyonu $\epsilon(\omega)$ 'nin gerçek ve imajiner kısımları hesaplanmıştır. Serbest elektron teorisine göre dielektrik kayıp yani elektriksel geçirgenliğin imajiner kısmı $\epsilon'' = \sigma/2\pi\epsilon_0 f$, elektriksel iletkenlik ile vakumun elektriksel geçirgenliği ve

gelen dalga'nın açısai frekansı ile ters orantılı olacak şekilde ilişkilidir. Ab-initio yöntemlerin uygulanması sonucunda elde edilen manyetik moment değeri ve DFT ile elde edilen takas sabitleri (J_{ij}), manyetik duyunluk önemli parametrelerdir. Kalkanlama verimliliğinin (SE) hesaplanmasında öncelikle DFT yöntemlerle geometri optimizasyonu yapılmaktadır. Optimizasyon sonrası taban durumu enerji hesaplamaları gerçekleştirilerek elektriksel ve optik özellikler ortaya çıkarılmaktadır.

Geometri optimizasyonu ile kafes parametreleri (bağ uzunlukları ve bağ açıları) hesaplandıktan sonra; ikinci adım olarak, elektriksel ve optik özelliklerin ortaya çıkarılması için taban durum hesaplamaları yapılır. Nano parçacıkların geometrik optimizasyonları için seçilen pseudo potansiyeller ve metod aynı zamanda, taban durumu hesabı ile yapısal, elektronik ve optik özelliklerin belirlenmesinde de kullanılır.

Sistemin elektronik ve manyetik özellikleri hakkında bilgi sahibi olunmasını sağlayan durum yoğunluğu (DOS) ve bant yapıları tek kristal MBene/MXene FeB ailesinin üyesi olan 2 farklı uzay grubuna ait FeB (FeB(1) ve FeB(2) için) ve 2 ayrı uzay grubundaki Fe₂B (Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)) için hesaplanmıştır. Bant yapıları spin polarize durumlar için (major ve minor kanallar) elde edilip; band aralığının, valans bantı maksimumu (VBM) ve iletim bantı minimumu (CBM) bulunarak elde edilmiştir. Böylece yapının metal, yarı iletken veya yalıtkan hali ortaya çıkartılabilmektedir. Ayrıca topolojik elektronik karakterinin belirlenmesi için de dalga uzayına iletim ve valans bölgesinde karşılık gelen enerji bantlarından faydalanılmıştır. Bununla birlikte DOS ölçümlerinden manyetik özellikleri hakkında da bilgi sahibi olunmuştur. Bu tez kapsamında incelenen yapıları oluşturan atomlar ve yörüngelerinin elektronik ve manyetik yapılarına yaptığı katkılar da incelenmiştir. CASTEP yazılımındaki algoritmalar [112] iteratif matris köşegenleştirme kullanmaktadır. Davidson-block iterasyonu [113] çerçevesinde örnek bir yoğunluk ve dalga fonksiyonu kullanılarak taban durumu için hesaplamalar yapılmıştır. Ayrıca atomik orbitallerdeki son yük ve spin dağılımları da elde edilmiştir. Atomik ve orbital spin ve sistem atomları arasındaki J_{ij} takas sabitleri, manyetik özelliklerin Monte Carlo metodu ile hesaplanmasında kullanılmıştır.

Fermi seviyesinin sıfıra ayarlandığı elektronik bant yapısı sayesinde majör ve minör spin kanallarının bant yapısı incelenebilmiştir. İletim ve valans bantı arasındaki enerji farkına

bakılarak FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin metalik durumu ve iletim kabiliyetleri hakkında bilgi sahibi olunmuştur. Malzemenin topolojik elektronik karakteri, dalga uzayında iletim ve valans bölgeleri enerji bantları kullanılarak belirlenebilmiş, ayrıca malzemenin manyetik özellikleri hakkındaki durum yoğunluğu (DOS) ölçümlerinden bilgi sahibi olunmuştur. Bant yapıları ve durum yoğunluğu (DOS), paralel (çoğunluk spin kanalları) ve anti-paralel spinler (azınlık spin kanalları) için spin-polarize Fe iyonları durumunda ortaya çıkar. Bant aralığı, valans bandı maksimum (VBM) ve iletim bandı minimum (CBM) aracılığıyla kolayca ortaya çıkar. Değişim kuplajı değeri (J), malzemenin uyduğu tercih edilen manyetik durumu belirlemenin kolay bir yoludur. Kısmi durum yoğunluğu (PDOS) grafikleri ve TDOS grafikleri kullanılarak malzemenin elektronik yapısı hakkında niteliksel bilgiler elde edilmiştir. Özellikle demirin (Fe) d orbitali ile borun (B) p orbitalinin birbirleriyle hibritleşmesinin Fermi seviyesinin yakın çevresinde oluşturulmuş olduğu ortalama net mıknatıslanma incelenerek malzemelerin manyetik davranışları hakkında da bilgi sahibi olunmuştur.

4.3 DİELEKTRİK FONKSİYONU VE OPTİK ÖZELLİKLER

Fe katkılı borun optik özellikleri projektörle-güçlendirilmiş dalga (PAW) yöntemi [114] ile belirlenecektir. CASTEP'deki PAW fonksiyonu genellikle pseudopotansiyeli marifetiyle çekirdek bölgesindeki durumun yeniden yapılandırılabilmesi için ve ultra yumuşak sözde potansiyel formalizmini düzenlemek için kullanılır. Ancak dikkat edilmesi gereken husus PAW'ın direk olarak pseudopotansiyelini değil ona çok benzer özellik gösteren ultra yumuşak sözde pseudo potansiyellerini kullanıyor olduğudur.

Dielektrik fonksiyonunun reel (ϵ_1) ve sanal (ϵ_2) kısımlarının kullanılması ile malzemenin optik özelliklerini hesaplayabiliriz. Bunun için elektronik kısmın frekansa bağlı dielektrik fonksiyonu hesaplanmıştır. Böylece soğurma, yansıma ve geçiş katsayıları dielektrik tensörü yardımıyla bulunabilmiştir. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) ve katılar için revize edilmiş Perdew-Burke-Ernzerhov (PBEsol) fonksiyoneli kullanılarak Fe iyonlarının ferromanyetik (FM) ve antiferromanyetik (AFM) oldukları durumların ayrı incelenmesi yapılmıştır. Her bir manyetik durum için gelen fotonun frekansı olmak üzere, dielektrik fonksiyonunun imajiner ve gerçek kısımlar hesaplanmış ve elektronik taban durumu belirlendikten sonra frekansa bağlı karmaşık dielektrik matrisi $\epsilon(\omega)$, hesaplanabilmiştir.

Bu matrisin gerçek $\varepsilon_1(\omega)$ ve sanal kısmı $\varepsilon_2(\omega)$ sırasıyla

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\varepsilon''(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad 4.2$$

ve

$$\varepsilon''(\omega') = \left(\frac{h^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \right) \sum_{C,V} \int d^3 k \langle V_k | p^a | C_k \rangle \langle V_k | p^b | C_k \rangle \delta(\varepsilon_{C_k} - \varepsilon_{V_k} - \omega) \quad 4.3$$

eşitlikleri ile açıkça ifade edilmektedir.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) \quad 4.4$$

Dielektrik fonksiyonun frekansa bağlı değişiminin hesaplanması ile dielektrik tensörü elde edilmiştir. Elde edilen dielektrik fonksiyonun gerçek kısmı $\varepsilon'(\omega)$, ve imajiner kısmı $\varepsilon''(\omega)$, kırılma indisi ($n(\omega)$) için Eşitlik 3.72’de, sönümlleme katsayısı ($k(\omega)$) için Eşitlik 3.73’de, soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) için Eşitlik 3.74’de, yansıma ($R(\omega)$) için Eşitlik 3.75’de ve enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) için Eşitlik 3.76’da yerine konularak malzemelerin optik özellikleri hesaplanmıştır.

4.4 MANYETİK ÖZELLİKLER

Perdev-Burke-Ernzerhov (PBEsol) fonksiyoneli ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılarak FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)’nin ferromanyetik (FM) ve antiferromanyetik olduğu durumlar incelenmiştir. Manyetik geçirgenliğin yanı sıra, manyetik duygunluk, Curie sıcaklığı (T_C), faz değişimi, sıcaklığa bağlı mıknatıslanma, öz ısı ve histeri eğrisi de belirlenecek parçacıkların ebatları 2.507-7.761 Å arasındadır. Spin polarize FM ve AFM durumlar için yapılan hesaplamalarda her iki durumun enerji farkından faydalanılarak sistemin J_{ij} takas değeri belirlenebilir ($2 * J = E_{AFM} - E_{FM}$). Heisenberg modelinin sistemi temsil eden Hamiltoniyeni Eşitlik 4.5’de verilmektedir. Bu modelde manyetik özellikleri incelenen nano parçacıklar için takas etkileşmesi ve Zeeman enerjisi hamiltoniyende bulunmaktadır. Boltzmann istatistiği ile kanonik topluluğa uyacak şekilde

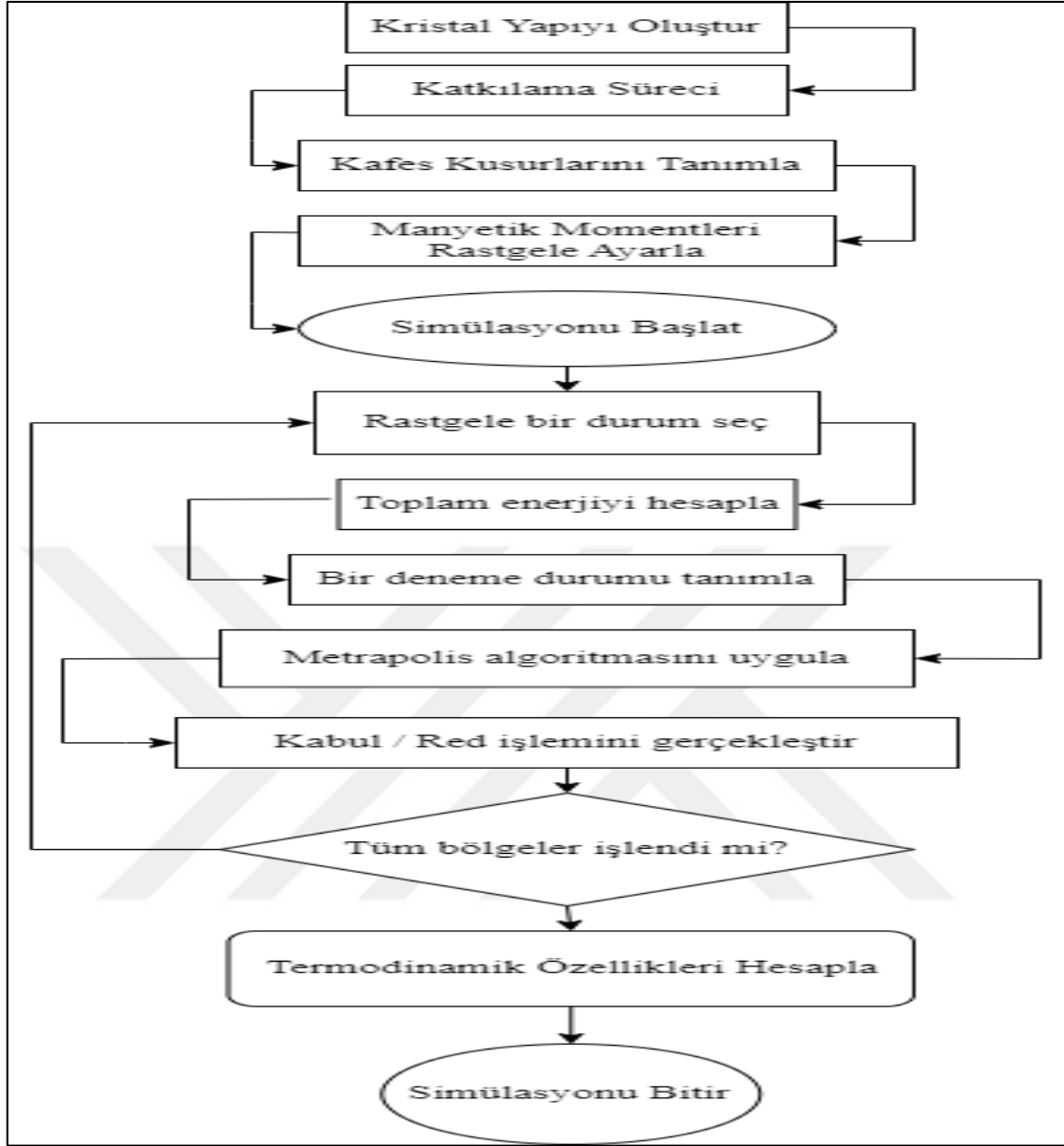
termal dengeye ulaşan nano parçacıklar için ortalama termodinamik büyüklükler hesaplanmıştır.

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij}(r_{ij}) S_i S_j - g \mu_B \sum_i B S_i \quad (4.5)$$

Burada takas sabiti (J_{ij}), g-faktörü (g), Bohr magnetonunu (μ_B) ve harici manyetik alanı (B) ile temsil edilmektedir. Akış diyagramında manyetik ölçümlerim Markov Zinciri Monte Carlo (MZMC) metodu [115] kapsamında nasıl alındığı özetlenmektedir. Öncelikle nano parçacık seçimi yapılır ve atomik koordinatlar ve atom tipleri girdi parametresi olarak hafızaya alınır. Sonrasında rastgele seçilen koordinatlar ile Heisenberg Hamiltoniyeni kullanılarak enerji hesaplanır ve Metropolis kriteri [116] uygulanır.

Sistem dengeye ulaştığında yani denge için gereken MC adım sayısına ulaştığında beklenen değerleri hesaplamak için aynı adımlar tekrarlanır. Sistemin dengeye gelmesi için gerekli MC adım sayısı toplam MC adım sayısının ne kadarını oluşturacağına denge dalgalanmalarının genlikleri incelenerek karar verilmiştir. Sıcaklığa bağlı mıknatıslanma ve manyetik duygunluk ile T_c belirlendikten sonra histeri davranışı bu sıcaklık değeri yakınlarında araştırılır. Böylece nano parçacıkların manyetik davranışı hem nano parçacık çapına hem de nano parçacık modeline göre incelenmiş olur.

Monte Carlo simülasyonu sonucu elde edilen manyetik duygunluk vasıtasıyla manyetik geçirgenlik hesaplanarak SE değerlerinin belirlenmesinde kullanılır. Boltzmann istatistiği uygulanarak sıcaklık (T) termal enerji cinsinden sistemin H 'ye bağlı manyetik enerjisi ile doğrudan orantılanarak normal dağılıma uyan parçacıklar simüle edilir. Girdi parametrelerinin belirlenmesi yapılması planlanan ölçüme göre şekillendirilecektir. Histeri ölçümlerinde sıcaklık sabit tutulup harici manyetik alan döngüleri oluşturulacaktır. Sıcaklığa bağlı ölçümlerde ise harici manyetik alan sabit tutularak yapılacaktır. Manyetik geçirgenlik $\mu_r = \mu_0(1 + \chi_m)$ manyetik duygunluğa bağlıdır. Simülasyon sürecinin akış şeması aşağıda Şekil 4.9'da verilmiştir.



Şekil 4.9: MZMC Simülasyonu Akış Şeması.

4.5 KALKANLAMA ETKİLİLİĞİNİN (SE) HESAPLANMASI

Elektrik ve manyetik alan bileşenleri olan bir EM dalgası, herhangi bir ortam ile etkileşmeye girdiğinde gerçekleşen olaylar: yansıma, geçiş ve soğurulmadır. Ayrıca deri kalınlığına bağlı olarak hesaba katılması gereken ortamdan çıkarken dalganın tekrar yansıma ve geçiş olaylarına maruz kalabileceğidir. Bunlar, ikincil yansıma ve ikincil geçiş olarak adlandırılır ve iç yansılardan kaynaklanmaktadır. Ancak toplam kalkanlama etkililiğinin 15 dB'in üstünde olduğu durumlarda çok küçük değerde olduğu için genellikle ihmal edilir. Malzemenin soğurulmasından kaynaklı zırhlama etkinliği SE_A Eşitlik 4.6'da yansımadan

kaynaklanan zırhlama etkinliği SE_R Eşitlik 4.7’de ve malzeme içindeki yansımalarından kaynaklanan SE_M Eşitlik 4.8’de açıkça ifade edilebilmektedir. Elektronik ve manyetik hesaplamaların çıktılarından elde edilen iletkenlik (σ) ve manyetik geçirgenlik değerleri (μ_r); SE ’nin hesaplanmasında kullanılacaktır. $SE_T=SE_A+SE_R+SE_M$ yardımıyla toplam zırhlama geniş bir enerji bölgesinde elde edilecektir. Zırhlama etkinliğinin yapısal modele, parçacık çapına, ortam sıcaklığına, harici manyetik alana bağlılığının araştırılması planlanmaktadır. Elde edilen sonuçlar doğrultusunda tezde çalışılan malzemelerin zırhlama yetenekleri incelenmiş olup deneysel araştırmalar için önemli bilgiler elde edileceği düşünülmektedir.

$$SE_A = 8.86d \sqrt{\frac{\sigma \omega \mu_r}{2}} \quad 4.6$$

$$SE_R = -10 \log \frac{\sigma}{16 \omega \epsilon_0 \mu_r} \quad 4.7$$

$$SE_M = -20 \log \left(1 - e^{-2d \sqrt{\frac{\omega \sigma \mu}{2}}} \right) \quad 4.8$$

4.6 CASTEP PROGRAMININ TANITIMI

Cambridge Üniversitesi teorik yoğun madde grubu tarafından geliştirilmiş olan CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) materyal biliminde kullanılan önemli yazılımlardan biridir. Kuantum mekaniksel temel ilkelerden hareketle hesap yapan CASTEP paket programı hesaplamalarında yoğunluk fonksiyon teorisini (DFT) kullanır. Kuantum mekaniği denklemlerini kullanılarak yapılan toplam enerji (pseudo potansiyel) hesaplamaları sayesinde ilgili sistemin elektronik durumlarını elde edilir.

CASTEP paket programının moleküller, katıhal ve yüzey problemleri ile ilgili hesaplamalarda geniş bir kullanım alanı bulunmaktadır. Bu alanda yapılan çalışmalar; metaller, yarı-iletkenler, yüzey ve bulk özellikleri, genel yüzey özellikleri, elektronik yapı (bant yapıları ve durum yoğunluğu), malzemelerin optik özelliklerinin belirlenmesi, malzemelerin nokta kusurlarının özellikleri (boşluklar, interstitials and substitutional impurities), sıcaklığa bağlı çalışmalar, moleküller ve moleküler kristaller, sistemin dalga fonksiyonunun ve yük yoğunluğunun 3 boyutlu gösterimi, basınç altında faz dönüşümleri ve zeolit kimyası şeklinde sıralanabilir.

İlgili atomların numarası ve başlangıç geometrisi programa giriş verileridir. Bu metotta sadece valans elektronlarında etkin olan psödo potansiyelleri kullanılmaktadır. Düzlem dalga temel setleri cinsinden yazılmış olan elektronik dalga fonksiyonu ve elektron-elektron etkileşimleri, yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak pseudo potansiyellerinin ve düzlem dalganın birlikte kullanımı, sistemdeki atomlar üzerinde etkin olan atomların hesabında oldukça kolaylık sağlamıştır.

Elektronik yapısındaki karışıklık nedeniyle toplam enerji hesaplamalarını metallere uygulamak, yarı iletken ve yalıtkanlara uygulamaktan daha zordur. Ancak Castep' te kullanılan metotlar ile metaller üzerindeki hesaplamalar kolaylaştırılmıştır. CASTEP, süper hücre metoduna dayandığı için periyodik bir sistemde bütün hesaplar bu metot kapsamında gerçekleştirilebilir. Hesaplamalar da sistem bir periyodik sistem olarak ele alındığı için süper hücre biçiminde herhangi bir sınırlama yoktur.

Bu çalışmadaki ab-initio yöntemler kullanılarak yapılmış olan bütün hesaplamalar için CASTEP paket program kullanılmıştır. Bir molekülün veya malzemenin fiziksel büyüklükleri hesaplanmak için CASTEP' te yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılır. Buna göre toplam enerji Eşitlik 4.9'daki formül ile hesaplanır;

$$E_1[\rho] = \sum_i \langle \phi_1 + \left| \frac{-\nabla^2}{2} \right| \phi_1 \rangle + \langle \rho(r_1) \left[E_{xc}[\rho(r_1)] + \frac{V_e(r_1)}{2} - V_N \right] \rangle + V_{NN} \quad (4.9)$$

Eşitlik 4.10 kullanılarak enerjinin koordinata göre birinci türevi alınarak, sisteme etki eden kuvvet hesaplanır.

$$F = -\frac{dE}{dR} \quad (4.10)$$

Sistemin dengede olduğunu tüm kuvvetlerin sıfır olmasından anlarız. Enerjinin birinci türevini kullanarak sistem geometrisini elde ederiz ki bu Geometrik Optimizasyon'dur. Sistemin elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikleri (band yapıları, durum yoğunluğu, optik özellikleri, fonon dispersiyonu, fonon durum yoğunluğu, gerilim tensörü) optimize edilmiş geometri üzerinden hesaplanabilir [117].

5. BULGULAR

5.1 ELEKTRONİK ÖZELLİKLER, TABAN DURUMU VE MANYETİK ÖZELLİKLER

Bu tez çalışmasında DFT yöntemleri kullanılarak demir katkılı borun (FexB) yapısal uygunluk optimizasyon hesapları gerçekleştirilmiş daha sonra tez kapsamında ele alınan FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'in kristalografik yapıları kullanılarak her biri için geometrik optimizasyonlar yapılmıştır. Sonrasında taban durumu enerjileri hesaplanarak bant aralığı, durum yoğunlukları (DOS) ve optik özelliklerinin ortaya çıkarılması için dielektrik fonksiyonları elde edilmiştir. Optik özellikler yardımıyla bu malzemelerin elektromanyetik dalga spektrumunun neden olduğu foton enerjisinin [001], [010], [100] polarizasyon durumları için kalkanlama etkililiği incelenmiştir.

Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA), Perdev-Burke-Ernzerhov (PBE) fonksiyoneli ve Koelling-Harmon rölativistik düzeltmesi yardımıyla FexB kristali için 390 eV, Fe(bcc) için ise 353.70 eV cut-off düzlem dalga baz kümesi kullanılmıştır. OTFG ultrasoft (on-the-fly ultrasoft) psödopotansiyelleri, hesaplamaların daha düşük enerji kesintileriyle gerçekleştirilmesine izin verdiği için tercih edilmiştir. Ayrıca, aynı exchange-korelasyon fonksiyoneli hesaplamaların başından sonuna kadar kullandıkları için katı hal ve pseudo-atom hesaplamaları arasında tutarlı olmakla birlikte taban durum yapılarını tanımlamak için çok doğru sonuçlar vermektedir. SCF toleransı atom başına 10^{-6} eV; maksimum kuvvet, maksimum stres ve maksimum yer değiştirme toleransları sırasıyla 0.03eV/Å, 0.05GPa ve 10^{-3} Å olacak şekilde hesaplamalar yapılmıştır. Bu değerler Fe (bcc) için de kullanılmıştır.

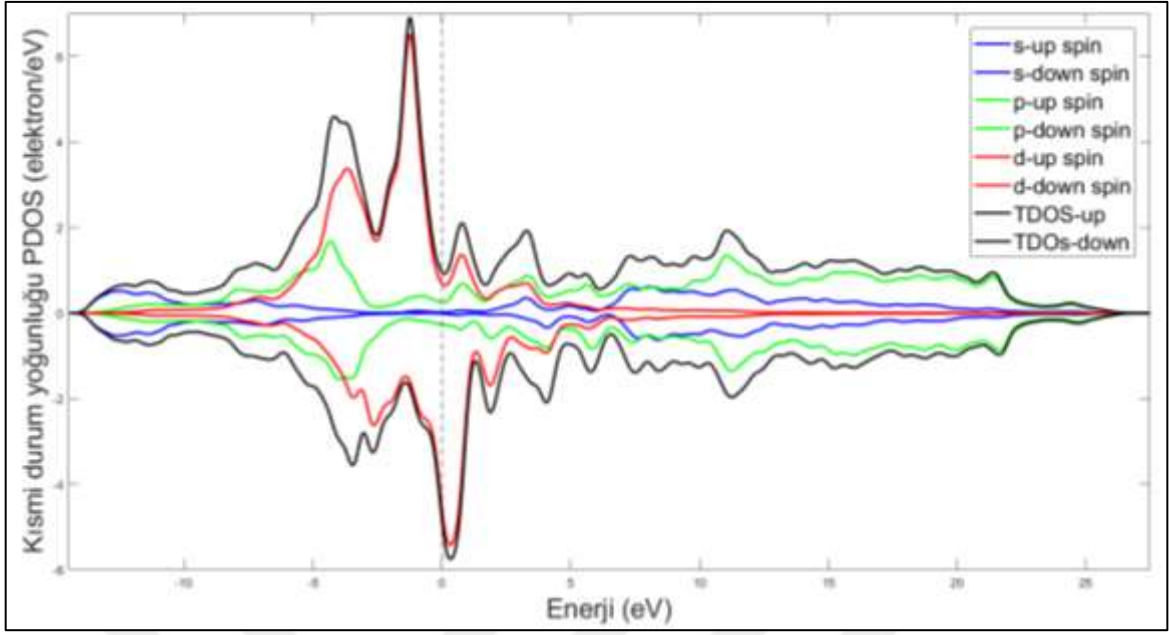
Fermi seviyesi elektronlar tarafından doldurmuş olan en yüksek enerji seviyesidir. Katıların birçok özelliği Fermi seviyesine yakın olan bantlardaki elektronların davranışları ile belirlenir. Katının elektriksel iletkenliği enerji bandındaki doluluğa bağlıdır. Fermi enerji yüzeyleri toplam durum yoğunluğu (TDOS) grafikleri incelenerek gözlemlenir. Aynı zamanda TDOS grafikleri valans elektronlarının dağılımlarını ve iletme olan katkılarını da anlatmaktadır. Bu sayede incelemiş olduğumuz malzemelerin metalik ya da ametalik özellikleri hakkında bilgi sahibi olabiliriz. Elektron yoğunluğunun fazla olduğu bölgelerde grafik pikler yapma eğilimindedir. Pik noktalarının arasında kalan yüzeyde ise atomlar arasındaki elektron yoğunluğu yani iletim elektronları yer alır. Bu özellikler dikkate alınarak

TDOS grafikleri incelendiğinde valans elektronlarının dağılımlarını ve iletme olan katkılarını kolayca anlayabiliriz. Sistemin elektronik ve manyetik özellikleri hakkında bilgi sahibi olunmasını sağlayan kısmı durum yoğunluğu (PDOS), major ve minor spin kanallarının Fermi seviyesinin sıfıra ayarlanmış olduğu bant yapısı ve malzemelerin manyetik özellikleri hakkında bilgi sahibi olunan Monte Carlo simülasyonları yardımıyla bulunan Curie sıcaklıkları (T_c) ve manyetik duyarlılık grafikleri FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) için aşağıda gösterilmiştir.

5.1.1 FeB(1)'in Yapısal ve Manyetik Özellikleri

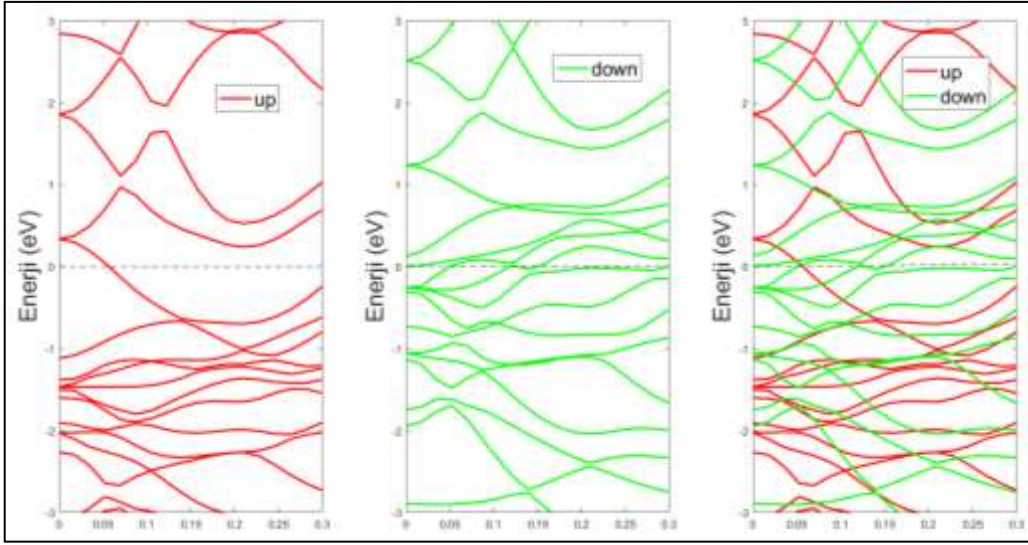
5.1.1.1 FeB(1) için kısmı durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı

Şekil 5.1'de FeB(1) için s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kısmı durum yoğunluğu (PDOS) ve bunların toplamından elde edilmiş olan toplam durum yoğunluğu (TDOS) görülmektedir. PDOS grafiğinde sıfırın üstünde kalan alanlar yukarı yönlü (α) spin dönüşlerinden, sıfırın altında kalan alanlar ise aşağı yönlü (β) spin dönüşlerini temsil etmektedir. Dalga uzayında iletim ve valans bölgeleri enerji bantları kullanılarak FeB(1) için topolojik elektronik karakter belirlenmiş ve toplam durum yoğunluğu (TDOS) ölçümleri sayesinde FeB(1)'in manyetik özellikleri hakkında da bilgi sahibi olunmuştur. Ayrıca kısmı durum yoğunluğu (PDOS) grafikleri kullanılarak FeB(1)'in elektronik yapısı hakkında niteliksel bilgilere de ulaşılmıştır. Fermi seviyesinin yakın çevresinde ortalama net mıknatıslanmanın varlığı, Şekil 5.1'deki azınlık spin kanalındaki durum yoğunluğunun major bölgeden daha düşük seviyede olmasıyla açıklanabilmektedir. Bu durum FeB(1)'in ferromanyetik (FM) davranışına borun p orbitalinin (B-p) ve demirin d orbitalinin (Fe-d) önemli katkı sunduğu görülmüştür. Oluşan p-d hibritleşmesi ferromanyetik (FM) davranışın önemli nedenlerinden biridir. Bu bilgiler ışığında FeB(1)'in ferrimanyetik (FiM) davranış sergilediği sonucuna ulaşılmıştır.



Şekil 5.1: FeB(1) İçin Kısmi (Pdos) ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).

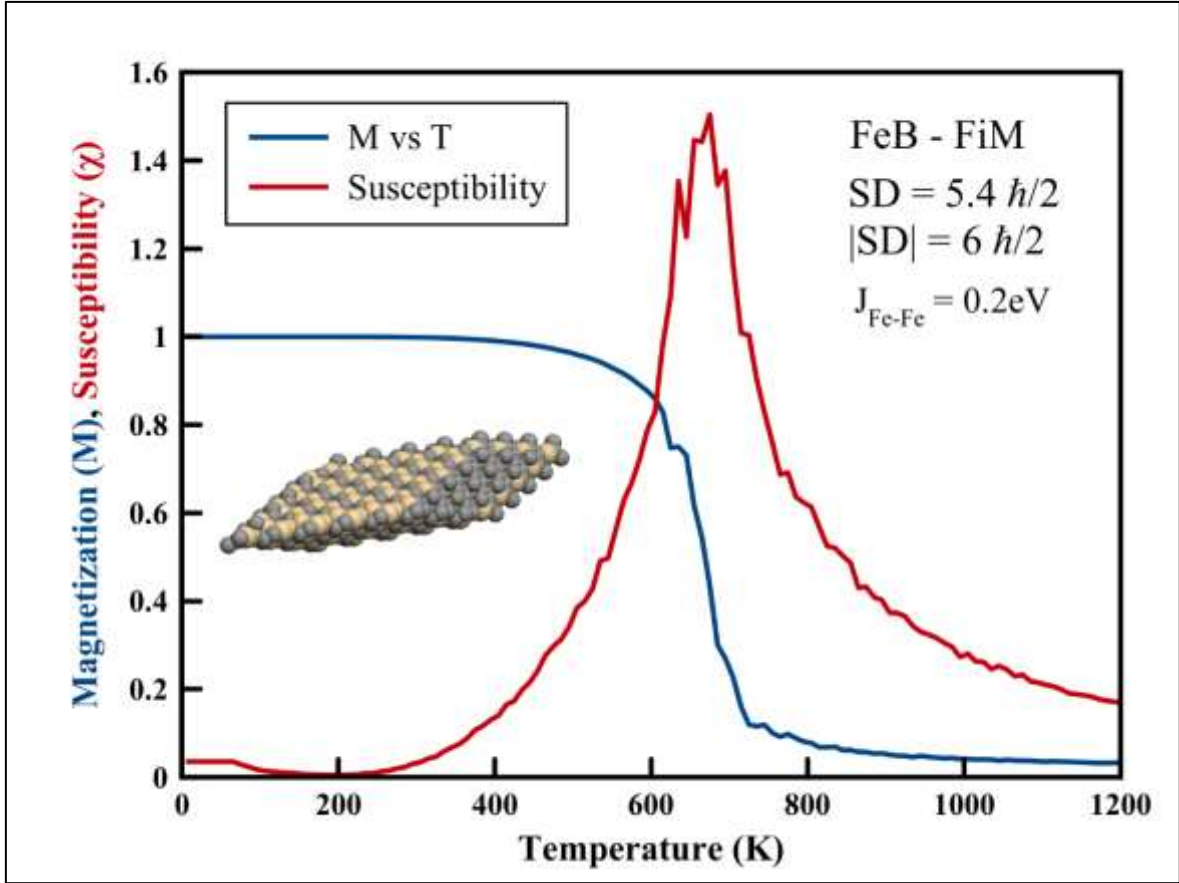
FeB(1) için major ve minor spin kanallarının bant yapısı Şekil 5.2’de gösterilmektedir. Elektronik band yapısı çizilirken Fermi enerji seviyesi sıfır olarak ($E_F = 0$) ayarlanmıştır. Sıfır seviyesinin altındakiler valans bandı, üstündekiler ise iletim bandıdır. FeB(1)’e ait bant yapısında bulunan majör ve minör spin kanalları yukarı ve aşağı yönlü spin durumları için incelendiğinde iletim ve valans bandı arasındaki enerji farkının minimum olduğu ve yer yer üst üste binmiş olduğu görülmektedir. Buda bize malzemenin metalik durumu ve iletim kabiliyeti hakkında fikir vermektedir. Bant yapısı FeB(1)’in metalik özellik gösterdiğini ve yarı-metalik davranıştan kaçındığı göstermektedir. Bu kalkanlama malzemelerinde bulunması gereken elektriksel iletkenlik koşulunu malzemenin yerine getirebileceğini göstermesi açısından ayrıca önemlidir.



Şekil 5.2: FeB(1) İçin Elektronik Bant Yapısı.

5.1.1.2 FeB(1) İçin Manyetik Duyarlılık Ve Curie Sıcaklığı

Şekil 5.1’de atomik orbitallerdeki elektron integrallerinin üst üste gelmesi ve hibritleşmeleri sayesinde FeB(1)’in yapısal özellikleri hakkında bilgi sahibi olunulmuştur. Tablo 4.1’de belirtilen morfolojik özellikler de yapının manyetik karakteristiğini etkileyen unsurlardır. Ayrıca Şekil 5.3’de gösterildiği üzere; FeB(1) için demirin (Fe) sıcaklıkla değişen bcc modelindeki birim hücre yapısı ele alınarak yapılan taban durumu enerji hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi ($J_{\text{Fe-Fe}}$) 0.2 eV olarak bulunmuştur. FeB(1)’in birim hacim başına düşen manyetik dipol momentini yani manyetizasyonu (M) 0K sıcaklığında 1A/m değerinden başlayarak, den başlayarak Curie sıcaklığında ($T_c=675\text{K}$) içine alan 600K-800K aralığında dramatik şekilde düşüş göstermiştir. FeB(1)’in manyetik duyarlılığına (χ) bakacak olursak, 0K değerinden başlayarak 675K olan Curie sıcaklığına kadar arttığını daha sonrada aynı hızda düştüğünü görürüz. Bu bilgiler ışığında FeB(1)’in manyetik davranış olarak ferrimanyetik (FiM) karakter sergilediği görülmüştür.



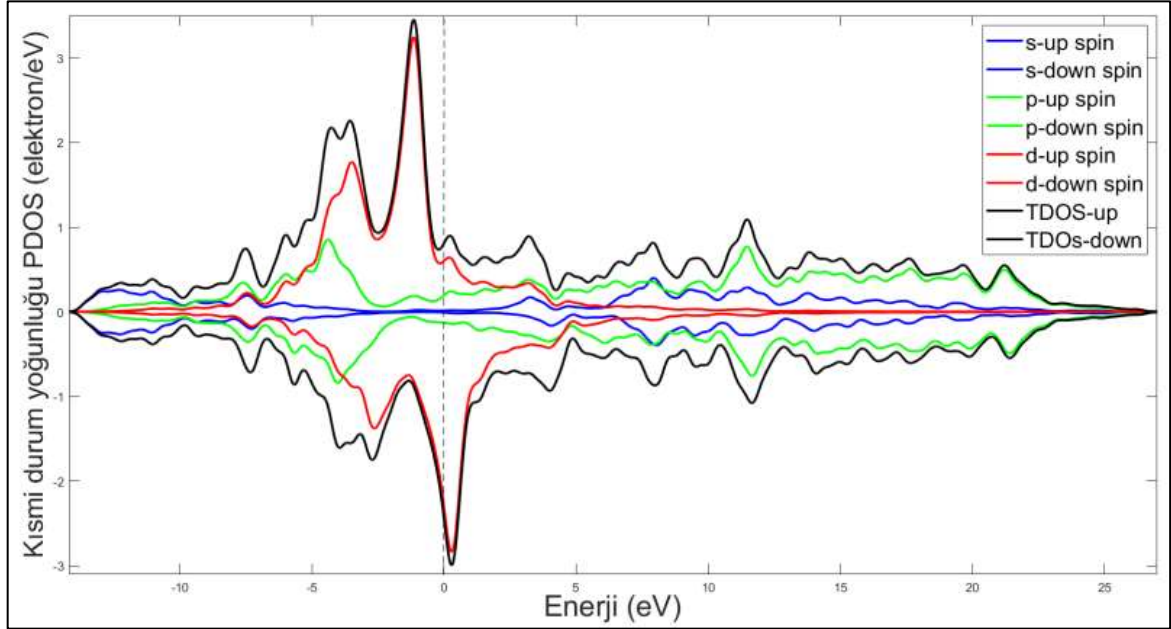
Şekil 5.3: FeB(1)'in Manyetik Duyarlılığı ve Curie Sıcaklığı.

5.1.2 FeB(2)'nin Yapısal ve Manyetik Özellikleri

5.1.2.1 FeB(2) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı

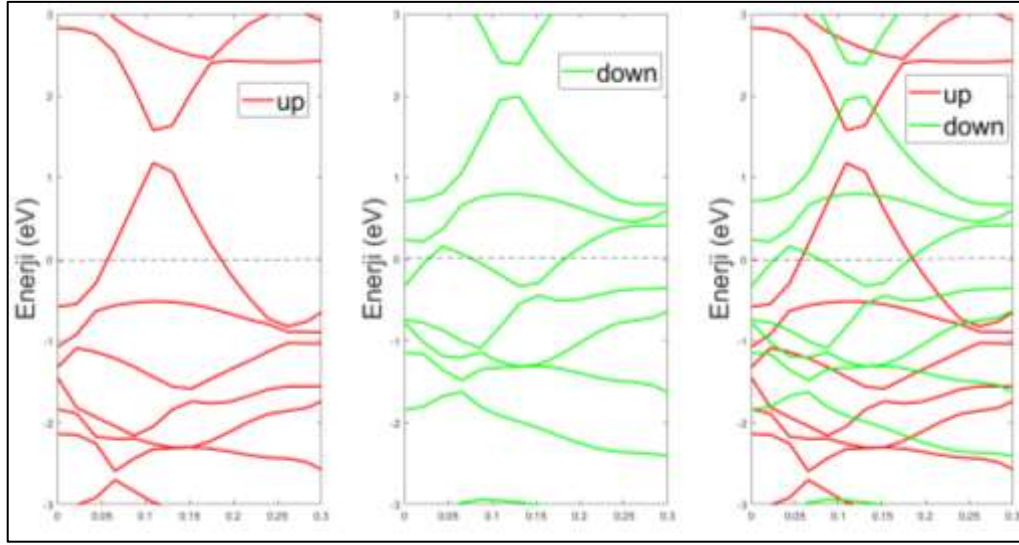
Şekil 5.4'de FeB(2) için s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bunların toplamından elde edilmiş olan toplam durum yoğunluğu (TDOS) görülmektedir. PDOS grafiğinde sıfırın üstünde kalan alanlar yukarı yönlü (α) spin dönüşlerinden, sıfırın altında kalan alanlar ise aşağı yönlü (β) spin dönüşlerini temsil etmektedir. Dalga uzayında iletim ve valans bölgeleri enerji bantları kullanılarak FeB(2) için topolojik elektronik karakter belirlenmiş ve toplam durum yoğunluğu (TDOS) ölçümleri sayesinde FeB(2)'nin manyetik özellikleri hakkında da bilgi sahibi olunmuştur. Ayrıca kısmi durum yoğunluğu (PDOS) grafikleri kullanılarak FeB(2)'nin elektronik yapısı hakkında niteliksel bilgilere de ulaşılmıştır. Fermi seviyesinin yakın çevresinde ortalama net mıknatıslanmanın varlığı, Şekil 5.4'deki azınlık spin kanalındaki durum yoğunluğunun major bölgeden daha düşük seviyede olmasıyla açıklanabilmektedir. Bu durum FeB(2)'nin ferromanyetik (FM) davranışına borun p orbitalinin (B-p) ve demirin d orbitalinin (Fe-d) önemli katkı sunduğu

görülmüştür. Oluşan p-d hibritleşmesi ferromanyetik (FM) davranışın önemli nedenlerinden biridir. Bu bilgiler ışığında FeB(2)'nin ferromanyetik davranış sergilediği sonucuna ulaşılmıştır.



Şekil 5.4: FeB(2) İçin Kısmi (Pdos) ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).

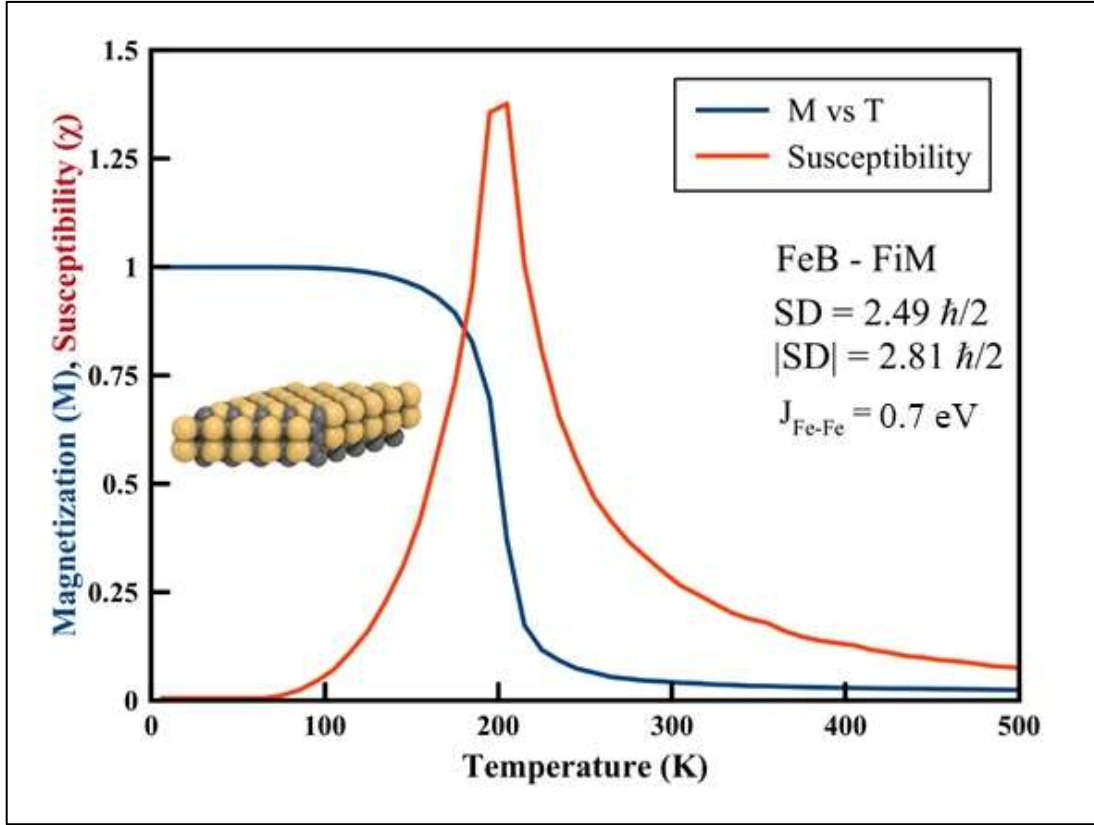
FeB(2) için major ve minor spin kanallarının bant yapısı Şekil 5.5’de gösterilmektedir. Elektronik band yapısı çizilirken Fermi enerjisi sıfır olarak ($E_F = 0$) ayarlanmıştır. Sıfır seviyesinin altındakiler valans bandı, üstündekiler ise iletim bandıdır. FeB(2)’ye ait bant yapısında bulunan majör ve minör spin kanalları yukarı ve aşağı yönlü spin durumları için incelendiğinde iletim ve valans bandı arasındaki enerji farkının minimum olduğu ve yer yer üst üste binmiş olduğu görülmektedir. Buda bize malzemenin metalik durumu ve iletim kabiliyeti hakkında fikir vermektedir. Bant yapısı FeB(2)’nin metalik özellik gösterdiğini ve yarı-metalik davranıştan kaçındığı göstermektedir. Bu kalkanlama malzemelerinde bulunması gereken elektriksel iletkenlik koşulunu malzemenin yerine getirebileceğini göstermesi açısından ayrıca önemlidir.



Şekil 5.5: FeB(2) İçin Elektronik Bant Yapısı.

5.1.2.2 FeB(2) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı

Şekil 5.4’de atomik orbitallerdeki elektron integrallerinin üst üste gelmesi ve hibritleşmeleri sayesinde FeB(2)’nin yapısal özellikleri hakkında bilgi sahibi olunulmuştur. Tablo 4.1’de belirtilen morfolojik özellikler de yapının manyetik karakteristiğini etkileyen unsurlardır. Ayrıca Şekil 5.6’de gösterildiği üzere; FeB(2) için demirin (Fe) sıcaklıkla değişen bcc modelindeki birim hücre yapısı ele alınarak yapılan taban durumu enerji hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi ($J_{\text{Fe-Fe}}$) 0.7 eV olarak bulunmuştur. FeB(2)’nin birim hacim başına düşen manyetik dipol momenti yani manyetizasyonu (M) 0K sıcaklığında 1A/m değerinden başlayarak, den başlayarak Cruie sıcaklığında ($T_c=205\text{K}$) içine alan 190K-210K aralığında dramatik şekilde düşüş göstermiştir. FeB(2)’nin manyetik duyarlılığına (χ) bakacak olursak, 0K değerinden başlayarak 205K olan Curie sıcaklığına kadar arttığını daha sonrada aynı hızda düştüğünü görürüz. Bu bilgiler ışığında FeB(2)’nin manyetik davranış olarak ferrimanyetik (FiM) karakter sergilediği görülmüştür.



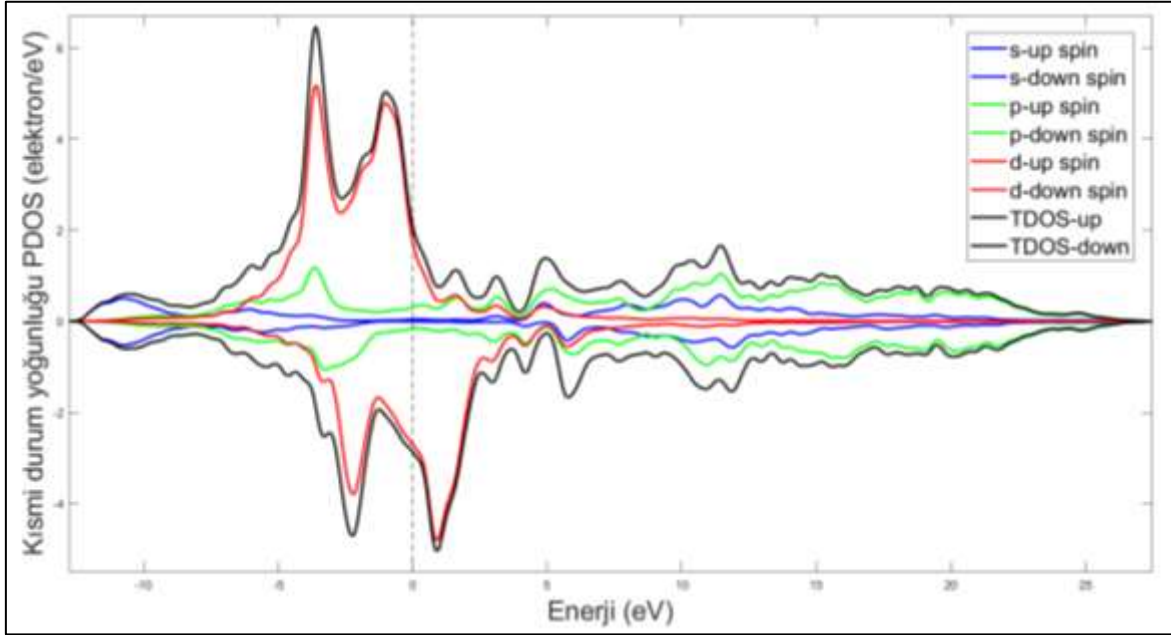
Şekil 5.6: FeB(2)'nin Manyetik Duyarlılığı ve Curie Sıcaklığı.

5.1.3 Fe₂B(1)'in Yapısal ve Manyetik Özellikleri

5.1.3.1 Fe₂B(1) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı

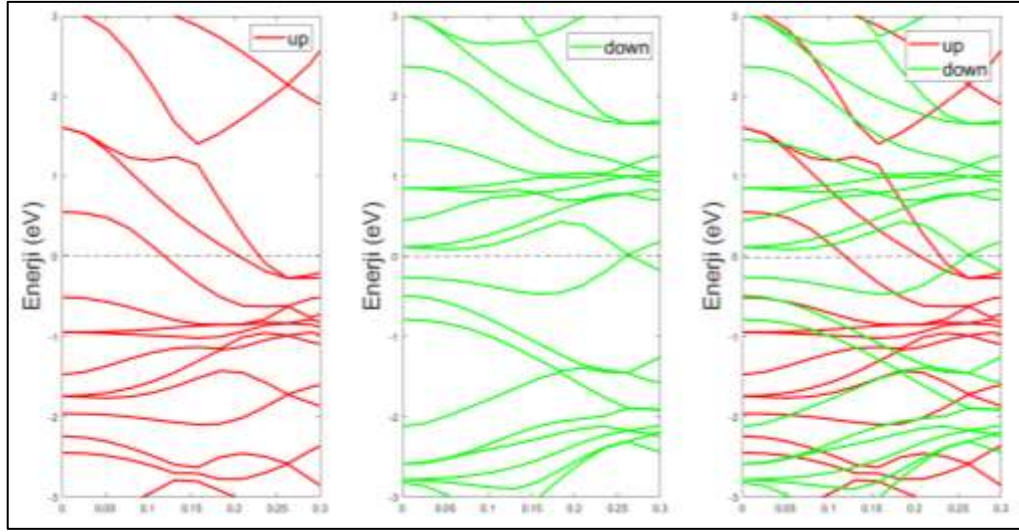
Şekil 5.7'de Fe₂B(1) için s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bunların toplamından elde edilmiş olan toplam durum yoğunluğu (TDOS) görülmektedir. PDOS grafiğinde sıfırın üstünde kalan alanlar yukarı yönlü (α) spin dönüşlerinden, sıfırın altında kalan alanlar ise aşağı yönlü (β) spin dönüşlerini temsil etmektedir. Dalga uzayında iletim ve valans bölgeleri enerji bantları kullanılarak Fe₂B(1) için topolojik elektronik karakter belirlenmiş ve toplam durum yoğunluğu (TDOS) ölçümleri sayesinde Fe₂B(1)'in manyetik özellikleri hakkında da bilgi sahibi olunmuştur. Ayrıca kısmi durum yoğunluğu (PDOS) grafikleri kullanılarak Fe₂B(1)'in elektronik yapısı hakkında niteliksel bilgilere de ulaşılmıştır. Fermi seviyesinin yakın çevresinde ortalama net mıknatıslanmanın varlığı, Şekil 5.7'deki azınlık spin kanalındaki durum yoğunluğunun major bölgeden daha düşük seviyede olmasıyla açıklanabilmektedir. Bu durum Fe₂B(1)'in ferromanyetik (FM) davranışına borun p orbitalinin (B-p) ve demirin d orbitalinin (Fe-d) önemli katkı sunduğu

görülmüştür. Oluşan p-d hibritleşmesi ferromanyetik (FM) davranışın önemli nedenlerinden biridir. Bu bilgiler ışığında $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in ferromanyetik davranış sergilediği sonucuna ulaşılmıştır.



Şekil 5.7: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için Kısmi (PDOS) ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).

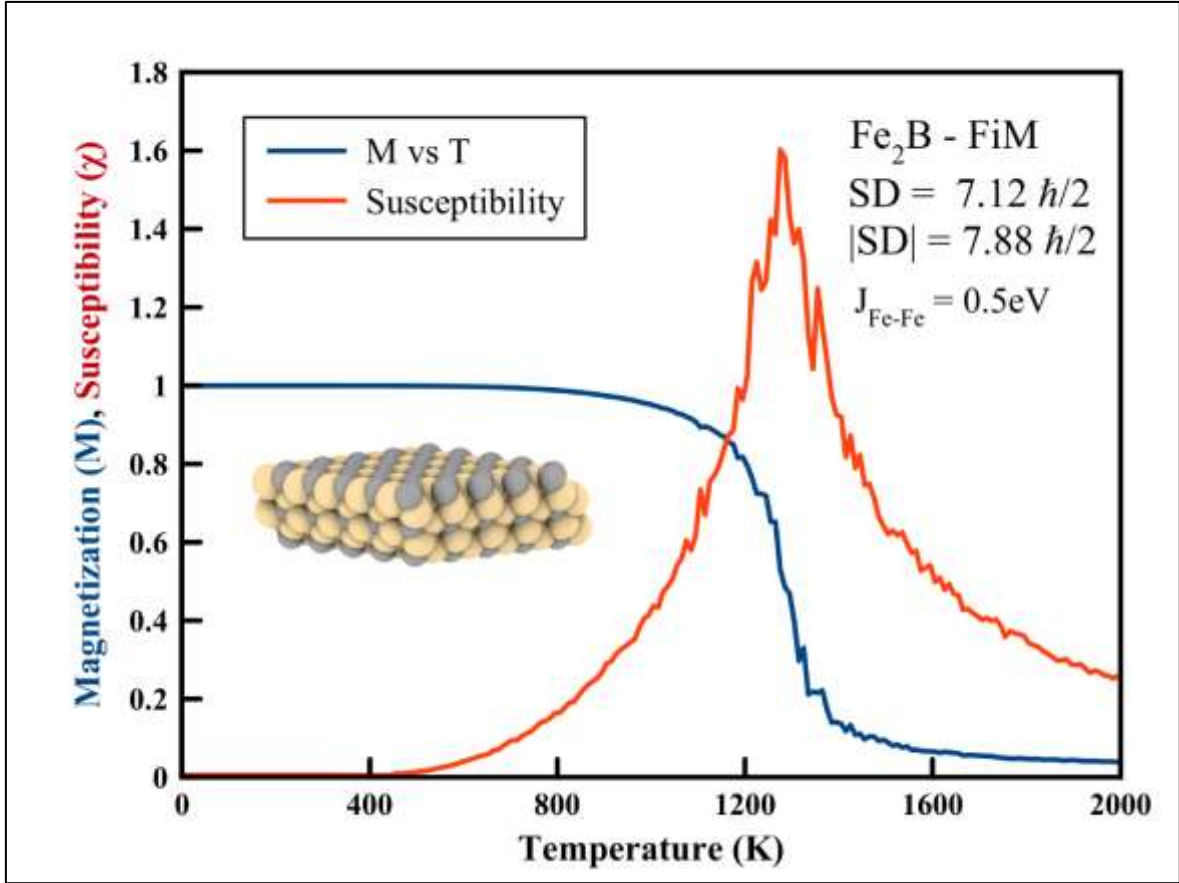
$\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için major ve minor spin kanallarının bant yapısı Şekil 5.8’de gösterilmektedir. Elektronik band yapısı çizilirken Fermi enerji seviyesi sıfır olarak ($E_F = 0$) ayarlanmıştır. Sıfır seviyesinin altındakiler valans bandı, üstündekiler ise iletim bandıdır. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’e ait bant yapısında bulunan majör ve minör spin kanalları yukarı ve aşağı yönlü spin durumları için incelendiğinde iletim ve valans bandı arasındaki enerji farkının minimum olduğu ve yer yer üst üste binmiş olduğu görülmektedir. Buda bize malzemenin metalik durumu ve iletim kabiliyeti hakkında fikir vermektedir. Bant yapısı $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’in metalik özellik gösterdiğini ve yarı-metalik davranıştan kaçındığı göstermektedir. Bu kalkanlama malzemelerinde bulunması gereken elektriksel iletkenlik koşulunu malzemenin yerine getirebileceğini göstermesi açısından ayrıca önemlidir.



Şekil 5.8: Fe₂B(1) İçin Elektronik Bant Yapısı.

5.1.3.2 Fe₂B(1) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı

Şekil 5.7’de atomik orbitallerdeki elektron integrallerinin üst üste gelmesi ve hibritleşmeleri sayesinde Fe₂B(1)’in yapısal özellikleri hakkında bilgi sahibi olunulmuştur. Tablo 4.1’de belirtilen morfolojik özellikler de yapının manyetik karakteristiğini etkileyen unsurlardır. Ayrıca Şekil 5.9’da gösterildiği üzere; Fe₂B(1) için demirin (Fe) sıcaklıkla değişen bcc modelindeki birim hücre yapısı ele alınarak yapılan taban durumu enerji hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi (J_{Fe-Fe}) 0.5 eV olarak bulunmuştur. Fe₂B(1)’in birim hacim başına düşen manyetik dipol momenti yani manyetizasyonu (M) 0K sıcaklığında 1A/m değerinden başlayarak, den başlayarak Cruie sıcaklığında ($T_c=1275K$) içine alan 1100K-1400K aralığında dramatik şekilde düşüş göstermiştir. Fe₂B(1)’in manyetik duyarlılığına (χ) bakacak olursak, 0K değerinden başlayarak 1275K olan Curie sıcaklığına kadar arttığını daha sonrada aynı hızda düştüğünü görürüz. Bu bilgiler ışığında Fe₂B(1)’in manyetik davranış olarak ferrimanyetik (FiM) karakter sergilediği görülmüştür.



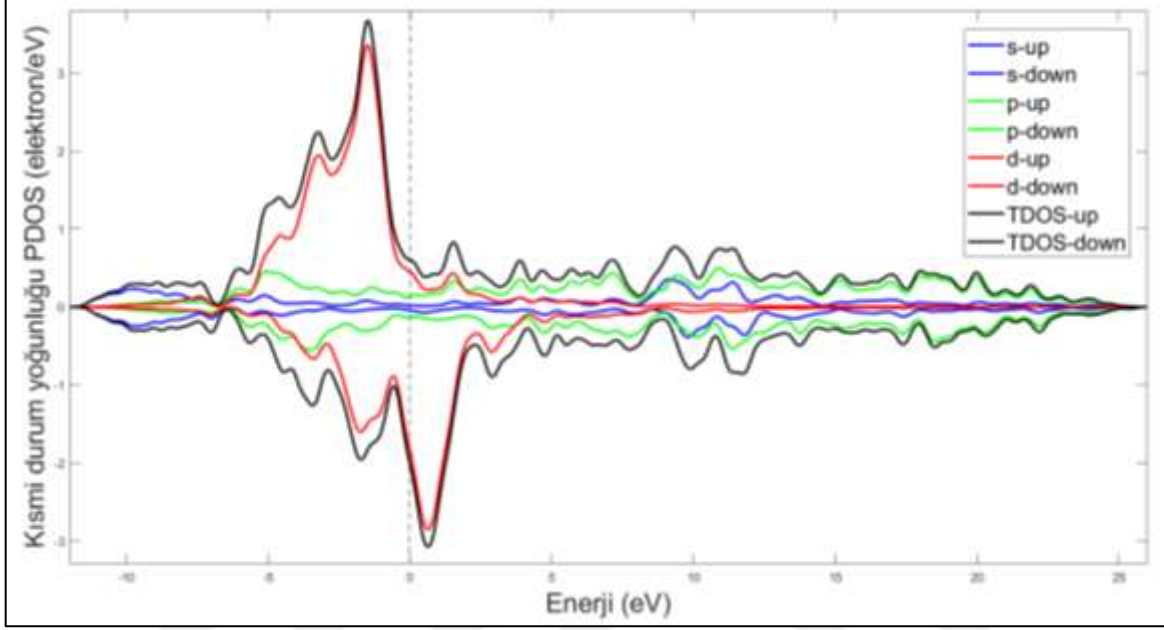
Şekil 5.9: Fe₂B(1)'nin Manyetik Duyarlılığı ve Curie Sıcaklığı.

5.1.4 Fe₂B(2)'nin Yapısal ve Manyetik Özellikleri

5.1.4.1 Fe₂B(2) için kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bant yapısı

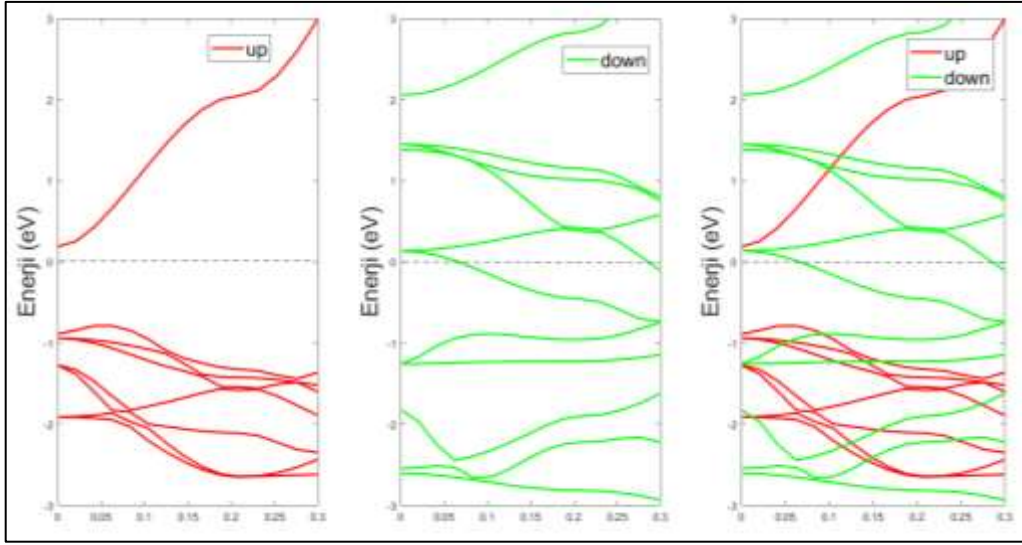
Şekil 5.10'da Fe₂B(2) için s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kısmi durum yoğunluğu (PDOS) ve bunların toplamından elde edilmiş olan toplam durum yoğunluğu (TDOS) görülmektedir. PDOS grafiğinde sıfırın üstünde kalan alanlar yukarı yönlü (α) spin dönüşlerinden, sıfırın altında kalan alanlar ise aşağı yönlü (β) spin dönüşlerini temsil etmektedir. Dalga uzayında iletim ve valans bölgeleri enerji bantları kullanılarak Fe₂B(2) için topolojik elektronik karakter belirlenmiş ve toplam durum yoğunluğu (TDOS) ölçümleri sayesinde Fe₂B(2)'nin manyetik özellikleri hakkında da bilgi sahibi olunmuştur. Ayrıca kısmi durum yoğunluğu (PDOS) grafikleri kullanılarak Fe₂B(2)'nin elektronik yapısı hakkında niteliksel bilgilere de ulaşılmıştır. Fermi seviyesinin yakın çevresinde ortalama net mıknatıslanmanın varlığı, Şekil 5.10'deki azınlık spin kanalındaki durum yoğunluğunun major bölgeden daha düşük

seviyede olmasıyla açıklanabilmektedir. Bu durum $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin ferromanyetik (FM) davranışına borun p orbitalinin (B-p) ve demirin d orbitalinin (Fe-d) önemli katkı sunduğu görülmüştür. Oluşan p-d hibritleşmesi ferromanyetik (FM) davranışın önemli nedenlerinden biridir. Bu bilgiler ışığında $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin ferromanyetik davranış sergilediği sonucuna ulaşılmıştır.



Şekil 5.10: $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ İçin Kısmi (PdOS) ve Toplam Durum Yoğunluğu (TDOS).

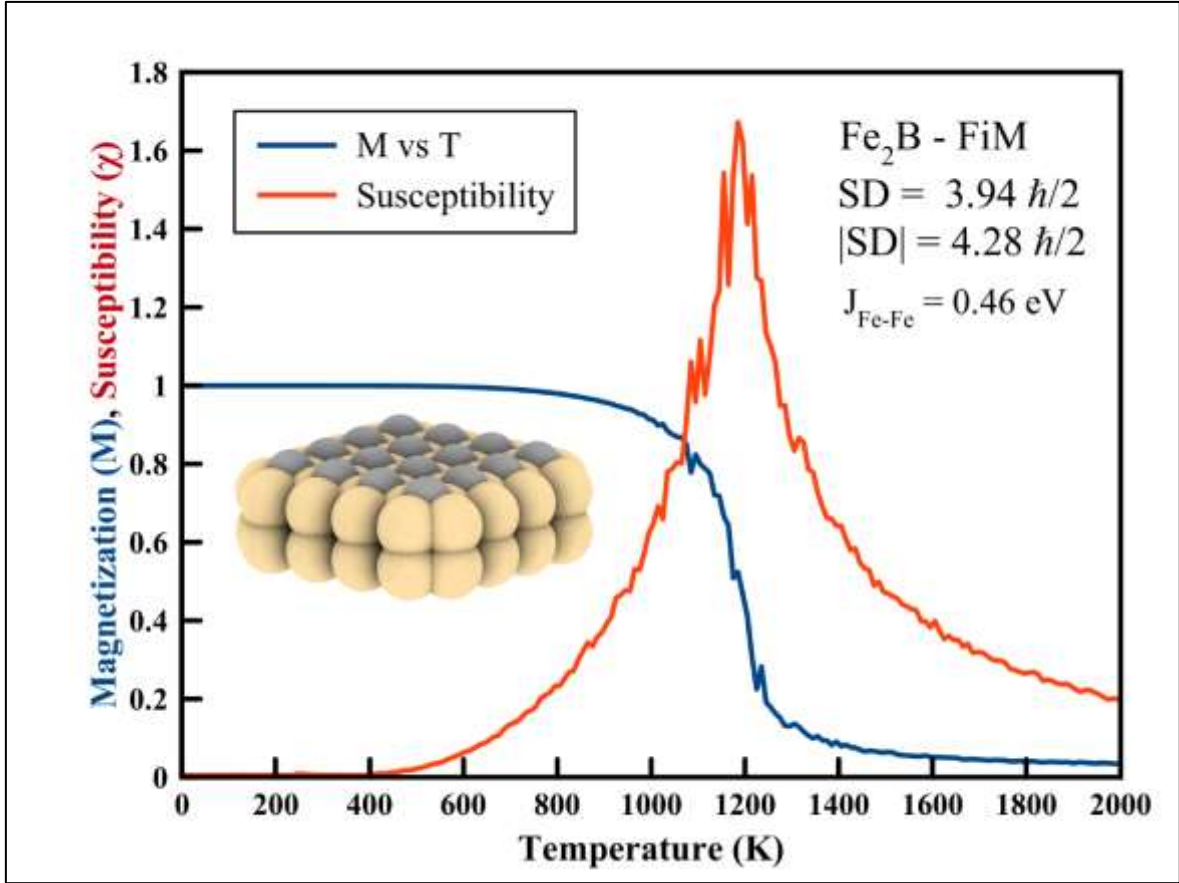
$\text{Fe}_2\text{B}(2)$ için major ve minor spin kanallarının bant yapısı Şekil 5.11'de gösterilmektedir. Elektronik bant yapısı çizilirken Fermi enerji seviyesi sıfır olarak ($E_F = 0$) ayarlanmıştır. Sıfır seviyesinin altındakiler valans bandı, üstündekiler ise iletim bandıdır. $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'ye ait bant yapısında bulunan majör ve minör spin kanalları yukarı ve aşağı yönlü spin durumları için incelendiğinde iletim ve valans bandı arasındaki enerji farkının minimum olduğu ve yer yer üst üste binmiş olduğu görülmektedir. Buda bize malzemenin metalik durumu ve iletim kabiliyeti hakkında fikir vermektedir. Bant yapısı $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin metalik özellik gösterdiğini ve yarı-metalik davranıştan kaçındığı göstermektedir. Bu kalkanlama malzemelerinde bulunması gereken elektriksel iletkenlik koşulunu malzemenin yerine getirebileceğini göstermesi açısından ayrıca önemlidir.



Şekil 5.11: Fe₂B(2) İçin Elektronik Bant Yapısı.

5.1.4.2 Fe₂B(2) için manyetik duyarlılık ve Curie sıcaklığı

Şekil 5.10’da atomik orbitallerdeki elektron integrallerinin üst üste gelmesi ve hibritleşmeleri sayesinde Fe₂B(2)’nin yapısal özellikleri hakkında bilgi sahibi olunulmuştur. Tablo 4.1’de belirtilen morfolojik özellikler de yapının manyetik karakteristiğini etkileyen unsurlardır. Ayrıca Şekil 5.12’de gösterildiği üzere; Fe₂B(2) için demirin (Fe) sıcaklıkla değişen bcc modelindeki birim hücre yapısı ele alınarak yapılan taban durumu enerji hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi (J_{Fe-Fe}) 0.46 eV olarak bulunmuştur. Fe₂B(2)’nin birim hacim başına düşen manyetik dipol momenti yani manyetizasyonu (M) 0K sıcaklığında 1A/m değerinden başlayarak, den başlayarak Cruie sıcaklığında ($T_c=1200K$) içine alan 1000K-1400K aralığında dramatik şekilde düşüş göstermiştir. Fe₂B(2)’in manyetik duyarlılığına (χ) bakacak olursak, 0K değerinden başlayarak 1200K olan Curie sıcaklığına kadar arttığını daha sonrada aynı hızda düştüğünü görürüz. Bu bilgiler ışığında Fe₂B(2)’nin manyetik davranış olarak ferrimanyetik (FiM) karakter sergilediği görülmüştür.



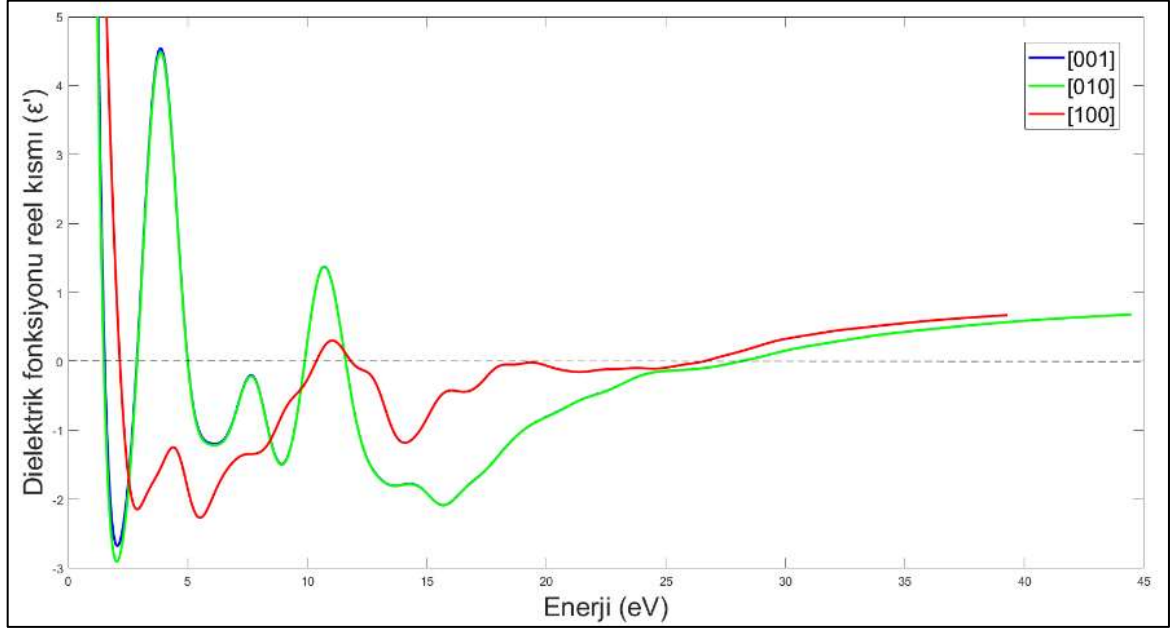
Şekil 5.12: Fe₂B(2)'nin Manyetik Duyarlılığı ve Curie Sıcaklığı.

5.2 ENERJİ HESAPLAMALARI: DİELEKTRİK FONKSİYONU VE OPTİK ÖZELLİKLER

Perdev-Burke-Ernzerhov (PBEsol) fonksiyoneli ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) kullanılarak FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin ferrimanyetik (FiM) olduğu durumlar incelenmiştir. Dielektrik fonksiyonun frekansa bağlı değişiminin hesaplanması ile dielektrik tensörü elde edilmiştir. Elde edilen dielektrik fonksiyonun gerçekte kısmının (ϵ') ve imajiner kısmının (ϵ'') enerjiye bağlı değişimleri ve buna bağlı optik özelliklerindeki değişimler (soğurma $\alpha(\omega)$, yansıma $R(\omega)$, kırılma ($n(\omega)$), sönümlenme katsayısı $k(\omega)$, kayıp güç $L(\omega)$) fotonun malzemeye geliş yönüne ([001], [010], [100] polarizasyon durumları için) bağlı olarak aşağıdaki grafiklerde ayrı ayrı gösterilmiştir.

5.2.1 FeB(1) İçin Dielektrik Fonksiyonu ve Optik Özellikler

Şekil 5.13’de FeB(1)’in dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmının (ϵ') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

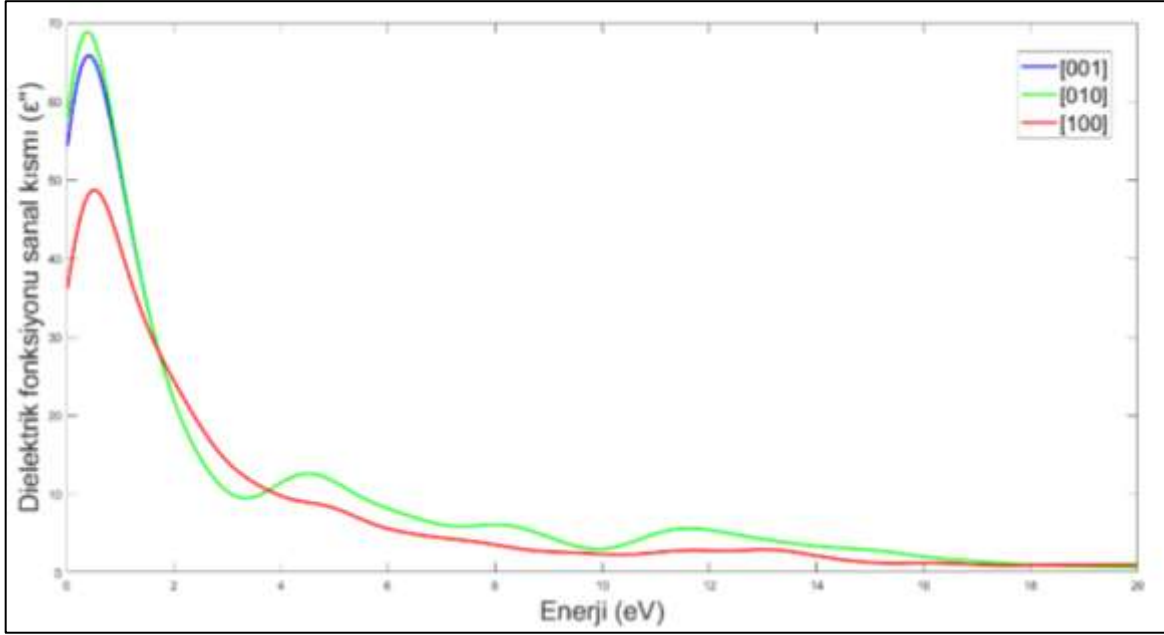


Şekil 5.13: FeB(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.

Şekil 5.13’de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında FeB(1)’in dielektrik fonksiyonun gerçek (reel) kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve 010 olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri 0-5 eV aralığındaki küçük bir farklılık haricinde aynı değerleri aldıkları, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı gözlemlenmiştir. Sıfıra yakın frekans değerlerinde göstermiş oldukları statik dielektrik davranış 2 eV seviyesinden sonra dinamik hale gelmiş ve 25 eV mertebesine kadar ışığa ters tepki vermeye devam etmişlerdir. Depolanan enerjiden sorumlu olan reel kısım (ϵ') özellikle polarize olmuş elektromanyetik dalganın bileşenlerinden biri olan elektrik alandan etkilemiş ve relaksasyon frekansı karakteristiği göstermiştir. 25 eV mertebesinden sonra tüm durumlar için pozitif değer olarak daha stabil hale gelmiştir. 25 eV’luk enerji seviyesinden sonra ise [100] ile

adreslenmiş olan foton polarizasyon durumu için (ϵ') aynı değerle sahip [001] ve [010] polarizasyonları için aldığı değerden daha büyük değerler almaya devam etmiştir.

Şekil 5.14'de FeB(1)'in dielektrik fonksiyonunun sanal kısmının (ϵ'') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, 100 perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

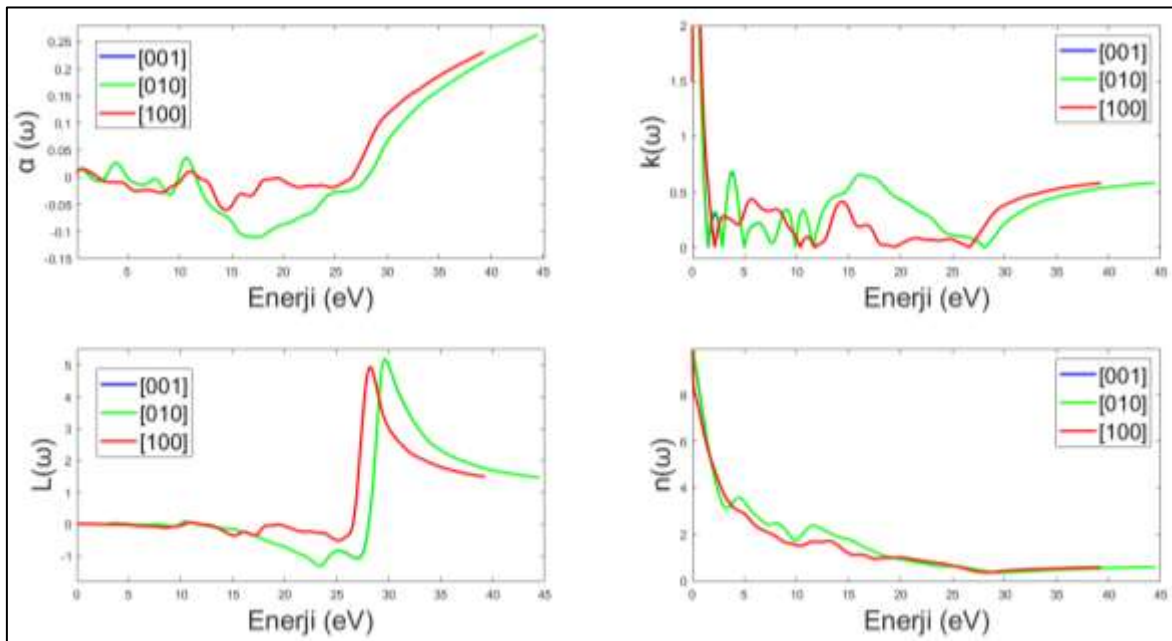


Şekil 5.14: FeB(1) için Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (ϵ'') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.

Şekil 5.14'de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında FeB(1)'in dielektrik fonksiyonun sanal kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve [010] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri 0-2 eV aralığındaki küçük bir farklılık haricinde aynı değerleri aldıkları, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı ve FeB(1)'in daha küçük ϵ'' değeri aldığı gözlemlenmiştir. Bilindiği üzere dielektrik fonksiyonun sanal kısım (ϵ'') enerji kayıplarından yani foton dalgasının sönümlenmesinden sorumludur. ~1 eV'luk enerji düzeyine kadar artmış olan (kızılötesi bölgeye denk düşer) ϵ'' değeri aynı zamanda soğurma etkisinde artmış olduğu bölgedir. Ancak bu enerji seviyesinden sonra ϵ'' değeri dramatik olarak düşmeye başlamış ve ~6 eV'luk enerji seviyesine kadar bu etki sürmüştür. Şekil

5.14'deki grafik bize FeB(1)'in en düşük soğurma performansının [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda gerçekleşeceğini göstermektedir.

Şekil 5.15'de FeB(1)'in optik özelliklerini belirleyen soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümlenme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) foton enerjisine bağlı değişimleri fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumları için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



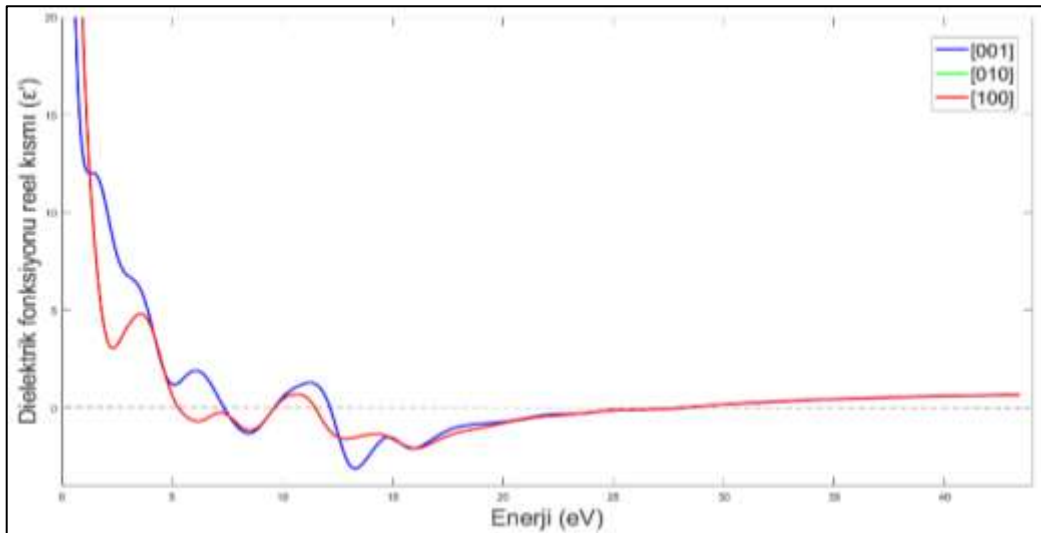
Şekil 5.15: FeB(1) İçin $A(\Omega)$, $K(\Omega)$, $L(\Omega)$ Ve $N(\Omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.

Şekil 5.15'de FeB(1)'in optik özelliklerindeki değişimi foton enerjisinin [001], [010] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarına bağlı değerlendirecek olursak; [001] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarında FeB(1) soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümlenme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) için aynı optik özellik karakterini sergilemiş, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise tüm özellikler de ayrışan bir davranış ortaya çıkmıştır. Soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) tüm polarizasyon durumları için 25 eV (ultraviyole bölge içerisinde) enerji seviyesinden sonra anlamlı bir yükselme göstermiştir. [100] ile belitilen polarizasyon durumundaki soğurma katsayısının değeri [001] ve [010] polarizasyon durumlarından daha yüksek değerdedir. Sönümlenme

katsayısındaki ($k(\omega)$) osilasyon etkisi 30 eV'luk enerji seviyesine kadar devam etmiş, daha yüksek enerji seviyelerinde kararlı hale gelmiştir. [100] ile belirtilen polarizasyon durumundaki sönümleme katsayısının değeri [001] ve [010] polarizasyon durumlarından daha yüksek değerdedir. Enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) [001] ve [010] ile belirtilen polarizasyon durumlarında aynı davranışı sergilemiş ve aynı değeri almış olmalarına rağmen [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 25-30 eV enerji aralığında ki ani yükselme etkisi, daha büyük enerji seviyelerinde yerini parabolik bir düşüş etkisine bırakmıştır. Aynı zamanda 30 eV'dan daha büyük enerjilerde FeB(1)'in enerji-kayıp fonksiyonundaki tam ters davranışı dikkate değerdir. Kırılma indisi ($n(\omega)$) [001] ve [010] polarizasyon durumlarında tamamen aynı karakteri sergilemiş, [100] ile belirlenen polarizasyon durumu için ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 30 eV'luk enerji seviyesine kadar olan enerji aralığında dramatic bir düşüş yaşanmasına rağmen 30 eV'dan yüksek enerji seviyelerinde tüm polarizasyon durumlarında hemen hemen aynı performans gözlemlenmiştir.

5.2.2 FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonu ve Optik Özellikler

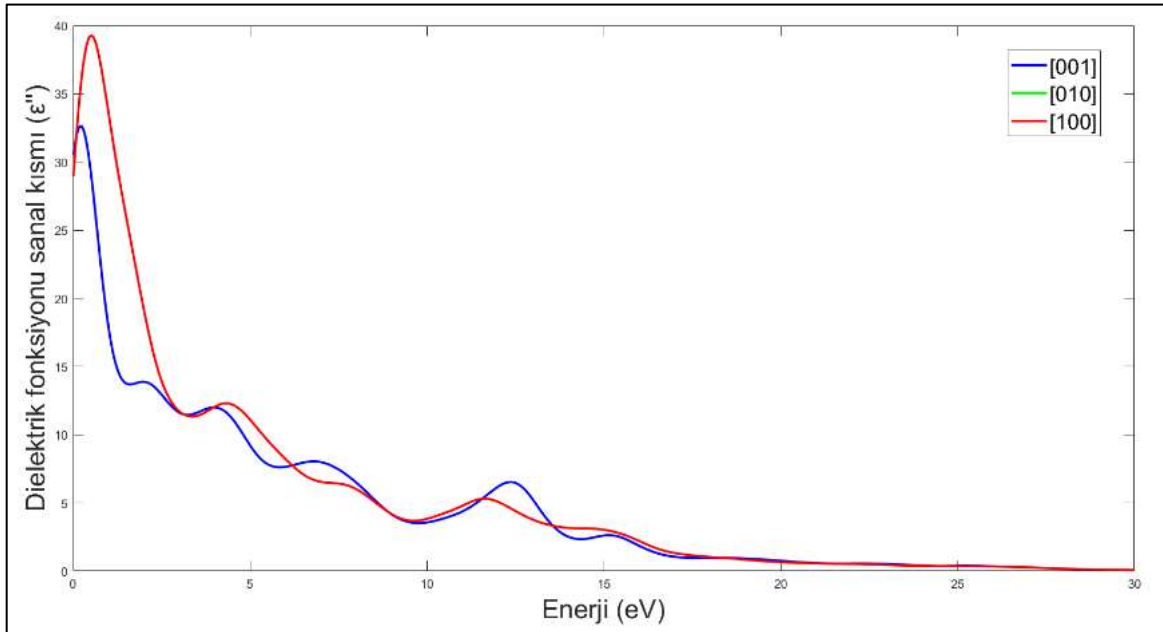
Şekil 5.16'da FeB(2)'nin dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmının (ϵ') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



Şekil 5.16: FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.

Şekil 5.16'da görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında FeB(2)'nin dielektrik fonksiyonun gerçek (reel) kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve [010] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergilemişler ve aynı değerleri almışlardır. [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı gözlemlenmiştir. Sıfıra yakın frekans değerlerinde göstermiş oldukları statik dielektrik davranış ~ 1.6 eV seviyesinden sonra dinamik hale gelmiş ve 25 eV mertebesine kadar ışığa ters tepki vermeye devam etmişlerdir. Depolanan enerjiden sorumlu olan reel kısım (ϵ') özellikle polarize olmuş elektromanyetik dalganın bileşenlerinden biri olan elektrik alandan etkilemiş ve relaksasyon frekansı karakteristiği göstermiştir. 25 eV mertebesinden sonra tüm durumlar için pozitif değer olarak daha stabil hale gelmiştir. 25 eV'luk enerji seviyesinden sonra [001], [010] ve [100] ile adreslenmiş olan foton polarizasyon durumu için (ϵ') ihmal edilebilecek kadar küçük bir fark ile aynı değerleri almaya devam etmişlerdir.

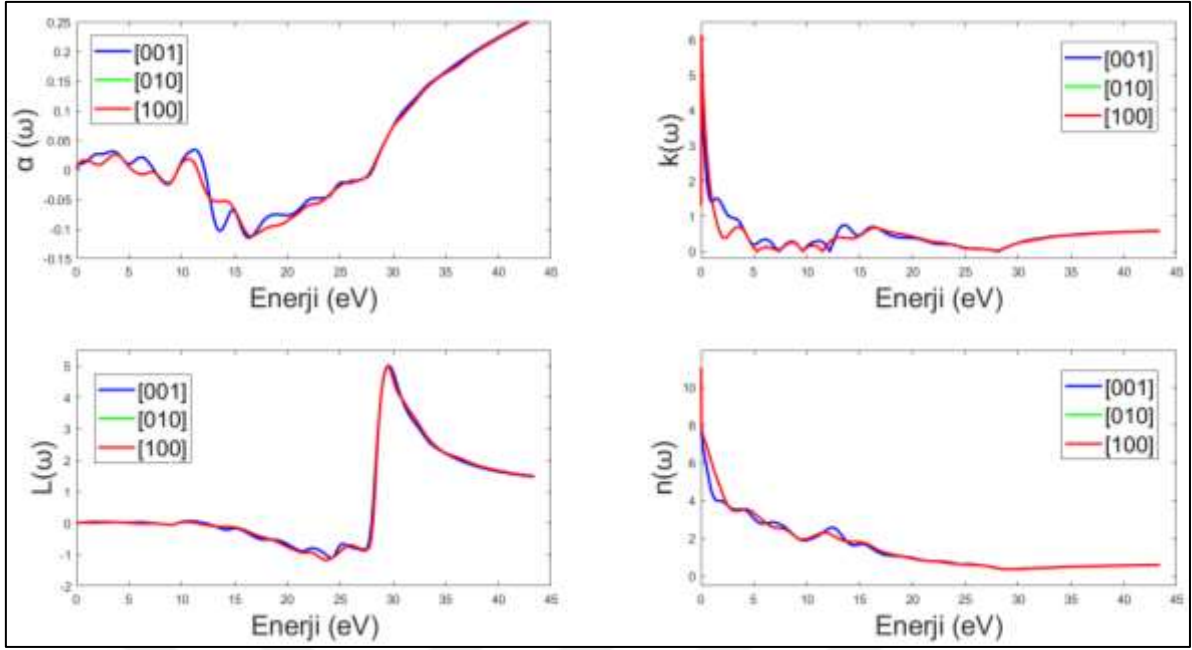
Şekil 5.17'de FeB(2)'nin dielektrik fonksiyonunun sanal kısmının (ϵ'') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



Şekil 5.17: FeB(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (E'') Enerjiye Bağlı Değişimi.

Şekil 5.17’de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında FeB(2)’nin dielektrik fonksiyonun sanal kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve [010] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri aynı değerleri aldıkları, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı ve FeB(2)’nin daha büyük ϵ'' değeri aldığı gözlemlenmiştir. Bilindiği üzere dielektrik fonksiyonun sanal kısım (ϵ'') enerji kayıplarından yani foton dalgasının sönümlenmesinden sorumludur. [001] ve [010] ile belirtilen polarizasyon durumunda ~ 0.5 eV’luk enerji düzeyine kadar artmış olan (kızılötesi bölgeye denk düşer) ϵ'' değeri aynı zamanda soğurma etkisinin de artmış olduğu bölgedir. [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ~ 1 eV’luk enerji düzeyine kadar artmış olan (kızılötesi bölgeye denk düşer) ϵ'' değeri aynı zamanda soğurma etkisinin de artmış olduğu bölgedir. Ancak bu enerji seviyesinden sonra ϵ'' değeri dramatik olarak düşmeye başlamış ve ~ 10 eV’luk enerji seviyesine kadar bu etki sürmüştür. Şekil 5.14’deki grafik bize FeB(2)’nin en yüksek soğurma performansının [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda gerçekleşeceğini göstermektedir.

Şekil 5.18’de FeB(2)’nin optik özelliklerini belirleyen soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümlenme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) foton enerjisine bağlı değişimleri fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumları için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



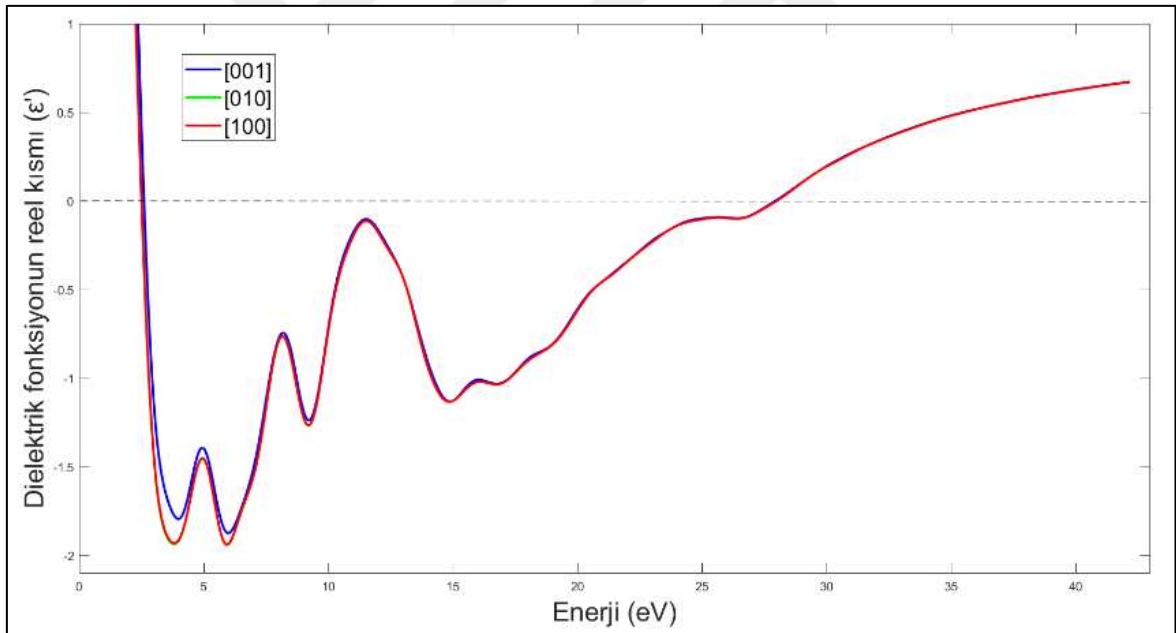
Şekil 5.18: FeB(2) İçin $A(\omega)$, $K(\omega)$, $L(\omega)$ Ve $N(\omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.

Şekil 5.18’de FeB(2)’nin optik özelliklerindeki değişimi foton enerjisinin [001], [010] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarına bağlı değerlendirecek olursak; [001] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarında FeB(2) soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümleme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) için aynı optik özellik karakterini sergilemiş, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise tüm özellikler de ayrışan bir davranış ortaya çıkmıştır. Soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) tüm polarizasyon durumları için 17 eV (ultraviyole bölge içerisinde) enerji seviyesinden sonra anlamlı bir yükselme göstermiştir. 28 eV enerji seviyesine kadar [100] ile belitrilen polarizasyon durumundaki soğurma katsayısının değeri [001] ve [010] polarizasyon durumlarından daha düşük değerler almışken FeB(2) daha yüksek foton enerjileri için tüm polarizasyon durumları için hemen hemen aynı değerleri üretmiştir. Sönümleme katsayısındaki ($k(\omega)$) ani düşüş etkisi 0-5 eV enerji aralığında yaşanmıştır. $k(\omega)$ ’daki osilasyon etkisi ~20 eV’luk enerji seviyesine kadar devam etmiş, daha yüksek enerji seviyelerinde kararlı hale gelmiştir. [100] ile belitrilen polarizasyon durumundaki sönümleme katsayısının değeri [001] ve [010] polarizasyon durumlarından daha yüksek değerdedir. Enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) [001] ve [010] ile belirtilen polarizasyon durumlarında aynı davranışı sergilemiş ve aynı değeri almış olmalarına rağmen [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 25-30 eV enerji aralığında ki ani yükselme etkisi, daha büyük enerji

seviyelerinde yerini parabolik bir düşüş etkisine bırakmıştır. Aynı zamanda 30 eV'dan büyük enerji seviyeleri için FeB(2)'nin enerji-kayıp fonksiyonundaki tam ters etkide dikkate değerdir. Kırılma indisi ($n(\omega)$) [001] ve [010] polarizasyon durumlarında tamamen aynı karakteri sergilemiş, [100] ile belirlenen polarizasyon durumu için ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 20 eV'luk enerji seviyesine kadar olan enerji aralığında dramatik bir düşüş yaşanmasına rağmen 30 eV'dan yüksek enerji seviyelerinde tüm polarizasyon durumlarında hemen hemen aynı performans gözlemlenmiştir.

5.2.3 Fe₂B(1) İçin Dielektrik Fonksiyonu ve Optik Özellikler

Şekil 5.19'da Fe₂B(1)'in dielektrik fonksiyonunun gerçekte kısmının (ϵ') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

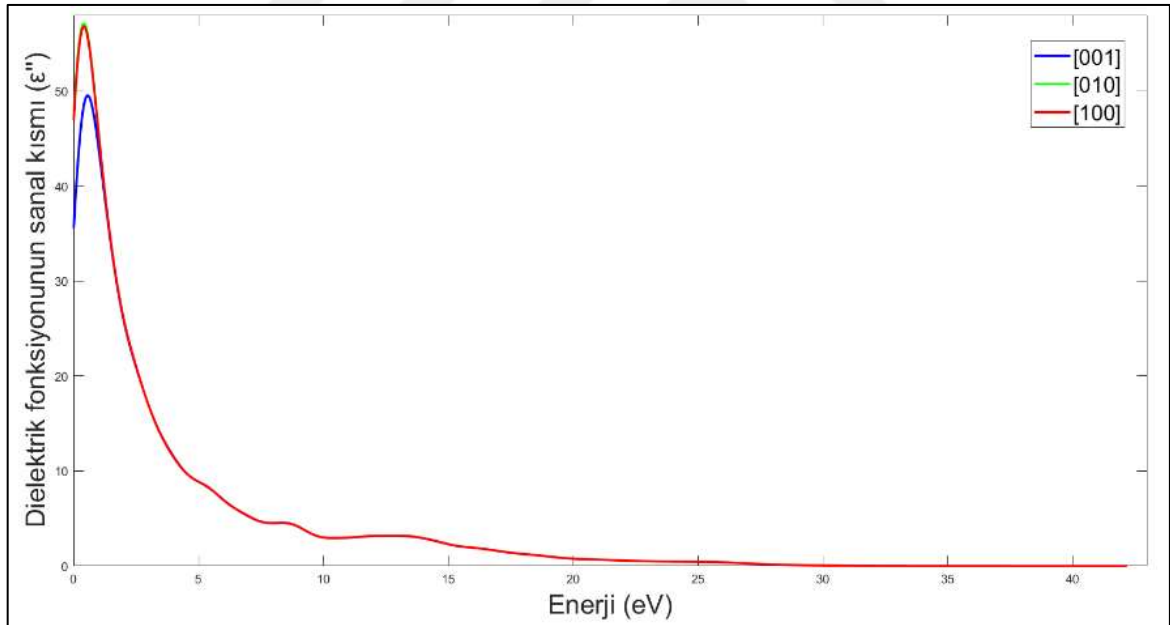


Şekil 5.19: Fe₂B(1) İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısmının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.

Şekil 5.19'da görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında Fe₂B(1)'in dielektrik fonksiyonun gerçekte (reel) kısmı üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001], [010] ve [100] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri ~3-7 eV aralığındaki küçük bir farklılık haricinde aynı değerleri aldıkları

görülmüştür. ~3-7 eV aralığında ise [010] ile [100] polarizasyonlarında ϵ'' 'in değeri birbirleri ile hemen hemen aynı iken, [001] ile belirtilen polarizasyon durumunda ayrıışan bir durum ortaya çıkarak, ϵ' değeri daha büyük olmuştur. Sıfıra yakın frekans değerlerinde göstermiş oldukları statik dielektrik davranış ~3 eV seviyesinden sonra dinamik hale gelmiş ve ~28 eV mertebesine kadar ışığa ters tepki vermeye devam etmişlerdir. Depolanan enerjiden sorumlu olan reel kısım (ϵ') özellikle polarize olmuş elektromanyetik dalganın bileşenlerinden biri olan elektrik alandan etkilemiş ve relaksasyon frekansı karakteristiği göstermiştir. 28 eV mertebesinden sonra tüm durumlar için pozitif değer olarak daha stabil hale gelmiştir. 28 eV'luk enerji seviyesinden sonra ise tüm foton polarizasyon durumu için $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ aynı (ϵ') değeri üretilmeye devam etmiştir.

Şekil 5.20'de $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in dielektrik fonksiyonunun sanal kısmının (ϵ'') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

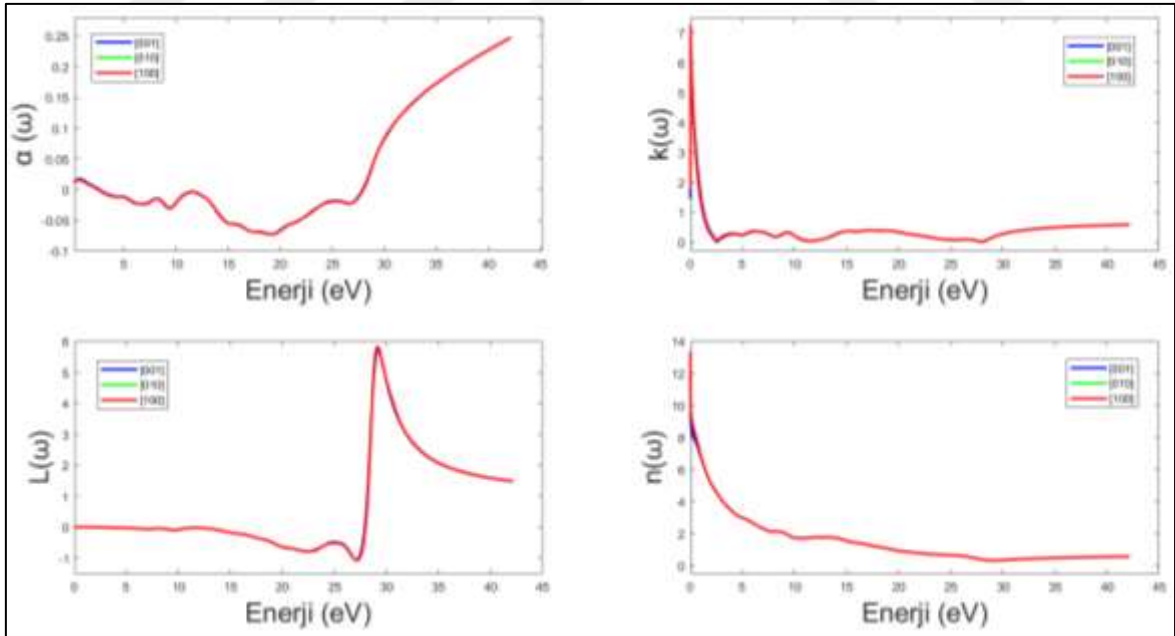


Şekil 5.20: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (E'') Enerjiye Bağlı Değişimi.

Şekil 5.20'de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in dielektrik fonksiyonunun sanal kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001], [010] ve [100] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri 0-2 eV aralığındaki küçük bir farklılık haricinde aynı değerleri aldıkları, [100] ile belirtilen

polarizasyon durumunda ise ayrıışan bir davranışın ortaya çıktığı ve $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in $[001]$ polarizasyon durumunda daha küçük ϵ'' değeri aldığı gözlemlenmiştir. Bilindiği üzere dielektrik fonksiyonun sanal kısım (ϵ'') enerji kayıplarından yani foton dalgasının sönümlenmesinden sorumludur. ~ 1.5 eV'luk enerji düzeyine kadar artmış olan (kızılötesi bölgeye denk düşer) ϵ'' değeri aynı zamanda soğurma etkisinde artmış olduğu bölgedir. Ancak bu enerji seviyesinden sonra ϵ'' değeri dramatik olarak düşmeye başlamış ve ~ 10 eV'luk enerji seviyesine kadar bu etki sürmüştür. Şekil 5.20'deki grafik bize $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in foton enerjisinin 0-2 eV aralığında olduğu durumda soğurma performansının $[001]$ polarizasyonunda gerçekleştiğini bundan sonraki daha yüksek enerji mertebelerinde ise tüm polarizasyon durumları için aynı düzeyde soğurma etkisinin olacağını göstermektedir.

Şekil 5.21'de $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in optik özelliklerini belirleyen soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümlleme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) foton enerjisine bağlı değişimleri fotonun $[001]$, $[010]$, $[100]$ polarizasyon durumları için gösterilmiştir. Grafikte $[001]$ perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, $[010]$ perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, $[100]$ perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

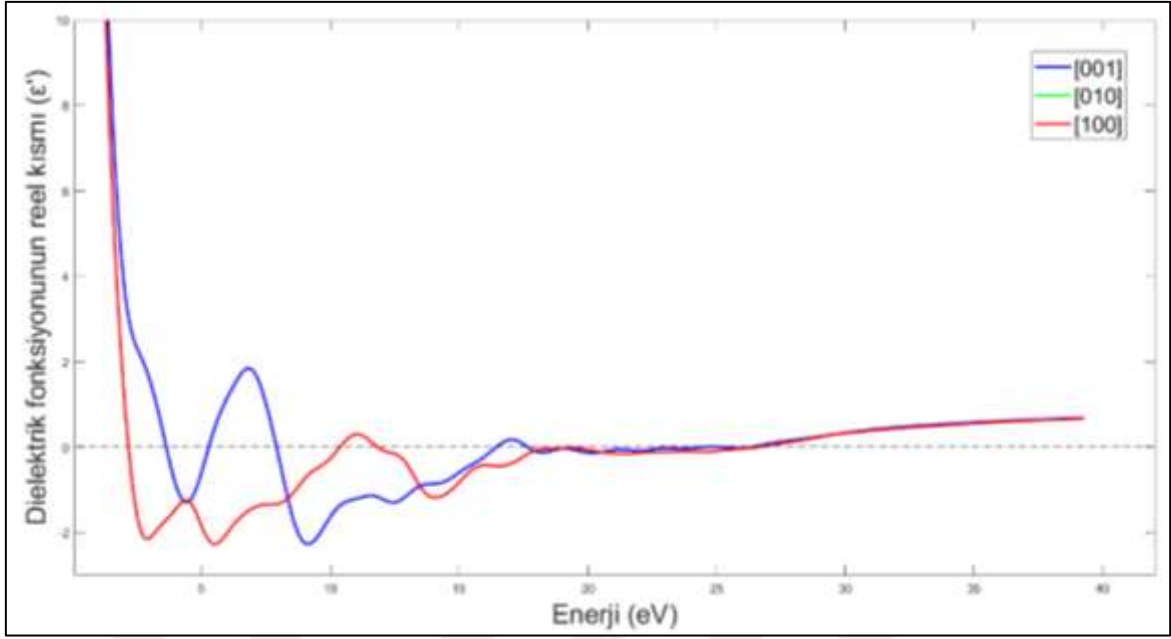


Şekil 5.21: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ İçin $A(\Omega)$, $K(\Omega)$, $L(\Omega)$ Ve $N(\Omega)$ Özelliklerinin Foton Enerjisine Bağlı Değişimleri.

Şekil 5.21’de $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’in optik özelliklerindeki değişimi foton enerjisinin [001], [010] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarına bağlı değerlendirecek olursak; [001], [010] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarında $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümleme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) için hemen hemen aynı optik özellik karakterini sergilemiştir. Soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) tüm polarizasyon durumları için 20 eV (ultraviyole bölge içerisinde) enerji seviyesinden sonra anlamlı bir yükselme göstermiştir. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’in [001], [010] ve [100] polarizasyon koşulları için hemen hemen aynı soğurma karakterini sergilediği görülmüştür. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için sönümleme katsayısındaki ($k(\omega)$) ani düşüş etkisi 0-4 eV enerji aralığında yaşanmıştır. $k(\omega)$ ’daki osilasyon etkisi ~30 eV’luk enerji seviyesine kadar devam etmiş, daha yüksek enerji seviyelerinde kararlı hale gelmiş ve artma eğilimi göstermiştir. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’in [001], [010] ve [100] polarizasyon koşulları için hemen hemen aynı sönümleme katsayısı performansı sergilediği görülmüştür. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) [001], [010] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarında aynı davranışı sergilemiş ve aynı değeri almıştır. 25-30 eV enerji aralığında ki ani yükselme etkisi, daha büyük enerji seviyelerinde yerini parabolik bir düşüş etkisine bırakmıştır. Aynı zamanda 30 eV’den büyük enerji seviyeleri için $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ ’in enerji-kayıp fonksiyonundaki tam ters etkide dikkate değerdir. Kırılma indisi ($n(\omega)$) [001], [010] ve [100] polarizasyon durumlarında hemen hemen aynı karakteri sergilemiştir. 20 eV’luk enerji seviyesine kadar olan enerji aralığında dramatik bir düşüş yaşanmasına rağmen 30 eV’den yüksek enerji seviyelerinde tüm polarizasyon durumlarında daha kararlı davranış sergilediği gözlemlenmiştir.

5.2.4 $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ İçin Dielektrik Fonksiyonu ve Optik Özellikler

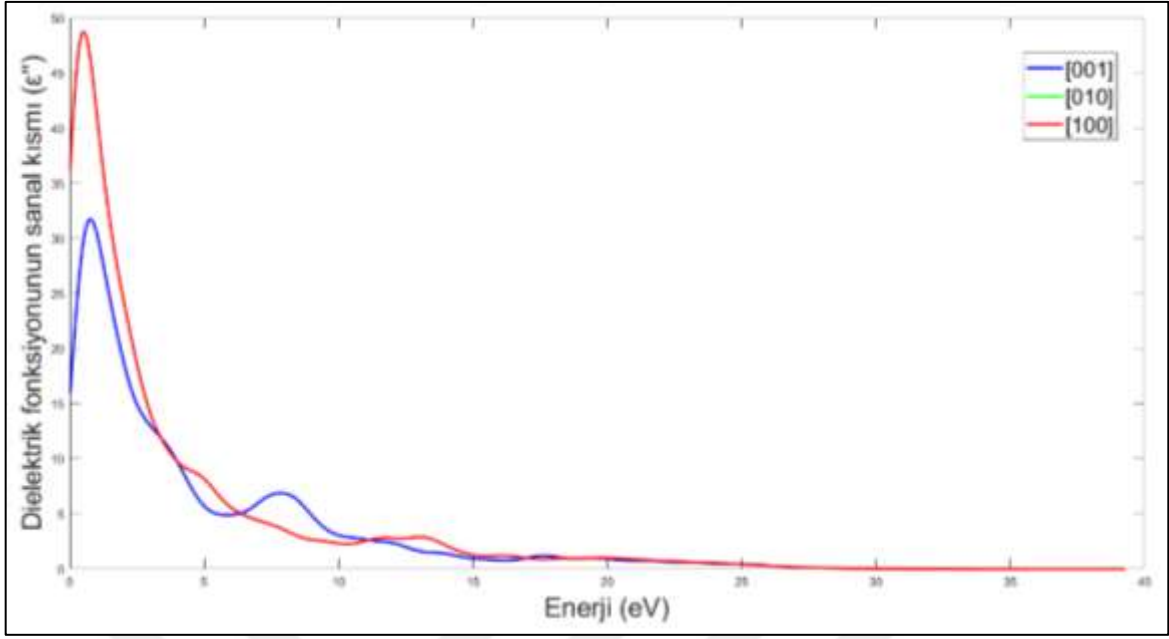
Şekil 5.22’da $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ ’nin dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmının (ϵ') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



Şekil 5.22: $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ İçin Dielektrik Fonksiyonun Gerçek Kısımının (ϵ') Foton Enerjisine Bağlı Değişimi.

Şekil 5.22’de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ ’nin dielektrik fonksiyonun gerçek (reel) kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve [010] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri ve aynı değerleri aldıkları, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı gözlemlenmiştir. Sıfıra yakın frekans değerlerinde göstermiş oldukları statik dielektrik davranış ~ 3 eV seviyesinden sonra dinamik hale gelmiş ve ~ 27 eV mertebesine kadar ışığa ters tepki vermeye devam etmişlerdir. Depolanılan enerjiden sorumlu olan reel kısım (ϵ') özellikle polarize olmuş elektromanyetik dalganın bileşenlerinden biri olan elektrik alandan etkilemiş ve relaksasyon frekansı karakteristiği göstermiştir. ~ 27 eV mertebesinden sonra tüm durumlar için pozitif değer olarak daha stabil hale gelmiştir. ~ 27 eV’luk enerji seviyesinden sonra ise $\text{Fe}_2\text{B}(2)$, [001], [010] ve [100] ile adreslenmiş olan foton polarizasyon durumları için aynı ϵ' değerini üretmeye devam etmiştir.

Şekil 5.23’de $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ ’nin dielektrik fonksiyonunun sanal kısmının (ϵ'') foton enerjisine bağlı değişimi fotonun polarize olduğu [001], [010], [100] durumlar için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [010] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.

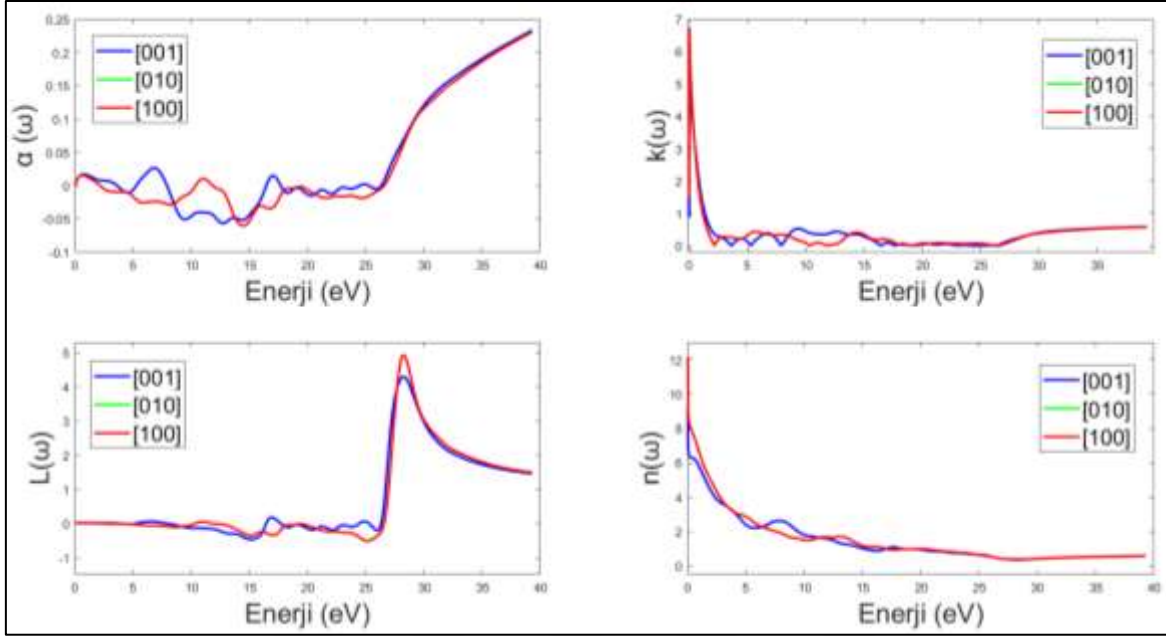


Şekil 5.23: Fe₂B(2) İçin Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısımının (ϵ'') Enerjiye Bağlı Değişimi.

Şekil 5.23’de görüldüğü üzere fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında Fe₂B(2)’in dielektrik fonksiyonun sanal kısım üzerindeki etkisi incelendiğinde; [001] ve [010] olarak adreslenen polarizasyon durumlarında benzer davranış sergiledikleri, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise ayrışan bir davranışın ortaya çıktığı görülmektedir. 0-4 eV aralığındaki enerji seviyesinde [100] ile belirtilen polarizasyon durumu için Fe₂B(2)’nin daha yüksek ϵ'' değeri aldığı gözlemlenmiştir. Bilindiği üzere dielektrik fonksiyonun sanal kısım (ϵ'') enerji kayıplarından yani foton dalgasının sönmelenmesinden sorumludur. ~1 eV’luk enerji düzeyine kadar artmış olan (kızılötesi bölgeye denk düşer) ϵ'' değeri aynı zamanda soğurma etkisinde artmış olduğu bölgedir. Ancak bu enerji seviyesinden sonra ϵ'' değeri dramatik olarak düşmeye başlamış ve ~15 eV’luk enerji seviyesine kadar bu etki sürmüştür. Şekil 5.23’deki grafik bize Fe₂B(2)’nin en yüksek soğurma performansının [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda gerçekleşeceğini göstermektedir.

Şekil 5.24’de Fe₂B(2)’nin optik özelliklerini belirleyen soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönmleme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) foton enerjisine bağlı değişimleri fotonun [001], [001], [100] polarizasyon durumları için gösterilmiştir. Grafikte [001] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi mavi, [001] perspektif

yüzeyindeki girişim etkisi yeşil, [100] perspektif yüzeyindeki girişim etkisi kırmızı rekle gösterilmiştir.



Şekil 5.24: Fe₂B(2) İçin $\alpha(\omega)/\text{eV}$ $k(\omega)/\text{eV}$ $L(\omega)/\text{eV}$ $n(\omega)/\text{eV}$ Grafiği.

Şekil 5.24’de Fe₂B(1)’in optik özelliklerindeki değişimi foton enerjisinin [001], [001] ve 100 ile belirtilen polarizasyon durumlarına bağlı değerlendirecek olursak; [001] ve [100] ile belirtilen polarizasyon durumlarında Fe₂B(1) soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$), sönümleme katsayısı ($k(\omega)$), enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) ve kırılma indisinin ($n(\omega)$) için aynı optik özellik karakterini sergilemiş, [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ise tüm özellikler de ayrışan bir davranış ortaya çıkmıştır. Soğurma katsayısı ($\alpha(\omega)$) tüm polarizasyon durumları için ~27 eV (ultraviyole bölge içerisinde) enerji seviyesinden sonra anlamlı bir yükselme göstermiştir. 10-15 eV aralığı hariç ~27 eV enerji seviyesine kadar [100] ile belitirilen polarizasyon durumundaki soğurma katsayısının değeri [001] ve [001] polarizasyon durumlarından daha düşük değerler almışken daha yüksek enerji seviyelerinde Fe₂B(1) tüm polarizasyon durumları için yaklaşık değerler üretmiştir. Sönümleme katsayısındaki ($k(\omega)$) ani düşüş etkisi 0-4 eV enerji aralığında yaşanmıştır. $k(\omega)$ ’daki osilasyon etkisi ~20 eV’luk enerji seviyesine kadar devam etmiş, daha yüksek enerji seviyelerinde kararlı hale gelmiştir. 20 eV’den daha yüksek enerji seviyelerinde [001], [001] ve [100] ile belirlenen polarizasyon durumları için Fe₂B(2) sönümleme katsayısı için benzer değerleri üretmiş ve ~26 eV’den başlayarak anlamlı bir artış eğilimine girmiştir. Fe₂B(2) için

enerji-kayıp fonksiyonu ($L(\omega)$) [001] ve [001] ile belirtilen polarizasyon durumlarında aynı davranışı sergilemiş ve aynı değeri almış olmalarına rağmen [100] ile belirtilen polarizasyon durumunda ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 25-30 eV enerji aralığında ki ani yükselme etkisi, daha büyük enerji seviyelerinde yerini parabolik bir düşüş etkisine bırakmıştır. Aynı zamanda 30 eV'dan büyük enerji seviyeleri için $Fe_2B(2)$ 'nin enerji-kayıp fonksiyonundaki tam ters etkide dikkate değerdir. Kırılma indisi ($n(\omega)$) [001] ve [001] polarizasyon durumlarında tamamen aynı karakteri sergilemiş, [100] ile belirlenen polarizasyon durumu için ayrışan bir davranış gözlemlenmiştir. 20 eV'luk enerji seviyesine kadar olan enerji aralığında dramatik bir düşüş yaşanmasına rağmen 30 eV'dan yüksek enerji seviyelerinde tüm polarizasyon durumlarında hemen hemen aynı performans gözlemlenmiştir.

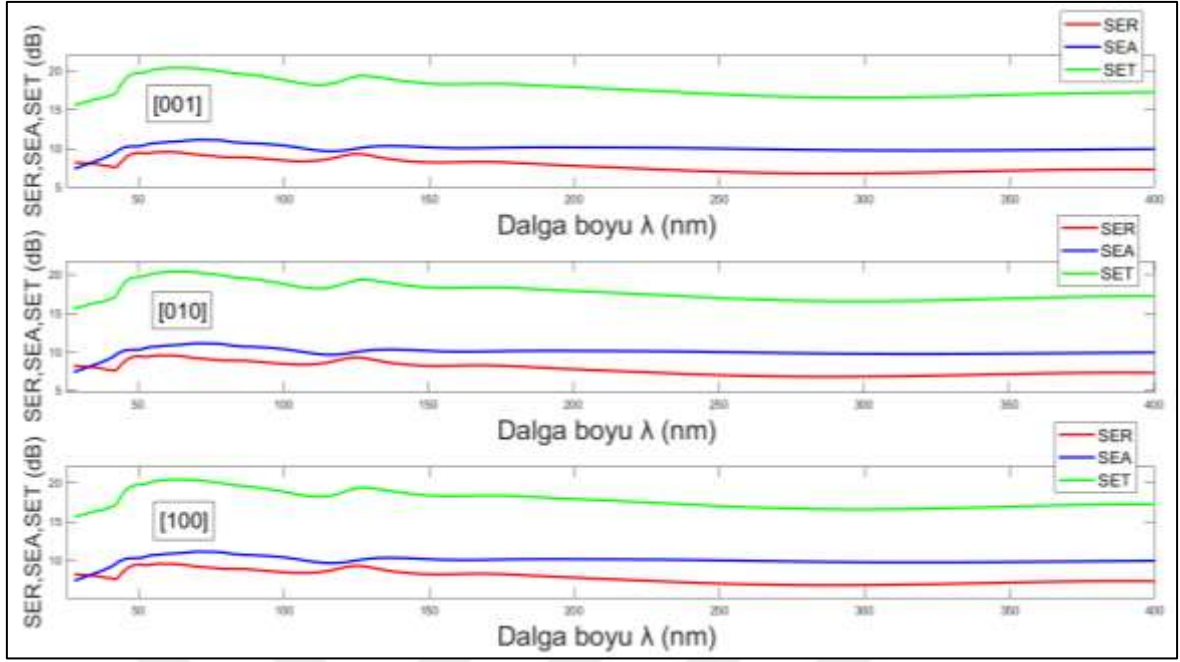
5.3 ELEKTROMANYETİK KALKANLAMA PERFORMANSI (SE)

Elektromanyetik dalgaın 2D, tek katmanlı yapıya sahip $FeB(1)$, $FeB(2)$, $Fe_2B(1)$, $Fe_2B(2)$ malzemeleri üzerine Miller indeksleri ile belirlenen [001], [001], [100] yüzey perspektiflerinden foton polarizasyonu şeklinde etki ettiği durumlardaki kalkanlama performansı incelenmiştir. Bu dört malzemenin göstermiş oldukları soğurmadan kaynaklanan kalkanlama (SE_A), yansımadan kaynaklanan kalkanlama (SE_R) ve bunların toplamı olan toplam kalkanlama performansları (SE_T) bölgesel olarak ayrı ayrı incelenmiştir. Çoklu iç yansımaların neden olduğu kalkanlama etkisinin (SE_M) değeri çok küçük olduğu için tez kapsamında ihmal edilmiştir. Kalkanlama etkililiğinin birimi desibel (dB) dir.

5.3.1 $FeB(1)$ 'in Elektromanyetik Kalkanlama Performansı

5.3.1.1 $FeB(1)$ 'in ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı

Şekil 5.25'de $FeB(1)$ 'in ultraviyole (27,273-399,652 nm) bölgede ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.25: FeB(1)'in Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.25’de görüldüğü üzere FeB(1) ultraviyole bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(1) kalkanlama performansını 27,873 nm üzerindeki dalga boylarında göstermeye başlamıştır. Malzeme 50 nm ye kadar olan dalga boylarında (NUV bölgesi içerisinde), soğurma performansının etkisi ile artan şekilde, daha sonra ise giderek azalan kalkanlama performansı sergilemiştir.

Tablo 5.1: FeB(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(1) UV Spektrum										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	27,873 nm	7,370	7,370	7,370	8,195	8,194	8,195	15,564	15,565	15,565
Bitiş	399,652nm	9,927	9,931	9,931	7,292	7,295	7,295	17,219	17,226	17,226

Tablo 5.1’de FeB(1)’in ultraviyole bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri %0.5 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

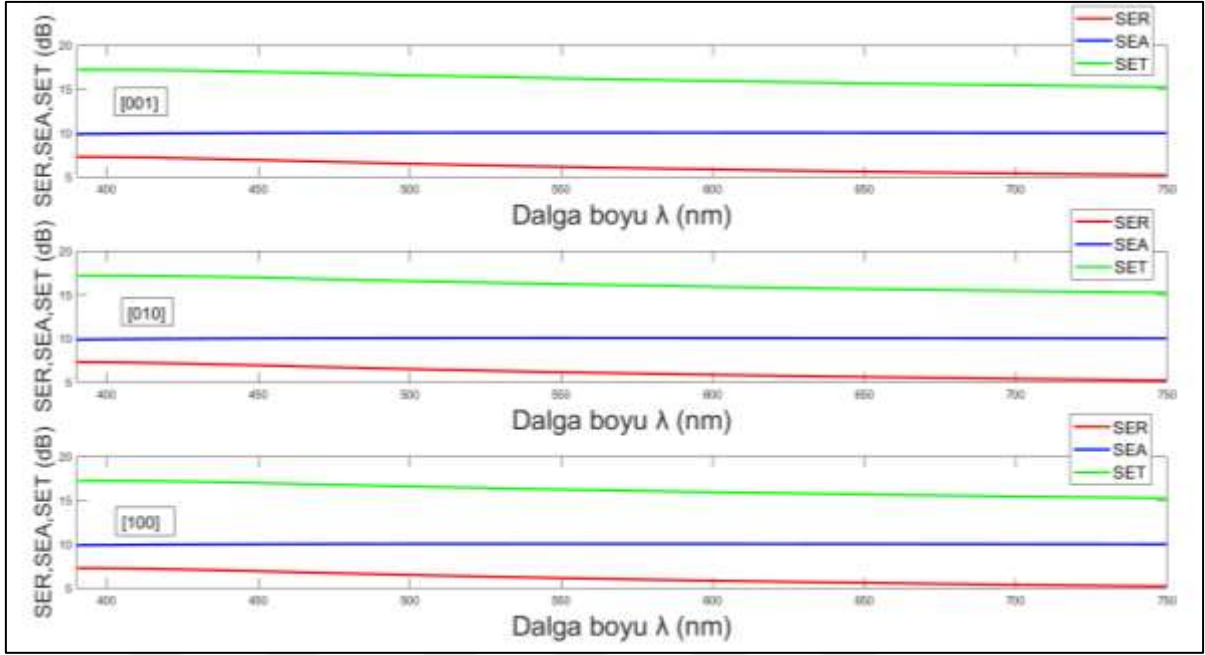
Tablo 5.2: FeB(1)'in Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

FeB(1) UV Spektrum						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	7,369	11,109	6,780	9,539	15,564	20,394
[010]	7,370	11,110	2,168	9,540	12,142	20,395
[100]	7,370	11,110	2,167	9,540	12,142	20,395

FeB(1)'in ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri dB cinsinden [001], [010] , [100] polarizasyon durumları için Tablo 5.2'de gösterilmiştir. Buna göre FeB(1) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 20,395 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.1.2 FeB(1)'in görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.26'da FeB(1)'in görünür ışık (391,235-748,579 nm) bölgesinde ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.26: FeB(1)'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.26'da görüldüğü üzere FeB(1) görünür bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(1) için SE_A performansı bu bölgede annamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkililiğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü %11,32 kadardır.

Tablo 5.3: FeB(1)'in Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(1) Görünür bölge										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	391,235 nm	9,902	9,907	9,907	7,306	7,311	7,311	17,209	17,218	17,218
Bitiş	748,579 nm	10,021	10,027	10,027	5,240	5,236	5,236	15,261	15,263	15,263

Tablo 5.3'de FeB(1)'in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri %0.05 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

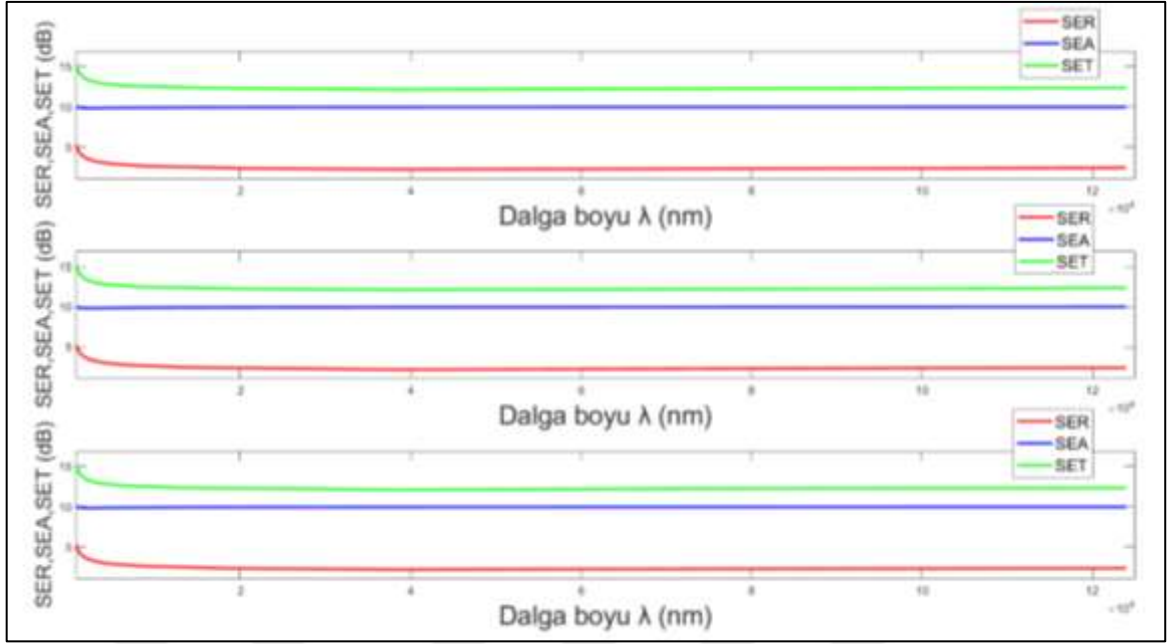
Tablo 5.4: FeB(1)'in Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

FeB(1) Görünür Bölge						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	9,903	10,063	5,240	7,306	15,261	17,219
[010]	9,906	10,071	5,236	7,311	15,263	17,226
[100]	9,906	10,071	5,536	7,311	15,263	17,226

FeB(1)'in görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.4'de gösterilmiştir. Buna göre FeB(1) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 17,226 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.1.3 FeB(1)'in kızılötesi (IR) bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.26'de FeB(1)'in kızılötesi (IR) (758,771-123980 nm) spektrumunda ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.27: FeB(1)'in Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.27'de görüldüğü üzere FeB(1) kızıl ötesi bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(1) için SE_A performansı bu bölgede anlamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkinliğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü özellikle [010] ve [100] polarizasyon durumu için %18,75 düzeyindedir.

Tablo 5.5: FeB(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(1) IR Spektrum										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	758,771nm	10,017	10,024	10,024	5,206	5,201	5,201	15,223	15,225	15,225
Bitiş	123980 nm	9,998	9,998	9,998	2,422	2,372	2,372	12,420	12,370	12,370

Tablo 5.5'de FeB(1)'in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkinliğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber,

[010] ve [100] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktasına göre %18.75 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

FeB(1)'in kızılötesi (IR) bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.6'da gösterilmiştir.

Tablo 5.6: FeB(1)'in Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

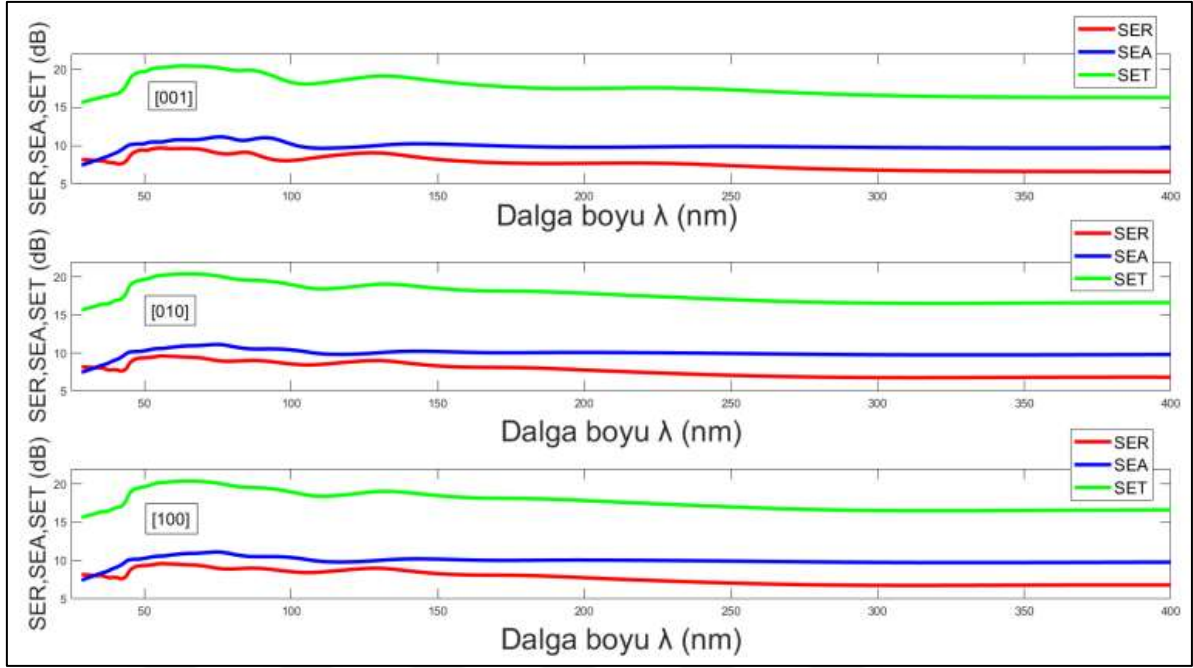
FeB(1) IR Spektrum						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	9,903	10,063	5,240	7,306	15,261	17,219
[010]	9,852	10,024	2,168	5,201	12,143	15,225
[100]	9,852	10,024	2,168	5,201	12,143	15,225

FeB(1)'in kızıl ötesi bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.6'de gösterilmiştir. Buna göre FeB(1) soğurmada kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımada kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 17,219 dB olacak şekilde [001] polarizasyon durumunda göstermiştir.

5.3.2 FeB(2)'nin Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı

5.3.2.1 FeB(2)'nin ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı

Şekil 5.28'de FeB(2)'nin ultraviyole (28,552-397,936 nm) bölgede ki yansımada kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmada kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.28: FeB(2)'nin Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.28'de görüldüğü üzere FeB(2) ultraviyole bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(2) kalkanlama performansını 28,552 nm üzerindeki dalga boylarında göstermeye başlamıştır. Malzeme 50 nm ye kadar olan dalga boylarında (NUV bölgesi içerisinde), soğurma performansının etkisi ile artan şekilde, daha sonra ise giderek azalan kalkanlama performansı sergilemiştir.

Tablo 5.7: FeB(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(2) UV Spektrum										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	28,552 nm	7,438	7,453	7,453	8,193	8,187	8,187	15,633	15,640	15,640
Bitiş	397,936 nm	9,701	9,799	9,799	6,601	6,827	6,827	16,302	16,625	16,625

Tablo 5.7'de FeB(2)'nin ultraviyole bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri %1.98 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

FeB(2)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.8'de gösterilmiştir.

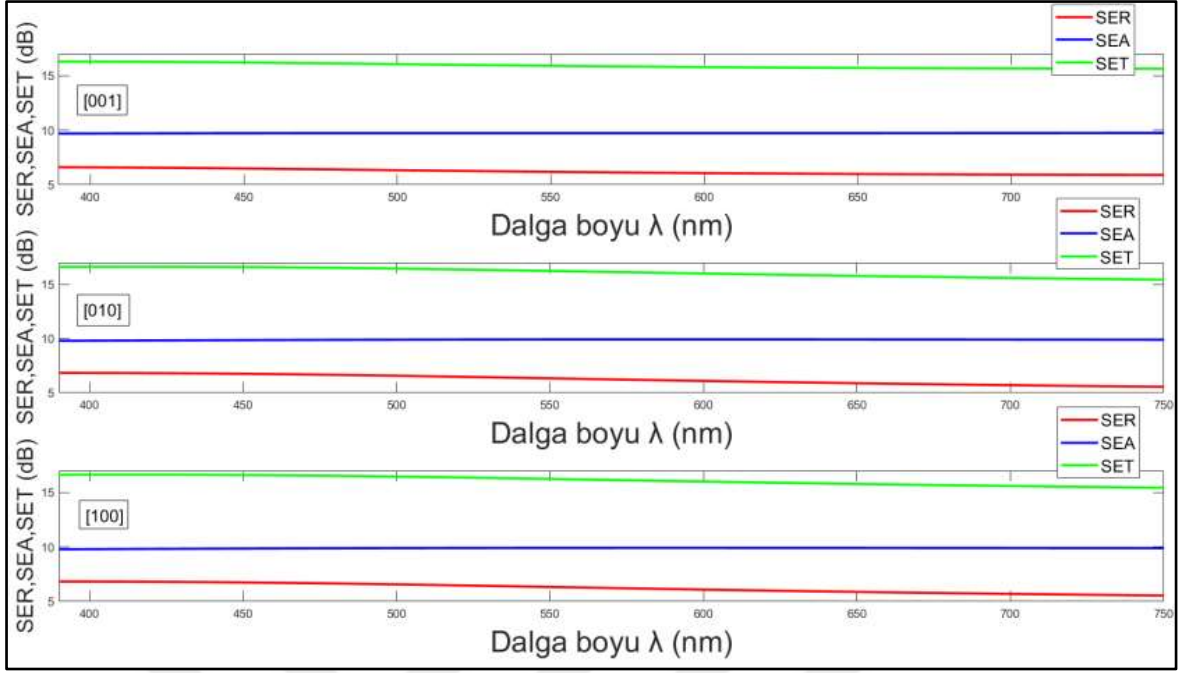
Tablo 5.8: FeB(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

FeB(2) UV Spektrum						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	7,438	11,146	6,601	9,697	15,631	20,404
[010]	7,453	11,120	6,766	9,616	15,640	20,395
[100]	7,453	11,120	6,766	9,616	15,640	20,395

FeB(2)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri dB cinsinden [001], [010], [100] polarizasyon durumları için Tablo 5.8'de gösterilmiştir. Buna göre FeB(2) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 20,404 dB olacak şekilde [001] polarizasyon durumunda göstermiştir.

5.3.2.2 FeB(2)'in görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.29'da FeB(2)'nin görünür ışık (392,465-746,636 nm) bölgesinde ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.29: FeB(2)'nin Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.29'da görüldüğü üzere FeB(2) görünür bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(2) için SE_A performansı bu bölgede anlamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkinliğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü %7,09 kadardır.

Tablo 5.9: FeB(2)'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(2) Görünür Bölge										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	392,465 nm	9,698	9,793	9,793	6,608	6,828	6,828	16,306	16,621	16,621
Bitiş	746,636 nm	9,752	9,892	9,892	5,900	5,551	5,551	15,652	15,443	15,443

Tablo 5.9'de FeB(2)'nin görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkinliğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki bitiş bölgesi performans değeri %1.93 düzeyinde daha yüksek çıkmıştır.

FeB(2)'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.10'da gösterilmiştir.

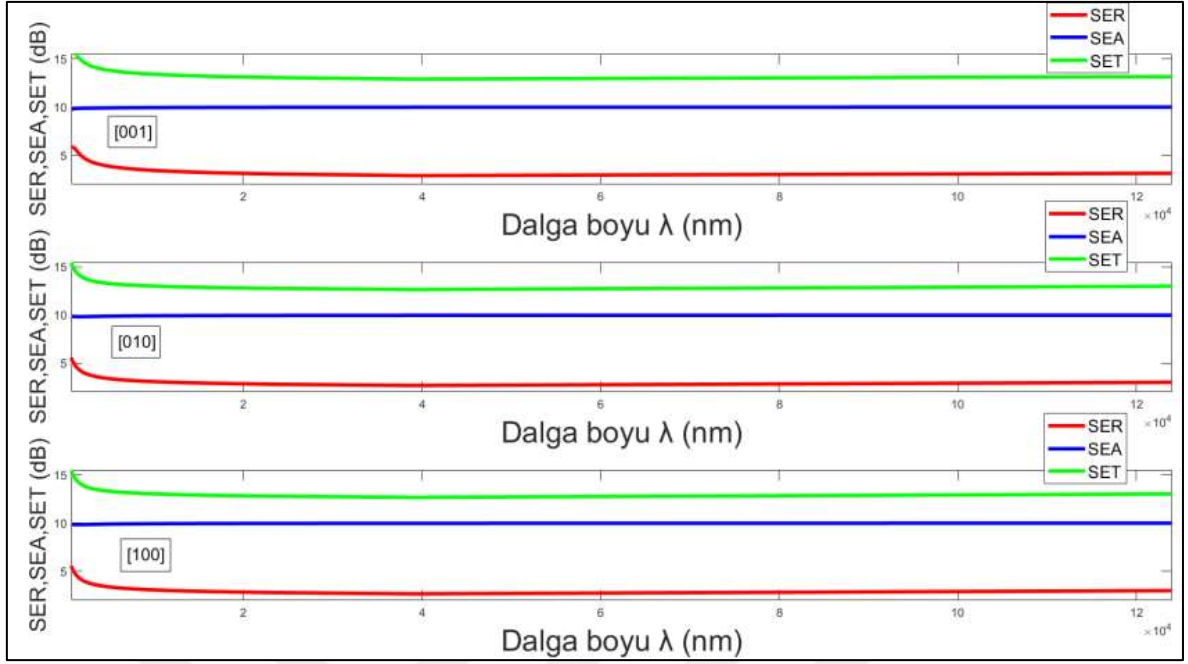
Tablo 5.10: FeB(2)'nin Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük Ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

FeB(2) Görünür Bölge						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	9,698	9,752	5,900	6,608	15,652	16,306
[010]	9,793	9,917	5,551	6,828	15,443	16,631
[100]	9,793	9,917	5,551	6,828	15,443	16,631

FeB(2)'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.10'da gösterilmiştir. Buna göre FeB(2) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 16,631 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.2.3 FeB(2)'nin kızılötesi (IR) bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.30'da FeB(2)'nin kızılötesi (IR) (756,530-123980 nm) spektrumunda ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.30: FeB(2)'nin Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.30'da görüldüğü üzere FeB(2) kızıl ötesi bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. FeB(2) için SE_A performansı bu bölgede annamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkinliğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü özellikle [001] polarizasyon durumu için %15,94 düzeyindedir.

Tablo 5.11: FeB(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

FeB(2) IR Spektrum										
	dB	SEA [001]	SEA [010]	SEA [100]	SER [001]	SER [010]	SER [100]	SET [001]	SET [010]	SET [100]
Başlangıç	756,530 nm	9,754	9,890	9,890	5,895	5,523	5,523	15,650	15,413	15,413
Bitiş	123980 nm	9,998	9,999	9,999	3,156	3,014	3,014	13,154	13,012	13,012

Tablo 5.11'de FeB(2)'nin görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkinliğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber,

[001] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktasına göre %15.94 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

FeB(2)'nin kızılötesi (IR) bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.12'de gösterilmiştir.

Tablo 5.12: FeB(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük Ve En Yüksek SE_A , SE_R , SE_T Performansları.

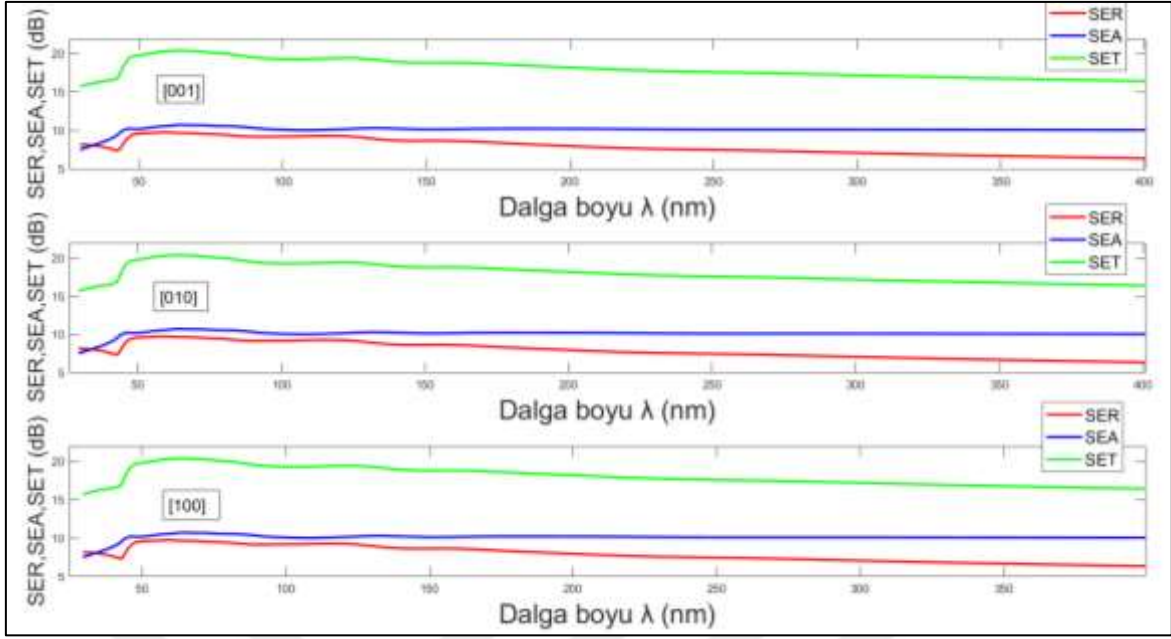
FeB(2) IR Spektrum						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	9,754	9,998	2,908	5,895	12,891	15,650
[010]	9,841	9,999	2,681	5,523	12,661	15,413
[100]	9,841	9,999	2,681	5,523	12,661	15,413

FeB(2)'nin kızıl ötesi bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.12'de gösterilmiştir. Buna göre FeB(1) soğurmada kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımada kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 15,650 dB olacak şekilde [001] polarizasyon durumunda göstermiştir.

5.3.3 Fe₂B(1)'in Elektromanyetik Kalkanlama Performansı

5.3.3.1 Fe₂B(1)'in ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı

Şekil 5.31'de Fe₂B(1)'in ultraviyole (29,388-398,451 nm) bölgede ki yansımada kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmada kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.31: Fe₂B(1)'nin Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.31'de görüldüğü üzere Fe₂B(1) ultraviyole bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. Fe₂B(1) kalkanlama performansını 29,388 nm üzerindeki dalga boylarında göstermeye başlamıştır. Malzeme 50 nm ye kadar olan dalga boylarında (NUV bölgesi içerisinde), soğurma performansının etkisi ile artan şekilde, daha sonra ise giderek azalan kalkanlama performansı sergilemiştir.

Tablo 5.13: Fe₂B(1)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

Fe ₂ B(1) UV Spektrum										
	dB	SE _A [001]	SE _A [010]	SE _A [100]	SE _R [001]	SE _R [010]	SE _R [100]	SE _T [001]	SE _T [010]	SE _T [100]
Başlangıç	29,388nm	7,520	7,523	7,523	8,189	8,188	8,188	15,710	15,711	15,711
Bitiş	398,451nm	10,052	10,063	10,063	6,369	6,365	6,365	16,421	16,428	16,428

Tablo 5.13'de Fe₂B(1)'in ultraviyole bölgedeki SE_A, SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri %0.43 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

Fe₂B(1)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.14'de gösterilmiştir.

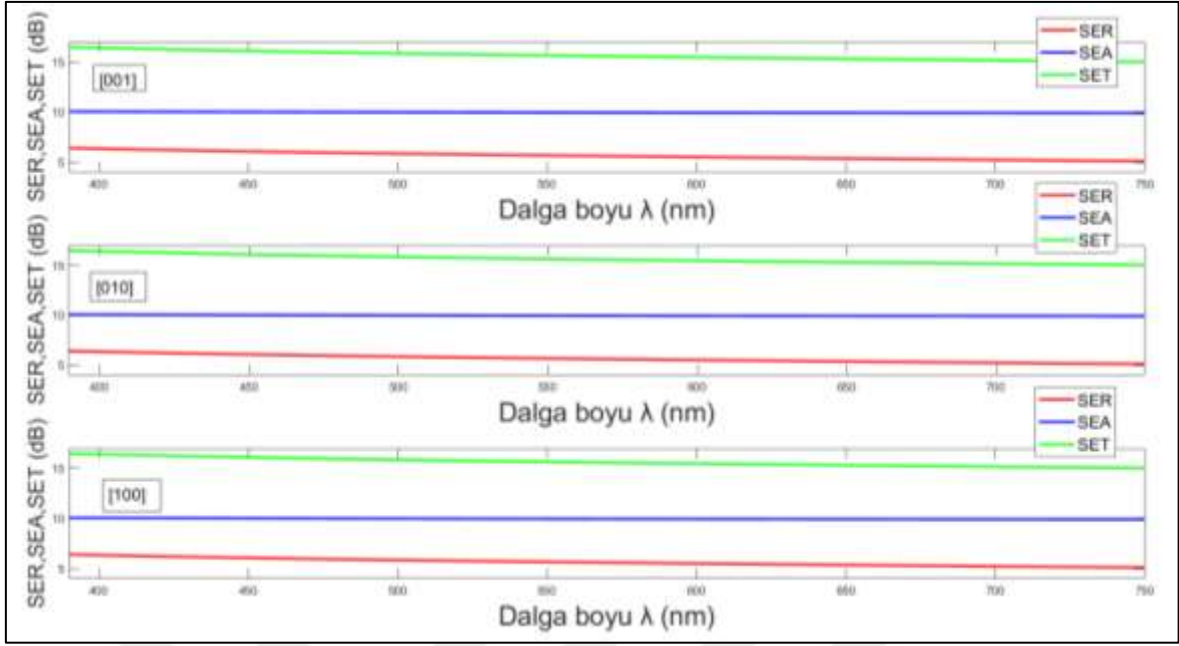
Tablo 5.14: Fe₂B(1)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

Fe ₂ B(1) UV Spektrum						
dB	Min. SE _A	Max. SE _A	Min. SE _R	Max. SE _R	Min. SE _T	Max. SE _T
[001]	7,520	10,727	6,369	9,751	15,710	20,400
[010]	7,523	10,729	6,365	9,750	15,711	20,400
[100]	7,523	10,729	6,365	9,750	15,711	20,400

Fe₂B(1)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri dB cinsinden [001], [010] , [100] polarizasyon durumları için Tablo 5.2'de gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(1) soğurmada kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımada kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğinin en yüksek değerini 20,400 dB olacak şekilde [001], [010], [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.3.2 Fe₂B(1)'in görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.32'de Fe₂B(1)'in görünür ışık (390,507-748,799 nm) bölgesinde ki yansımada kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmada kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.32: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'nin Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.32'de görüldüğü üzere $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ görünür bölgede $\text{SE}_A > \text{SE}_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için SE_A performansı bu bölgede annamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkinliğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü %8,75 kadardır.

Tablo 5.15: $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'nin Görünür Işık Bölgesindeki Kalkanlama Performans Aralığı.

$\text{Fe}_2\text{B}(1)$ Görünür Bölge										
	dB	SE_A	SE_A	SE_A	SE_R	SE_R	SE_R	SE_T	SE_T	SE_T
		[001]	[010]	[100]	[001]	[010]	[100]	[001]	[010]	[100]
Başlangıç	390,507nm	10,057	10,068	10,068	6,419	6,414	6,414	16,476	16,482	16,482
Bitiş	748,799nm	9,911	9,924	9,923	5,111	5,116	5,552	15,022	15,040	15,040

Tablo 5.15'de $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkinliğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktına göre %0.11 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

$\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A , SE_R , SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.16'da gösterilmiştir.

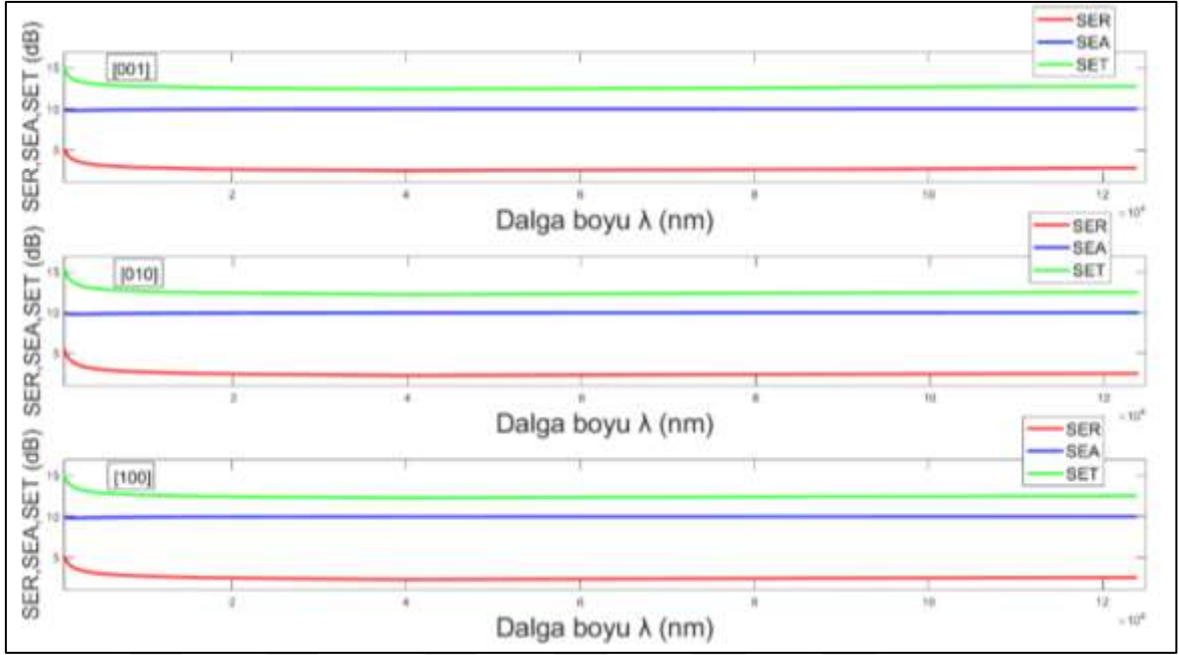
Tablo 5.16: Fe₂B(1)'nin Görünür Işık Bölgesindeki En Düşük ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

Fe ₂ B(1) Görünür Bölge						
dB	Min. SE _A	Max. SE _A	Min. SE _R	Max. SE _R	Min. SE _T	Max. SE _T
[001]	9,911	10,057	5,111	6,419	15,022	16,476
[010]	9,924	10,068	5,116	6,415	15,040	16,483
[100]	9,924	10,068	5,116	6,415	15,040	16,483

Fe₂B(1)'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.16'da gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(1) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 16,483 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.3.3 Fe₂B(1)'in kızılötesi (IR) bölgedeki kalkanlama performansı

Şekil 5.33'de Fe₂B(1)'in kızılötesi (IR) (758,464-123980 nm) spektrumunda ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.33: Fe₂B(1)'Nin Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.33'de görüldüğü üzere Fe₂B(1) kızıl ötesi bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. Fe₂B(1) için SE_A performansı bu bölgede annamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkililiğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü özellikle [010] polarizasyon durumu için %16,46 düzeyindedir.

Tablo 5.17: Fe₂B(1)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

Fe ₂ B(1) IR Spektrum										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	758,464 nm	9,909	9,922	9,921	5,087	5,093	5,093	14,996	15,015	15,014
Bitiş	123980 nm	9,998	9,998	9,998	2,760	2,545	2,551	12,759	12,543	12,550

Tablo 5.17'de Fe₂B(1)'in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber, [010] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktasına göre %16.46 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

Fe₂B(1)'nin kızılötesi (IR) bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.18'de gösterilmiştir.

Tablo 5.18: Fe₂B(1)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

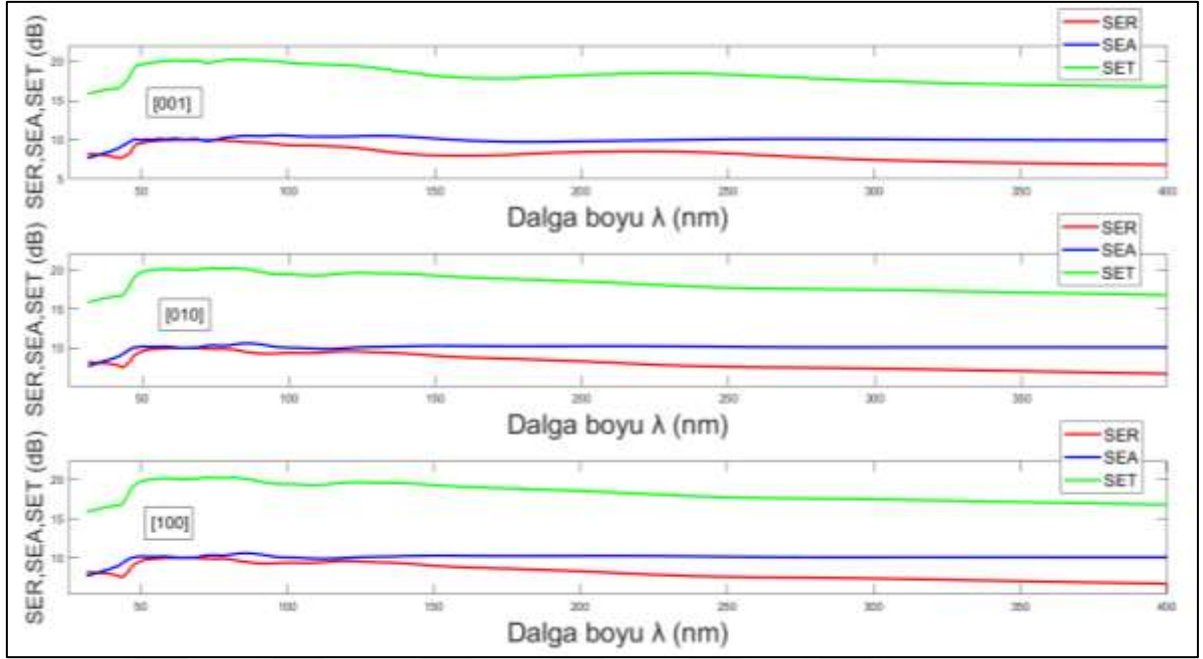
Fe ₂ B(1) IR Spektrum						
dB	Min.SE _A	Max. SE _A	Min.SE _R	Max. SE _R	Min.SE _T	Max. SE _T
[001]	9,825	9,998	2,447	5,087	12,425	14,996
[010]	9,841	9,998	2,299	5,093	12,276	15,015
[100]	9,840	9,998	2,304	5,093	12,280	15,014

Fe₂B(1)'nin kızıl ötesi bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.18'de gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(1) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 15,015 dB olacak şekilde [010] polarizasyon durumunda göstermiştir.

5.3.4 Fe₂B(2)'in Elektromanyetik Kalkanlama Persormansı

5.3.4.1 Fe₂B(2)'in ultraviyole (UV) bölgedeki kalkanlama performansı

Şekil 5.34'de Fe₂B(2)'in ultraviyole (31,557-398,082 nm) bölgede ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.34: Fe₂B(2)'nin Ultraviyole Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.34'de görüldüğü üzere Fe₂B(2) ultraviyole bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. Fe₂B(2) kalkanlama performansını 31,557 nm üzerindeki dalga boylarında göstermeye başlamıştır. Malzeme 50 nm ye kadar olan dalga boylarında (NUV bölgesi içerisinde), soğurma performansının etkisi ile artan şekilde, daha sonra ise giderek azalan kalkanlama performansı sergilemiştir.

Tablo 5.19: Fe₂B(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

Fe ₂ B(2) UV Spektrum										
	dB	SE _A [001]	SE _A [010]	SE _A [100]	SE _R [001]	SE _R [010]	SE _R [100]	SE _T [001]	SE _T [010]	SE _T [100]
Başlangıç	31,557 nm	7,667	7,692	7,692	8,199	8,189	8,189	15,866	15,881	15,881
Bitiş	398,082 nm	9,942	10,088	10,088	6,832	6,713	6,713	16,775	16,801	16,801

Tablo 5.19'da Fe₂B(2)'nin ultraviyole bölgedeki SE_A, SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki kalkanlama performansları aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri %0.15 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

Fe₂B(2)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.20'de gösterilmiştir.

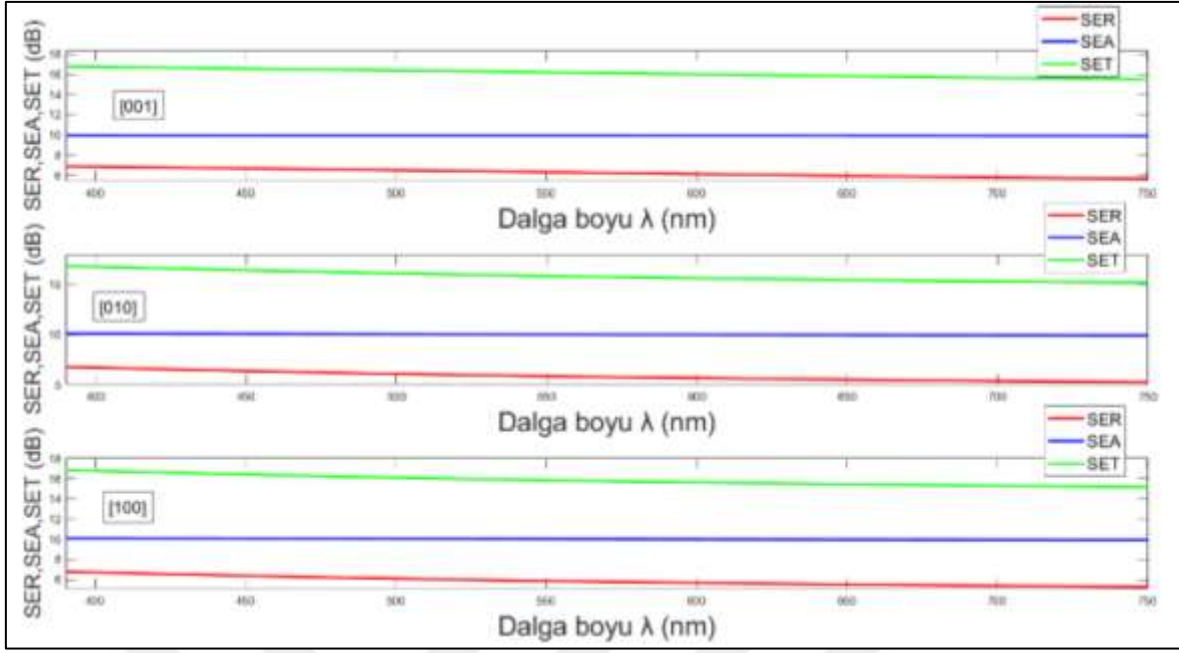
Tablo 5.20: Fe₂B(2)'nin Ultraviyole (UV) Bölgedeki En Düşük Ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

Fe ₂ B(2) UV Spektrum						
dB	Min. SE _A	Max. SE _A	Min. SE _R	Max. SE _R	Min. SE _T	Max. SE _T
[001]	7,667	10,565	6,832	9,999	15,866	20,239
[010]	7,692	10,601	6,713	9,999	15,881	20,243
[100]	7,692	10,601	6,713	9,999	15,881	20,243

Fe₂B(2)'nin ultraviyole bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri dB cinsinden [001], [010], [100] polarizasyon durumları için Tablo 5.20'de gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(2) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 20,243 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.4.2 Fe₂B(2)'nin görünür ışık bölgesindeki kalkanlama performansı

Şekil 5.35'de Fe₂B(2)'nin görünür ışık (390,688-746,661 nm) bölgesinde ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.35: $Fe_2B(2)$ 'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.35’de görüldüğü üzere $Fe_2B(2)$ görünür bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. $Fe_2B(2)$ için SE_A performansı bu bölgede annamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkililiğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü %9,86 kadardır.

Tablo 5.21: $Fe_2B(2)$ 'nin Görünür Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

$Fe_2B(2)$ Görünür Bölge										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	390,688 nm	9,947	10,089	10,089	6,856	6,763	6,763	16,806	16,852	16,852
Bitiş	746,661 nm	9,889	9,932	9,932	5,640	5,258	5,258	15,230	15,190	15,190

Tablo 5.21’de $Fe_2B(2)$ ’in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkililiğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber, [001] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktına göre %0.27 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

Fe₂B(2)'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.22'de gösterilmiştir.

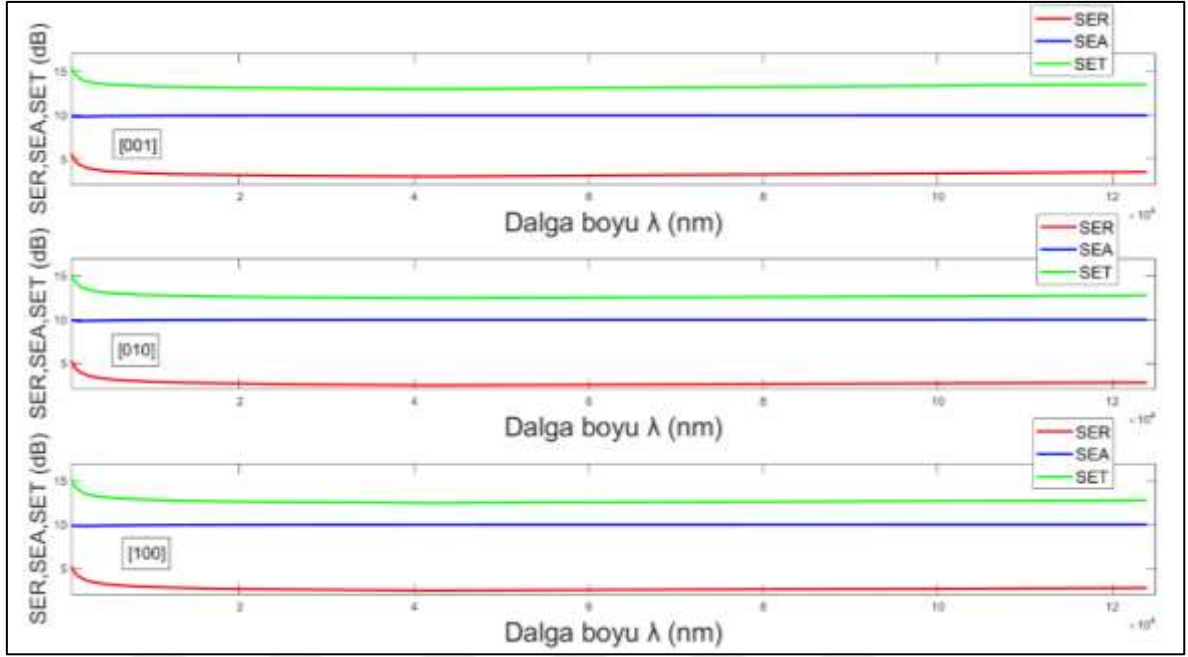
Tablo 5.22: Fe₂B(2)'nin Görünür Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

Fe₂B(2) Görünür Bölge						
dB	Min. SE_A	Max. SE_A	Min. SE_R	Max. SE_R	Min. SE_T	Max. SE_T
[001]	9,889	9,947	5,640	6,860	15,530	16,807
[010]	9,932	10,089	5,258	6,763	15,190	16,852
[100]	9,932	10,089	5,258	6,763	15,190	16,852

Fe₂B(2)'nin görünür ışık bölgesindeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.22'de gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(2) soğurmadan kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımadan kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 16,852 dB olacak şekilde [010] ve [100] polarizasyon durumlarında göstermiştir.

5.3.4.3 Fe₂B(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgesindeki Kalkanlama Performansı

Şekil 5.36'da Fe₂B(2)'nin kızılötesi (IR) (755,602-123980 nm) spektrumunda ki yansımadan kaynaklı kalkanlama (SE_R), soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) ve toplam (SE_T) kalkanlama etkililiği fotonun malzemeye [001], [010], [100] perspektiflerinden nüfuziyet durumları için gösterilmiştir.



Şekil 5.36: Fe₂B(2)'nin Kızıl Ötesi Bölgedeki Kalkanlama Etkinliliği.

Şekil 5.36'da görüldüğü üzere Fe₂B(2) kızıl ötesi bölgede $SE_A > SE_R$ olacak şekilde kalkanlama performansı sergileyerek soğurucu tip kalkan özelliği göstermiştir. Fe₂B(2) için SE_A performansı bu bölgede anlamlı bir değişiklik göstermezken, SE_R performansı azalma eğilimindedir. Bu etki toplam kalkanlama etkinliğinin (SE_T) görünür bölgenin daha uzak dalga boylarında performans kaybına neden olmuştur. Başlangıç ve bitiş arasındaki SE_T düşüşü özellikle [010] ve [100] polarizasyon durumu için %15,77 düzeyindedir.

Tablo 5.23: Fe₂B(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki Kalkanlama Performans Aralığı.

Fe ₂ B(2) IR Spektrum										
	dB	SE_A [001]	SE_A [010]	SE_A [100]	SE_R [001]	SE_R [010]	SE_R [100]	SE_T [001]	SE_T [010]	SE_T [100]
Başlangıç	755,602 nm	9,887	9,930	9,930	5,617	5,237	5,237	15,504	15,167	15,167
Bitiş	123980 nm	9,999	9,998	9,998	3,512	2,776	2,776	13,512	12,774	12,774

Tablo 5.23'de Fe₂B(2)'in görünür bölgedeki SE_A , SE_R ve SE_T kalkanlama etkinliğinin başlangıç ve bitiş değerleri dB cinsinden gösterilmiştir. Buna göre [010] ve [100] polarizasyon durumlarındaki toplam kalkanlama performansları (SE_T) aynı olmakla beraber, [010] ve [100] polarizasyon durumundaki performans değeri bitiş noktasına göre %15,77 düzeyinde daha düşük çıkmıştır.

Fe₂B(2)'nin kızılötesi (IR) bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.24'de gösterilmiştir.

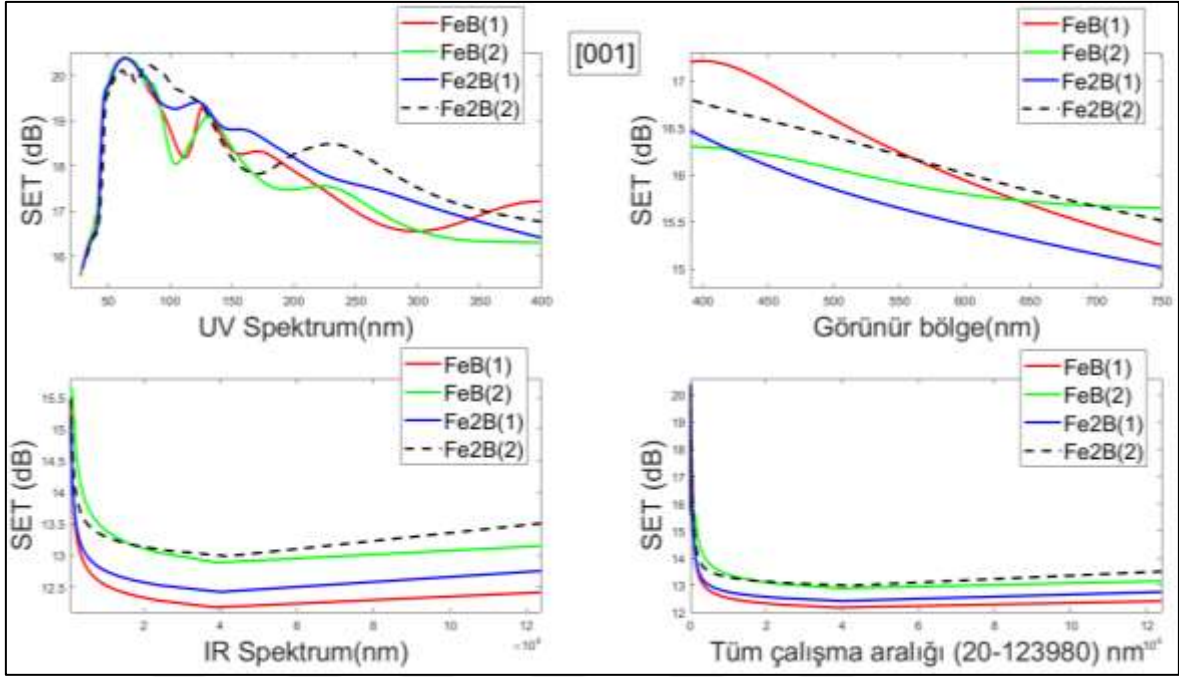
Tablo 5.24: Fe₂B(2)'nin Kızılötesi (IR) Bölgedeki En Düşük ve En Yüksek SE_A, SE_R, SE_T Performansları.

Fe ₂ B(2) IR Spektrum						
dB	Min. SE _A	Max. SE _A	Min. SE _R	Max. SE _R	Min. SE _T	Max. SE _T
[001]	9,827	9,999	3,001	5,617	12,991	15,504
[010]	9,842	9,998	2,467	5,237	12,447	15,167
[100]	9,842	9,9168	2,467	5,237	12,447	15,167

Fe₂B(2)'nin kızıl ötesi bölgedeki en düşük ve en yüksek SE_A, SE_R, SE_T performans değerleri (dB) [001], [010], [100] durumları için Tablo 5.24'de gösterilmiştir. Buna göre Fe₂B(2) soğurmada kaynaklı kalkanlama etkililiği (SE_A), yansımada kaynaklı kalkanlama etkililiğinden (SE_R) daha büyük olacak şekilde toplam kalkanlama etkililiğini en yüksek değerini 15,504 dB olacak şekilde [001] polarizasyon durumunda göstermiştir.

5.3.5 FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) İçin [001] Perspektif Yüzeyindeki SE_T Performanslarının Karşılaştırılması

Şekil 5.37'de elektromanyetik radyasyonun FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [001] ile belirtilen perspektif yüzeyine etki ettiği durumda malzemelerin ultraviyole bölge, görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölge ve malzemelerin tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) dört malzeme için bölgesel olarak karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir.



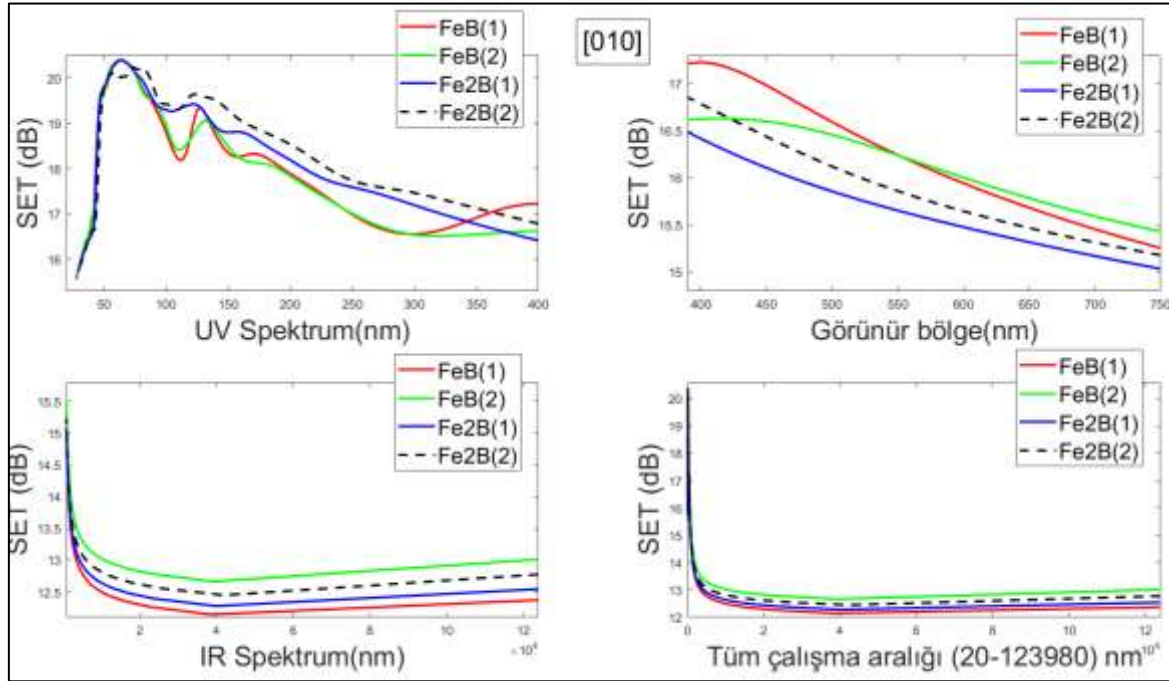
Şekil 5.37: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [001] İçin Toplam Kalkanlama Performansı.

Şekil 5.37’de görüldüğü üzere; [001] polarizasyon durumu için FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2)’nin toplam kalkanlama performansları ultraviyole bölge, görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölgede birbirine benzer davranışlar sergilemişlerdir. 4 malzeme de kalkanlama performanslarını göstermeye başladıkları enerji seviyesinden itibaren ~50 nm düzeyine kadar ciddi bir SE_T performans artışı göstermişlerdir. 50 nm’den daha yüksek dalga boyları için SE_T performansları kızıl ötesi bölgenin başlangıcında kapsayacak şekilde dramatik şekilde düşmeye devam etmiş ve kararsız bir performans sergilemişlerdir. Dalga boyunun 1 μ m’den daha büyük değere almaya başladığı enerji seviyelerinde (>1.25 eV) kalkanlama davranışları belirgin bir şekilde kararlılık göstermesine rağmen azalmaya devam etmiştir. 4 malzemenin tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için [001] polarizasyon durumu için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) göz önüne alındığında uzak dalga boylarında en üstün performansı Fe₂B(2)’nin sergilediği görülmüştür.

5.3.6 FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) İçin [010] Perspektif Yüzeyindeki SE_T Performanslarının Karşılaştırılması

Şekil 5.38’de elektromanyetik radyasyonun FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)’nin [010] ile belirtilen perspektif yüzeyine etki ettiği durumda malzemelerin ultraviyole bölge,

görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölge ve malzemelerin tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) dört malzeme için bölgesel olarak karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir.

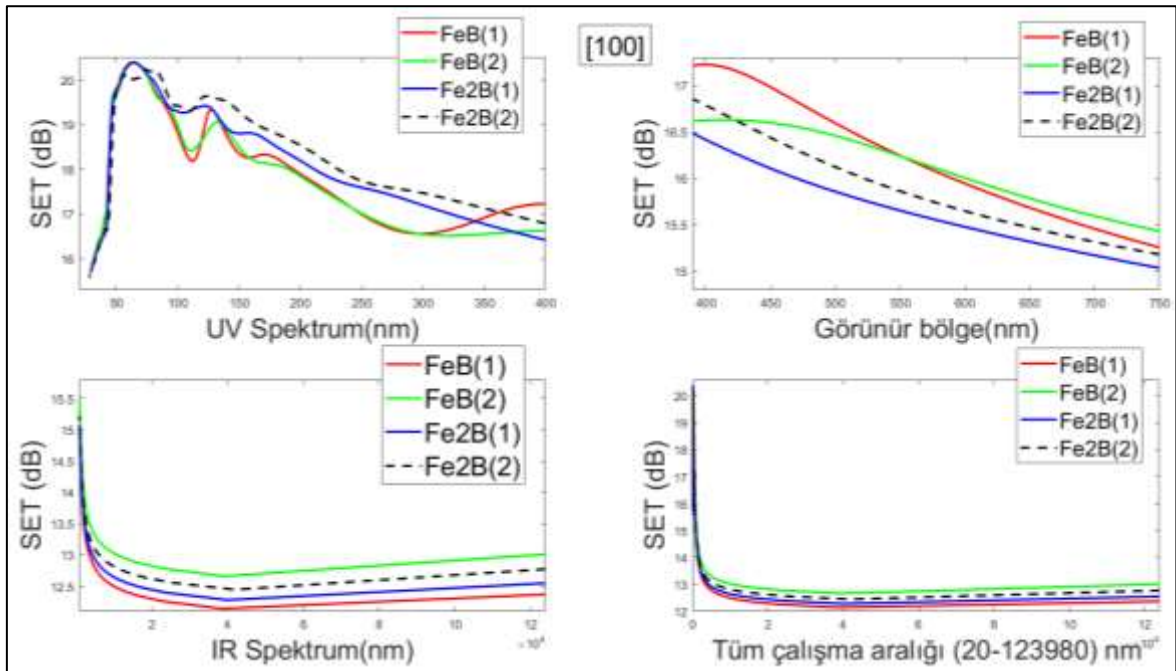


Şekil 5.38: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [010] İçin Toplam Kalkanlama Performansı.

Şekil 5.38'de görüldüğü üzere; [010] polarizasyon durumu için FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2)'nin toplam kalkanlama performansları ultraviyole bölge, görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölgede birbirine benzer davranışlar sergilemişlerdir. 4 malzeme de kalkanlama performanslarını göstermeye başladıkları enerji seviyesinden itibaren ~50 nm düzeyine kadar ciddi bir SE_T performans artışı göstermişlerdir. 50 nm'den daha yüksek dalga boyları için SE_T performansları kızıl ötesi bölgenin başlangıcında kapsayacak şekilde dramatik şekilde düşmeye devam etmiş ve kararsız bir performans sergilemişlerdir. Dalga boyunun 1 μ m'den daha büyük değer almaya başladığı enerji seviyelerinde (>1.25 eV) kalkanlama davranışları belirgin bir şekilde kararlılık göstermesine rağmen azalmaya devam etmiştir. 4 malzemeninde tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için [010] polarizasyon durumu için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) göz önüne alındığında uzak dalga boylarında en üstün performansı FeB(2)'nin sergilediği görülmüştür.

5.3.7 FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) İçin [100] Perspektif Yüzeyindeki SE_T Performanslarının Karşılaştırılması

Şekil 5.39’da elektromanyetik radyasyonun FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)’nin [100] ile belirtilen perspektif yüzeyine etki ettiği durumda malzemelerin ultraviyole bölge, görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölge ve malzemelerin tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) dört malzeme için bölgesel olarak karşılaştırmalı olarak gösterilmiştir.



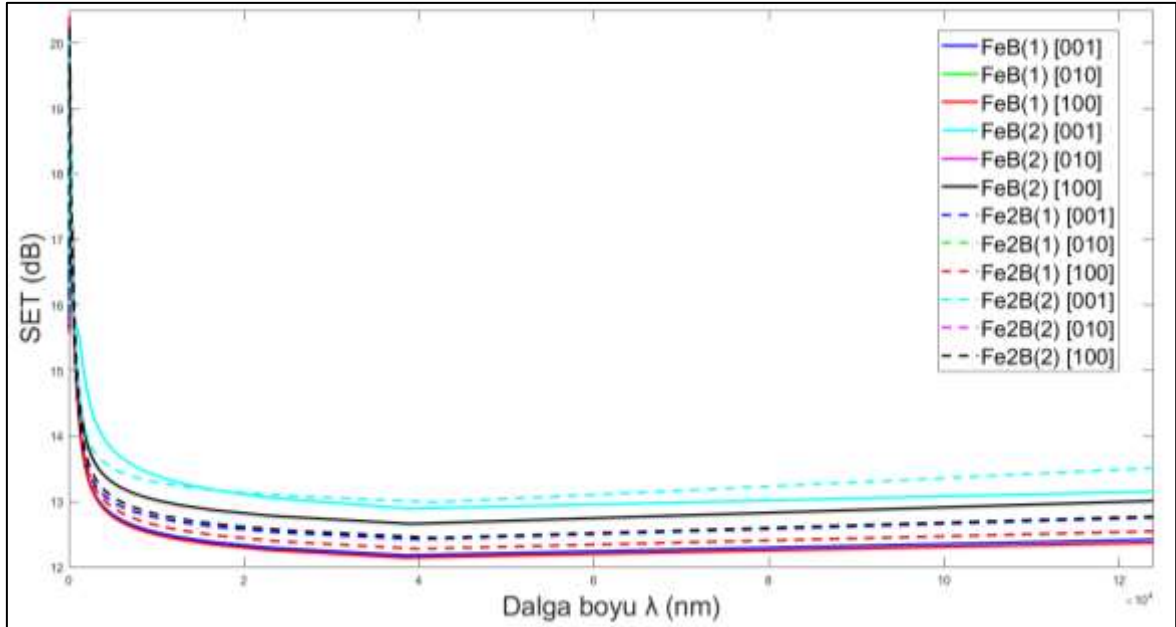
Şekil 5.39: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)’nin [100] İçin Toplam Kalkanlama Performansı.

Şekil 5.39’da görüldüğü üzere; [100] polarizasyon durumu için FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2)’nin toplam kalkanlama performansları ultraviyole bölge, görünür ışık bölgesi, kızılötesi bölgede birbirine benzer davranışlar sergilemişlerdir. 4 malzeme de kalkanlama performanslarını göstermeye başladıkları enerji seviyesinden itibaren ~50 nm düzeyine kadar ciddi bir SE_T performans artışı göstermişlerdir. 50 nm’den daha yüksek dalga boyları için SE_T performansları kızıl ötesi bölgenin başlangıcında kapsayacak şekilde dramatik şekilde düşmeye devam etmiş ve kararsız bir performans sergilemişlerdir. Dalga boyunun 1µm’den daha büyük değer almaya başladığı enerji seviyelerinde (>1.25 eV) kalkanlama davranışları belirgin bir şekilde kararlılık göstermesine rağmen azalmaya devam etmiştir. 4

malzemeninde tüm çalışma aralığını kapsayan elektromanyetik spektrum bölgesi (20-123980nm) için [100] polarizasyon durumu için toplam kalkanlama etkililiği (SE_T) göz önüne alındığında uzak dalga boylarında en üstün performansı FeB(2)'nin sergilediği görülmüştür.

5.3.8 FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1), Fe₂B(2) İçin Tüm Durumlardaki SE_T Performanslarının Karşılaştırılması

FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [001], [010], [100] durumları için SE_T performansları malzemelerin en geniş çalışma aralıkları için birbirleri ile karşılaştırılması Şekil 5.40'da gösterilmiştir.



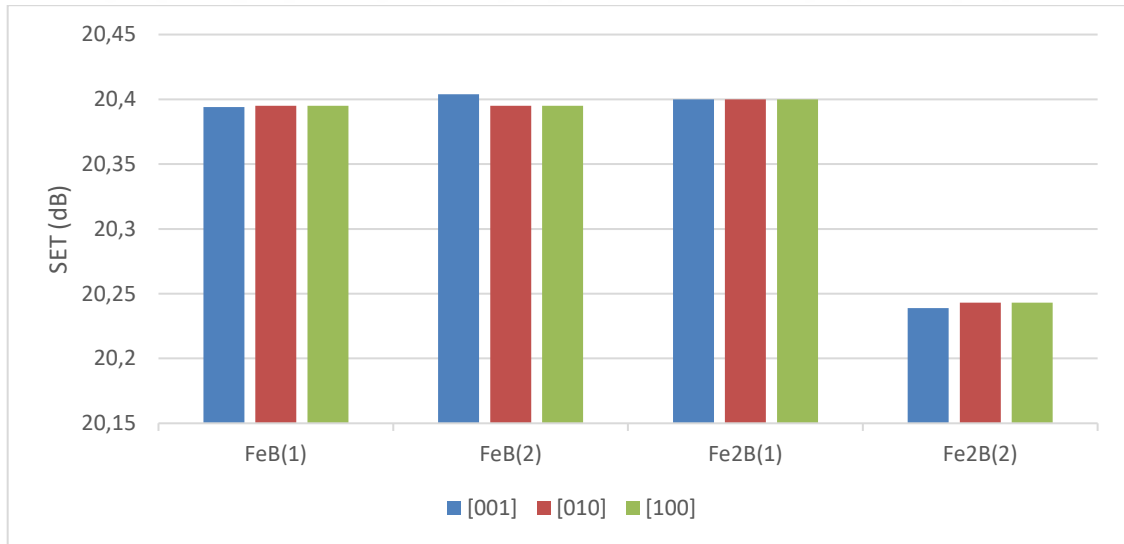
Şekil 5.40: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [001], [010], [100] Durumlarındaki SE_T Performansları.

FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin [001], [010], [100] durumları için maksimum toplam kalkanlama performanslarının değerleri (dB) Tablo 5.25'de gösterilmiştir.

Tablo 5.25: FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2) İçin Maksimum SE_T Değerleri.

	Mak.SE _T (dB)		Mak.SE _T (dB)
FeB(1) [001]	20,394	Fe₂B(1) [001]	20,400
FeB(1)[010]	20,395	Fe₂B(1)[010]	20,400
FeB(1)[100]	20,395	Fe₂B(1)[100]	20,400
FeB(2) [001]	20,404	Fe₂B(2) [001]	20,239
FeB(2)[010]	20,395	Fe₂B(2)[010]	20,243
FeB(2)[100]	20,395	Fe₂B(2)[100]	20,243

Şekil 5.41’de [001], [010], [100] polarizasyon durumlarındaki maksimum SE_T değerleri gösterilmiştir. Buna göre en üstün kalkanlama performansı 20,404 dB değeri ile [001] polarizasyon koşulundaki FeB(2)’ye aittir. Tüm malzemeler en yüksek kalkanlama performanslarını ultraviyole bölgenin başlangıcından itibaren göstermişlerdir.



Şekil 5.41: Polarizasyon Durumlarındaki Maksimum SE_T Değerleri (dB).

6. SONUÇ

Bu tez çalışmasında; uzay grubu $I41/amd$ olan $FeB(1)$, uzay grubu $cmcm$ olan $FeB(2)$, uzay grubu $I4/mcm$ olan $Fe_2B(1)$ ve uzay grubu $P4/mmm$ olan $Fe_2B(2)$ nano parçacıklarda elde edilmiş olan 2D film yapıları kristalize ölgü malzemelerin yapısal, elektronik, manyetik ve optik özellikleri ab-initio yöntemler kullanılarak detaylı şekilde incelenmiş ardından elektromanyetik kalkanlama performansları $[001]$, $[010]$ ve $[100]$ ile belirtilmiş olan polarizasyon koşulları altındaki detaylı şekilde incelenmiştir. Tüm malzemelerin hesaplamaları yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile yapılmış aynı zamanda genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılmıştır. Bu çalışma sonuçlarına göre;

Tetragonal kristal yapıdaki $FeB(1)$ 'in geometri optimizasyonu sonucu elde edilen kafes parametreleri $a=7.761 \text{ \AA}$, $b=7.761 \text{ \AA}$, $c=7.761 \text{ \AA}$; birim hücre açıları ise $\alpha=158.227^\circ$, $\beta=158.227^\circ$, $\gamma=30.984^\circ$ şeklinde bulunmuştur. s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kımı durum yoğunluklar (PDOS) ve TDOS grafikleri $FeB(1)$ 'in orbitallerindeki elektron yoğunluğu hakkında bilgi verdi ve p -d orbital hibritleşmesi olduğunu gösterdi. Elektronik band yapısını incelediğimizde ise iletim ve valans enerji bantlarının yeryer çakışık olduğunu görüldü. Bu bilgiler ışığında $FeB(1)$ yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. $FeB(1)$ için yapılan taban durumu hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi (J_{Fe-Fe}) 0.2 eV bulunmuştur. Birim hacim başına düşen manyetik dipol momentindeki (manyetizasyon) değişim ve p-d orbital hibritleşmesi $FeB(1)$ 'in manyetik davranışının ferrimanyetik (FiM) özellikde olduğunu göstermiştir. Ayrıca $T_c=675K$ olarak bulunmuştur. Dielektrik fonksiyonunun gerçek (ϵ') ve sanal kısımlarının (ϵ'') foton enerjisine göre değişimleri optik özelliklerini aynı zamanda kalkanlama performansını (SE) belirleyen en büyük etken olmuştur. $FeB(1)$ elektromanyetik dalgayı soğurarak kalkanlama karakterinde olduğu için soğurucu tip kalkan görevi görmüştür. $FeB(1)$ film yapılı kristal örgüsü elektromanyeti spektrumdaki 27,273-123980 nm aralığında ki radyasyonu kalkanlama kabiliyeti göstermiştir. En yüksek toplam kalkanlama performansını (SET) ultraviyole bölgede göstermiştir. Daha yüksek enerji seviyelerindeki fotonları kalkanlama kabiliyeti ise sürekli düşmüştür. Maksimum SE_T değeri 20,394929 dB ile 63.083807 nm dalga boyundaki radyasyon için $[100]$ polarizasyon durumunda gerçekleşmiştir. $[001]$, $[010]$, $[100]$ polarizasyon koşullarında kalkanlama davranışları benzerdir ve anlamlı bir fark yoktur.

Ortorombik kristal yapıdaki FeB(2)'nin geometri optimizasyonu sonucu elde edilen kafes parametreleri $a=4.022 \text{ \AA}$, $b=4.022 \text{ \AA}$, $c=2.958 \text{ \AA}$; birim hücre açıları ise $\alpha=90.000^\circ$, $\beta=90.000^\circ$, $\gamma=137.865^\circ$ şeklinde bulunmuştur. s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kımı durum yoğunluklar (PDOS) ve TDOS grafikleri FeB(2)'nin orbitallerindeki elektron yoğunluğu hakkında bilgi verdi ve p -d orbital hibritleşmesi olduğunu gösterdi. Elektronik band yapısını incelediğimizde ise iletim ve valans enerji bantlarının yeryer çakışık olduğunu görüldü. Bu bilgiler ışığında FeB(2) yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. Bu bilgiler ışığında FeB(2) yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. FeB(2) için yapılan taban durumu hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi ($J_{\text{Fe-Fe}}$) 0.7 eV bulunmuştur. Birim hacim başına düşen manyetik dipol momentindeki (manyetizasyon) değişim ve p-d orbital hibritleşmesi FeB(2)'nin manyetik davranışının ferrimanyetik (FiM) özellik de olğunu göstermiştir. Ayrıca $T_c=205 \text{ K}$ olarak bulunmuştur. Dielektrik fonksiyonunun gerçek (ϵ') ve sanal kısımlarının (ϵ'') foton enerjisine göre değişimleri optik özelliklerini aynı zamanda kalkanlama performansını (SE) belirleyen en büyük etken olmuştur. FeB(2) elektromanyetik dalgayı soğurarak kalkanlama karakterinde olduğu için soğurucu tip kalkan görevi görmüştür. FeB(2) film yapılı kristal örgüsü elektromanyeti spektrumdaki 28,552-123980 nm aralığında ki radyasyonu kalkanlama kabiliyeti göstermiştir. En yüksek toplam kalkanlama performansını (SE_T) ultraviyole bölgede göstermiştir. Daha yüksek enerji seviyelerindeki fotonları kalkanlama kabiliyeti ise sürekli düşmüştür. Maksimum SE_T değeri 20,404345 dB ile 63.328482 nm dalga boyundaki radyasyon için [001] polarizasyon durumunda gerçekleşmiştir. [001] polarizasyon durumundaki toplam kalkanlama performansı [010] ve [100] polarizasyon koşullarında ki kalkanlama davranışları ile benzer karakter göstermekle birlikte ve %0.04 yüksektir.

Tetragonel kristal yapıdaki Fe₂B(1)'in geometri optimizasyonu sonucu elde edilen kafes parametreleri $a=4.160 \text{ \AA}$, $b=4.160 \text{ \AA}$, $c=4.160 \text{ \AA}$; birim hücre açıları ise $\alpha=105.024^\circ$, $\beta=105.024^\circ$, $\gamma=118.786^\circ$ şeklinde bulunmuştur. s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kımı durum yoğunluklar (PDOS) ve TDOS grafikleri Fe₂B(1)'in orbitallerindeki elektron yoğunluğu hakkında bilgi verdi ve p -d orbital hibritleşmesi olduğunu gösterdi. Elektronik band yapısını incelediğimizde ise iletim ve valans enerji bantlarının yeryer çakışık olduğunu görüldü. Bu bilgiler ışığında Fe₂B(1) yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir.

Bu bilgiler ışığında $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ için yapılan taban durumu hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi ($J_{\text{Fe-Fe}}$) 0.5 eV bulunmuştur. Birim hacim başına düşen manyetik dipol momentindeki (manyetizasyon) değişim ve p-d orbital hibritleşmesi $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ 'in manyetik davranışının ferrimanyetik (FiM) özellik de olduğunu göstermiştir. Ayrıca $T_c=1275\text{K}$ olarak bulunmuştur. Dielektrik fonksiyonunun gerçek (ϵ') ve sanal kısımlarının (ϵ'') foton enerjisine göre değişimleri optik özelliklerini aynı zamanda kalkanlama performansını (SE) belirleyen en büyük etken olmuştur. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ elektromanyetik dalgayı soğurarak kalkanlama karakterinde olduğu için soğurucu tip kalkan görevi görmüştür. $\text{Fe}_2\text{B}(1)$ film yapılı kristal örgüsü elektromanyeti spektrumdaki 29,388-123980 nm aralığında ki radyasyonu kalkanlama kabiliyeti göstermiştir. En yüksek toplam kalkanlama performansını (SE_T) ultraviyole bölgede göstermiştir. Daha yüksek enerji seviyelerindeki fotonları kalkanlama kabiliyeti ise sürekli düşmüştür. Maksimum SE_T değeri 20,399556 dB ile 64.397718 nm dalga boyundaki radyasyon için [001] polarizasyon durumunda gerçekleşmiştir. [001], [010], [100] polarizasyon koşullarında kalkanlama davranışları benzerdir ve anlamlı bir fark yoktur.

Tetragonel kristal yapıdaki $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin geometri optimizasyonu sonucu elde edilen kafes parametreleri $a=3.494 \text{ \AA}$, $b=3.494 \text{ \AA}$, $c=2.507 \text{ \AA}$; birim hücre açıları ise $\alpha=90.000^\circ$, $\beta=90.000^\circ$, $\gamma=90.000^\circ$ şeklinde bulunmuştur. s, p ve d orbitalleri düzeyindeki kırımların yoğunluklar (PDOS) ve TDOS grafikleri $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'nin orbitallerindeki elektron yoğunluğu hakkında bilgi verdi ve p -d orbital hibritleşmesi olduğunu gösterdi. Elektronik band yapısını incelediğimizde ise iletim ve valans enerji bantlarının yeryer çakışık olduğunu görüldü. Bu bilgiler ışığında $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. Bu bilgiler ışığında $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ yarı metalik davranıştan kaçınarak, metalik davranış göstermiştir. $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ için yapılan taban durumu hesaplamaları sonucunda, Fe-Fe takas etkileşme enerjisi ($J_{\text{Fe-Fe}}$) 0.46 eV bulunmuştur. Birim hacim başına düşen manyetik dipol momentindeki (manyetizasyon) değişim ve p-d orbital hibritleşmesi $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ 'in manyetik davranışının ferrimanyetik (FiM) özellik de olduğunu göstermiştir. Ayrıca $T_c= 1200 \text{ K}$ olarak bulunmuştur. Dielektrik fonksiyonunun gerçek (ϵ') ve sanal kısımlarının (ϵ'') foton enerjisine göre değişimleri optik özelliklerini aynı zamanda kalkanlama performansını (SE) belirleyen en büyük etken olmuştur. $\text{Fe}_2\text{B}(2)$ elektromanyetik dalgayı soğurarak kalkanlama

karakterinde olduđu için soğurucu tip kalkan görevi görmüştür. Fe₂B(2) film yapılı kristal örgüsü elektromanyeti spektrumdaki 31,557-123980 nm aralığında ki radyasyonu kalkanlama kabiliyeti göstermiştir. En yüksek toplam kalkanlama performansını (SE_T) ultraviyole bölgede göstermiştir. Daha yüksek enerji seviyelerindeki fotonları kalkanlama kabiliyeti ise sürekli düşmüştür. Maksimum SE_T değeri 20,242873 dB ile 73.499007 nm dalga boyundaki radyasyon için [010] ve [010] polarizasyon durumlarında gerçekleşmiştir. [010] ve [100] polarizasyon koşullarında ki kalkanlama davranışları ile benzer karakter göstermek ve aynı değerleri almıştır. [001] polarizasyon koşulundaki maksimum SE_T değerli ise %0.01 daha düşüktür.

Tüm malzemeler için soğurmadan kaynaklı kalkanlama (SE_A) performansı, kırılmadan kaynaklı kalkanlama performansından (SE_R) büyük çıktığı gözlemlenmiştir. Bu bize FeB(1), FeB(2), Fe₂B(1) ve Fe₂B(2)'nin kalkanlama malzemesi olarak kullanılması halinde soğurucu tip kalkanlama malzemesi sınıfında olacağını göstermektedir. 4 malzemedede en yüksek toplam kalkanlama performansını (SE_T) aşırı ultraviyole (E-UV) bölgede göstermiş (>20dB) ve bu başarılarını elektromanyetik dalga spektrumunda görünür bölge ve kızıl ötesi bölgede ilerledikçe yitirmeye başlamışlardır. Ancak bu bölgelerde dahi tek katmanlı yapılarına rağmen >12 dB düzeyinde SE_T performansı göstermeyi başaramışlardır. Fotonun [001], [010], [100] polarizasyon durumlarındaki nüfuziyetleri malzemelerin kalkanlama performansları üzerinde büyük bir değişikliğe neden olmamakla birlikte maksimum değişme etkisi %1'i geçmemiştir. İki boyutlu (2D) Fe_xB malzemenin morfolojik özellikleri göz önüne alındığında sergilemiş oldukları bu performans umut vericidir.

REFERANSLAR

- [1] D. Bor, "Radyasyon nedir? halkımız için bilgilendirme kılavuzu," *Ankara üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü*, p. 3, 2015.
- [2] Y. E. Togay, "Radyasyon ve biz," *Türkiye Atom Enerjisi Kurumu Yayınları*, vol. 2, p. 12, 2002.
- [3] A. Türkkan, O. Çerezci, and K. Pala, "Elektromanyetik Alan Ve Sağlık Etkileri," 2012.
- [4] A. Balmori, "Electromagnetic pollution from phone masts. Effects on wildlife," *Pathophysiology*, vol. 16, no. 2-3, pp. 191-199, 2009.
- [5] F. Çerezci, "K-means algoritması ile elektromanyetik kirlilik analizi," *Sakarya Üniversitesi (Turkey)*, 2015.
- [6] O. Elmas, "Effects of electromagnetic field exposure on the heart: a systematic review," *Toxicology and industrial health*, vol. 32, no. 1, pp. 76-82, 2016.
- [7] R. Yılmaz, "Elektromanyetik kalkanlama özelliği olan malzemeler," *Ejovoc (Electronic Journal of Vocational Colleges)*, vol. 4, no. 1, pp. 136-150, 2014.
- [8] S. Ghosh *et al.*, "Fabrication of reduced graphene oxide/silver nanoparticles decorated conductive cotton fabric for high performing electromagnetic interference shielding and antibacterial application," *Fibers and Polymers*, vol. 20, pp. 1161-1171, 2019.
- [9] E. Zornoza, G. Catalá, F. Jiménez, L. G. Andión, and P. Garcés, "Electromagnetic interference shielding with Portland cement paste containing carbon materials and processed fly ash," *Materiales de Construcción*, vol. 60, no. 300, pp. 21-32, 2010.
- [10] P. Bandara and D. O. Carpenter, "Planetary electromagnetic pollution: it is time to assess its impact," *The Lancet Planetary Health*, vol. 2, no. 12, pp. e512-e514, 2018.
- [11] L. Cui *et al.*, "Phenolic resin reinforcement: A new strategy for hollow NiCo@C microboxes against electromagnetic pollution," *Carbon*, vol. 174, pp. 673-682, 2021.
- [12] V. Shukla, "Review of electromagnetic interference shielding materials fabricated by iron ingredients," *Nanoscale Advances*, vol. 1, no. 5, pp. 1640-1671, 2019.

- [13] A. Kaşgöz, "Elektromanyetik Dalga Kalkanlama Özelliğine Sahip Polimer Kompozitlerin Geliştirilmesi Ve Yapıperformans İlişkilerinin İncelenmesi," Doktora, Kimya Mühendisliği Anabilim Dalı, İstanbul Üniversitesi, Ulusal Tez Merkezi, 478309, 2017.
- [14] R. Çelen and Y. Ulcay, "Baryum Titanatin Tekstilde Elektromanyetik Kalkanlama Uygulamalarında KullanIMI," *Uludağ Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dergisi*, vol. 23, no. 2, pp. 29-44, 2018.
- [15] A. İ. Kaya and A. Çifci, "Kaplama Yöntemi ile Ahşap Kompozit Malzemelerin Elektromanyetik Kalkanlama Özellikleri," *Mesleki Bilimler Dergisi (MBD)*, vol. 6, no. 2, pp. 180-185, 2017.
- [16] H. Aniołczyk, J. Koprowska, P. Mamrot, and J. Lichawska, "Application of electrically conductive textiles as electromagnetic shields in physiotherapy," *Fibres & Textiles in Eastern Europe*, no. 4 (48), pp. 47--50, 2004.
- [17] S. Geetha, K. Satheesh Kumar, C. R. Rao, M. Vijayan, and D. Trivedi, "EMI shielding: Methods and materials—A review," *Journal of applied polymer science*, vol. 112, no. 4, pp. 2073-2086, 2009.
- [18] D. M. Bigg and E. J. Bradbury, "Conductive polymeric composites from short conductive fibers," in *Conductive Polymers*: Springer, 1981, pp. 23-38.
- [19] M. Altun, İ. Karteri, M. Güneş, and M. H. ALMA, "Grafen katkılı odun-plastik nanokompozitlerinin elektromanyetik özellikleri ve elektromanyetik kalkanlama etkinliği karşılaştırmalı çalışması," *Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*, vol. 20, no. 1, pp. 38-47, 2017.
- [20] Y. X. Yuan XingZhong *et al.*, "Speciation and environmental risk assessment of heavy metal in bio-oil from liquefaction/pyrolysis of sewage sludge," 2015.
- [21] M. Ersoy and E. Önder, "Shielding textiles against electromagnetic radiation," *International Nonwoven Technical Textiles Technology Magazine*, vol. 1, pp. 52-61, 2008.
- [22] G. Kılıç, H. G. Örtlek, and Ö. G. Saraçoğlu, "Elektromanyetik Çevre Kirliliği ve Bu Kirlilikten Korunmada Tekstil Çözümleri," *2007 (Cilt: 14)*, vol. 67, 2007.

- [23] P. R. Wallace, "The band theory of graphite," *Physical review*, vol. 71, no. 9, p. 622, 1947.
- [24] İ. Özdemir, "Bazı Mxene Yapılarının Organik Moleküllerle Etkileşmesinin İncelenmesi," Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı, Aydın Adnan Menderes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü 2019.
- [25] M. Roberts, C. Clemons, J. Wilber, G. Young, A. Buldum, and D. Quinn, "Continuum plate theory and atomistic modeling to find the flexural rigidity of a graphene sheet interacting with a substrate," *Journal of nanotechnology*, vol. 2010, 2010.
- [26] S. Çoğal, "İki-Boyutlu Nanomalzemeler: Özellikleri, Sentez Yöntemleri ve Uygulama Alanları Üzerine Genel Bir Bakış," *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, vol. 48, no. 2, pp. 63-71, 2022.
- [27] M. Arseven, "Nanokarbon ve formları," *Hacettepe Üniversitesi, İleri Malzemeler Araştırma Grubu Nanoteknoloji&Nanotıp Anabilim Dalı. Ankara*, 2010.
- [28] H. Liu *et al.*, "Phosphorene: an unexplored 2D semiconductor with a high hole mobility," *ACS nano*, vol. 8, no. 4, pp. 4033-4041, 2014.
- [29] C. Kamal and M. Ezawa, "Arsenene: Two-dimensional buckled and puckered honeycomb arsenic systems," *Physical Review B*, vol. 91, no. 8, p. 085423, 2015.
- [30] Z. Jiang, P. Wang, X. Jiang, and J. Zhao, "MBene (MnB): a new type of 2D metallic ferromagnet with high Curie temperature," *Nanoscale horizons*, vol. 3, no. 3, pp. 335-341, 2018.
- [31] T. Zhang, B. Zhang, Q. Peng, J. Zhou, and Z. Sun, "Mo₂B₂ MBene-supported single-atom catalysts as bifunctional HER/OER and OER/ORR electrocatalysts," *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 1, pp. 433-441, 2021.
- [32] M. Naguib *et al.*, "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti₃AlC₂," in *MXenes*: Jenny Stanford Publishing, 2011, pp. 15-29.
- [33] B. Anasori, M. R. Lukatskaya, and Y. Gogotsi, "2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage," *Nature Reviews Materials*, vol. 2, no. 2, pp. 1-17, 2017.

- [34] M. Naguib *et al.*, "Two-dimensional transition metal carbides," *ACS nano*, vol. 6, no. 2, pp. 1322-1331, 2012.
- [35] K. Hantanasirisakul and Y. Gogotsi, "Electronic and optical properties of 2D transition metal carbides and nitrides (MXenes)," *Advanced materials*, vol. 30, no. 52, p. 1804779, 2018.
- [36] M. Naguib, V. N. Mochalin, M. W. Barsoum, and Y. Gogotsi, "25th anniversary article: MXenes: a new family of two-dimensional materials," *Advanced materials*, vol. 26, no. 7, pp. 992-1005, 2014.
- [37] S. Ji, Y. Chen, X. Wang, Z. Zhang, D. Wang, and Y. Li, "Chemical synthesis of single atomic site catalysts," *Chemical reviews*, vol. 120, no. 21, pp. 11900-11955, 2020.
- [38] B. Feng *et al.*, "Experimental realization of two-dimensional boron sheets," *Nature chemistry*, vol. 8, no. 6, pp. 563-568, 2016.
- [39] X. Yang, C. Shang, S. Zhou, and J. Zhao, "MBenes: emerging 2D materials as efficient electrocatalysts for the nitrogen reduction reaction," *Nanoscale horizons*, vol. 5, no. 7, pp. 1106-1115, 2020.
- [40] P. Chai, S. A. Stoian, X. Tan, P. A. Dube, and M. Shatruk, "Investigation of magnetic properties and electronic structure of layered-structure borides AlT_2B_2 ($T = Fe, Mn, Cr$) and $AlFe_{2-x}Mn_xB_2$," *Journal of Solid State Chemistry*, vol. 224, pp. 52-61, 2015.
- [41] L. T. Alameda, P. Moradifar, Z. P. Metzger, N. Alem, and R. E. Schaak, "Topochemical deintercalation of Al from $MoAlB$: stepwise etching pathway, layered intergrowth structures, and two-dimensional MBene," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 140, no. 28, pp. 8833-8840, 2018.
- [42] H. Zhang, H. Xiang, F.-z. Dai, Z. Zhang, and Y. Zhou, "First demonstration of possible two-dimensional MBene CrB derived from MAB phase Cr_2AlB_2 ," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 34, no. 11, pp. 2022-2026, 2018.
- [43] J. Wang *et al.*, "Discovery of hexagonal ternary phase Ti_2InB_2 and its evolution to layered boride TiB ," *Nature communications*, vol. 10, no. 1, p. 2284, 2019.

- [44] D. Bury *et al.*, "Wet-Chemical Etching and Delamination of MoAlB into MBene and Its Outstanding Photocatalytic Performance," *Advanced Functional Materials*, vol. 33, no. 50, p. 2308156, 2023.
- [45] N. Li *et al.*, "Electromagnetic interference (EMI) shielding of single-walled carbon nanotube epoxy composites," *Nano letters*, vol. 6, no. 6, pp. 1141-1145, 2006.
- [46] X. Luo and D. Chung, "Electromagnetic interference shielding reaching 130 dB using flexible graphite," *MRS Online Proceedings Library*, vol. 445, pp. 235-238, 1996.
- [47] B. Shen, W. Zhai, and W. Zheng, "Ultrathin flexible graphene film: an excellent thermal conducting material with efficient EMI shielding," *Advanced Functional Materials*, vol. 24, no. 28, pp. 4542-4548, 2014.
- [48] Z. Xu, Y. a. Huang, Y. Yang, J. Shen, T. Tang, and R. Huang, "Dispersion of iron nano-particles on expanded graphite for the shielding of electromagnetic radiation," *Journal of magnetism and magnetic materials*, vol. 322, no. 20, pp. 3084-3087, 2010.
- [49] S. Yang, C. Chen, and S. Parng, "Effects of conductive fibers and processing conditions on the electromagnetic shielding effectiveness of injection molded composites," *Polymer composites*, vol. 23, no. 6, pp. 1003-1013, 2002.
- [50] A. A. Al-Ghamdi, A. A. Al-Ghamdi, Y. Al-Turki, F. Yakuphanoglu, and F. El-Tantawy, "Electromagnetic shielding properties of graphene/acrylonitrile butadiene rubber nanocomposites for portable and flexible electronic devices," *Composites Part B: Engineering*, vol. 88, pp. 212-219, 2016.
- [51] A. K. Singh, A. Shishkin, T. Koppel, and N. Gupta, "A review of porous lightweight composite materials for electromagnetic interference shielding," *Composites Part B: Engineering*, vol. 149, pp. 188-197, 2018.
- [52] S. Sankaran, K. Deshmukh, M. B. Ahamed, K. K. Sadasivuni, M. Faisal, and S. K. Pasha, "Electrical and Electromagnetic Interference (EMI) shielding properties of hexagonal boron nitride nanoparticles reinforced polyvinylidene fluoride nanocomposite films," *Polymer-Plastics Technology and Materials*, vol. 58, no. 11, pp. 1191-1209, 2019.

- [53] M. Ou, W. Qiu, K. Huang, and S. Chu, "Ultra-flexible and high-performance electromagnetic wave shielding film based on CNTF/liquid metal composite films," *Journal of Applied Physics*, vol. 125, no. 13, 2019.
- [54] H. Guan, S. Liu, Y. Duan, and J. Cheng, "Cement based electromagnetic shielding and absorbing building materials," *Cement and Concrete Composites*, vol. 28, no. 5, pp. 468-474, 2006.
- [55] C. G. Someda, *Electromagnetic waves*. Crc Press, 2017.
- [56] L. Weinstein, "Electromagnetic waves," *Radio i svyaz', Moscow*, 1988.
- [57] Y. Güngör, "FM bandında (92.4 MHz) Ankara bölgesi için elektromagnetik alan şiddet dağılımının incelenmesi," Fen Bilimleri Enstitüsü, 2005.
- [58] A. Özdemir, "Ankara İstanbul ve İzmir şehirlerinde elektromanyetik kirlilik haritasının hazırlanması ve elektromanyetik kirliliğin azaltılması yönünde öneriler," *Uzmanlık Tezi, Telekomünikasyon Kurumu*, 2004.
- [59] D. J. Griffiths, *Griffiths Elektromagnetik Teori*. İstanbul: Arte Güven, 1996.
- [60] Z. Yıldız, "İletken polimerlerle muamele edilmiş tekstil yüzeylerinin elektrik iletkenliği ve elektromanyetik kalkanlama özelliklerinin incelenmesi," Marmara Üniversitesi (Turkey), 2011.
- [61] F. Bütün, "Nitrotterephthalic acid ligandının yapı, spektroskopik özellikleri, biyoaktiflik doğası ve toksik özelliklerinin kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak teorik ve deneysel olarak incelenmesi," Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [62] D. W. Ball, "The electromagnetic spectrum: a history," *Spectroscopy*, vol. 22, no. 3, p. 14, 2007.
- [63] R. Yılmaz, "Kaplama tekstil yüzeylerinin elektro manyetik kalkanlama performansının araştırılması," Namık Kemal Üniversitesi, 2013.
- [64] G. Işınları, "Astronominin vahşi batısı; Gama ışınlarında uzay ve INTEGRAL."
- [65] D. Meskan, "Polietilentereftalat/polipirol kompozit malzeme hazırlanması ve elektromanyetik girişim ekranlama özelliklerinin araştırılması," Fen Bilimleri Enstitüsü.

- [66] U. Örs, "Kurtarma gemilerinde elektromagnetik girişim haritasının çıkarılması," Fen Bilimleri Enstitüsü, 2012.
- [67] G. Sürücü, "Bazı A3B (L12) tipi alaşımların yapısal, elektronik, elastik, termodinamik ve titreşimsel özelliklerinin ab initio yöntemlerle incelenmesi," Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 4, 2009.
- [68] T. Bulmuş, "X-ışını toz kırınım yöntemi ile bir seri çimento örneğinin nitel analizi," Fen Bilimleri Enstitüsü, 2009.
- [69] G. I. Csonka *et al.*, "Assessing the performance of recent density functionals for bulk solids," *Physical Review B*, vol. 79, no. 15, p. 155107, 2009.
- [70] Ö. Türker, "Yüksek Basınç Altında MgBr₂ Bileşiğinin Yapısal, Elektronik Ve Elastik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi İle İncelenmesi," Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi-Fen Bilimleri Enstitüsü, 2023.
- [71] Ç. Kaderoğlu, "Si (001) Yüzeyinin Atomik Ve Elektronik Yapısı," Yüksek Lisans Yüksek Lisans, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara Üniversitesi, Fizik MÜhendisliği Anabilim Dalı, 2007.
- [72] Ş. H. Şahin, "Katkılı Metal Oksit İnce Filmlerin Yapısal Ve Optiksel Özelliklerinin İncelenmesi " Doktora Tezi Fen Bilimleri Enstitüsü Ankara Üniversitesi 2016.
- [73] V. Fock, "Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems," *Zeitschrift für Physik*, vol. 61, pp. 126-148, 1930.
- [74] M. Kaval, "Yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile LuRhO₃ bileşiğinin elektronik, optik ve dinamik özelliklerinin incelenmesi," Fen Bilimleri Enstitüsü, 2017.
- [75] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas," *Physical review*, vol. 136, no. 3B, p. B864, 1964.
- [76] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Physical review*, vol. 140, no. 4A, p. A1133, 1965.
- [77] J. Kohanoff, *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods*. Cambridge university press, 2006.
- [78] M. Springborg, *Methods of Electronic-Structure Calculations: From Molecules to Solids*. John Wiley&Sons Ltd.: West Sussex, 2000.

- [79] C. J. Cramer, *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. West Sussex.: John Wiley & Sons Ltd., 2004.
- [80] E. Yazici, "Organik pil elektrodu tasarımı için elektronik yapı teorisi," Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [81] C. Kittel and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons, 2018.
- [82] J. A. S. David S. Sholl, Wiley, *Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi / Density Functional Theory*. Nobel Akademik Yayıncılık, 2012.
- [83] H. Akkuş, "SbSI Kristalinin Elektronik ve Optik Özellikleri: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin Uygulanması," *ADANA*, 113s, 2007.
- [84] A. Sakarya, "Yarıiletken için yerel olmayan kinetik enerji yoğunluk fonksiyonelinin incelenmesi," Trakya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2019.
- [85] D. M. Ceperley and B. J. Alder, "Ground state of the electron gas by a stochastic method," *Physical review letters*, vol. 45, no. 7, p. 566, 1980.
- [86] M. Altay, "Mn⁺ 1AX_n (M= ilk geçiş elementleri, A= A grup elementleri, X= C veya N, n= 1, 2, 3) tür bileşiklerin yapısal, elektronik, elastik, titreşimsel ve termodinamik özelliklerinin ab-initio yöntemlerle incelenmesi," Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [87] Ş. Şimşek, "ABO₃ (A=Ag, Na ; B=Nb, Ta) tipi kristallerin dinamik özelliklerinin Ab initio yöntemiyle incelenmesi," Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü Çukurova Üniversitesi Çabuk, Süleyman, 2011.
- [88] J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, J. Tao, V. N. Staroverov, G. E. Scuseria, and G. I. Csonka, "Prescription for the design and selection of density functional approximations: More constraint satisfaction with fewer fits," *The Journal of chemical physics*, vol. 123, no. 6, 2005.
- [89] A. D. Becke, "Density-functional thermochemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction," *The Journal of chemical physics*, vol. 96, no. 3, pp. 2155-2160, 1992.

- [90] C. Ş. Güven, "MgAgAs (C1b) yapıdaki XPtBi (X= Gd, Se, Y) bileşiklerinin yapısal elektronik, elastik, titreşimsel ve termodinamik özellikleri: Bir ilk prensipler çalışması," Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 2018.
- [91] F. d. s. d. Toulouse, *Annales de la faculté des sciences de Toulouse: Mathématiques*. Université Paul Sabatier, 1979.
- [92] A. E. Feiguin, "Phys 5870: Modern Computational Methods in Solids," *Northeastern University*, 2012.
- [93] P. E. Blöchl, J. Kästner, and C. J. Först, "Electronic structure methods: Augmented waves, pseudopotentials and the projector augmented wave method," *Handbook of Materials Modeling: Methods*, pp. 93-119, 2005.
- [94] B. Hammer, L. B. Hansen, and J. K. Nørskov, "Improved adsorption energetics within density-functional theory using revised Perdew-Burke-Ernzerhof functionals," *Physical review B*, vol. 59, no. 11, p. 7413, 1999.
- [95] A. Erkişi, "Bazı ABO₃ tipi perovskite yapıdaki oksit kristallerin yapısal, mekanik, elektronik ve manyetik özelliklerinin yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile incelenmesi," Doktora Tezi, Kırıkkale Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kırıkkale, 2015.
- [96] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. Arias, and a. J. Joannopoulos, "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients," *Reviews of modern physics*, vol. 64, no. 4, p. 1045, 1992.
- [97] J. F. NYE, *Physical Properties of Crystals*. Oxford: Clarendon Press, 1957, p. 315s.
- [98] D. PINES, *Elementary Excitations in Solids*. NY-Amsterdam: Benjamin Inc., 1963.
- [99] H. Koç, "Sb₂S₃ ve SbI₃ Kristallerin enerji band yapısı ve optik özellikleri: ab-initio (temel prensip) hesaplamaları," *Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, 2010.
- [100] A. Iqbal, P. Sambyal, and C. M. Koo, "2D MXenes for electromagnetic shielding: a review," *Advanced Functional Materials*, vol. 30, no. 47, p. 2000883, 2020.
- [101] D. Chung, "Materials for electromagnetic interference shielding," *Journal of Materials Engineering and performance*, vol. 9, pp. 350-354, 2000.
- [102] H. W. Ott, *Electromagnetic compatibility engineering*. John Wiley & Sons, 2011.

- [103] L. Wang, Z. Ma, Y. Zhang, L. Chen, D. Cao, and J. Gu, "Polymer-based EMI shielding composites with 3D conductive networks: a mini-review," *SusMat*, vol. 1, no. 3, pp. 413-431, 2021.
- [104] A. J. McDowell and T. H. Hubing, "Analysis and comparison of plane wave shielding effectiveness decompositions," *IEEE Transactions on Electromagnetic Compatibility*, vol. 56, no. 6, pp. 1711-1714, 2014.
- [105] H. Gürünlü, "Kübik GaN (001) yüzeyinin elektronik yapısı," Ankara Üniversitesi (Turkey), 2005.
- [106] M. Ernzerhof and G. E. Scuseria, "Assessment of the Perdew–Burke–Ernzerhof exchange-correlation functional," *The Journal of chemical physics*, vol. 110, no. 11, pp. 5029-5036, 1999.
- [107] H. B. Schlegel, "Geometry optimization," *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, vol. 1, no. 5, pp. 790-809, 2011.
- [108] K. S. Perera, "Crystal Field Theory," 2020.
- [109] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple," *Physical review letters*, vol. 77, no. 18, p. 3865, 1996.
- [110] B. Delley, "Hardness conserving semilocal pseudopotentials," *Physical Review B*, vol. 66, no. 15, p. 155125, 2002.
- [111] M. Parekh, "Surface Energies of Zinc 001, 100 Surfaces."
- [112] V. Milman *et al.*, "Electronic structure, properties, and phase stability of inorganic crystals: A pseudopotential plane-wave study," *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 77, no. 5, pp. 895-910, 2000.
- [113] G. Kresse, "Ab initio molecular dynamics for liquid metals," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 192, pp. 222-229, 1995.
- [114] P. E. Blöchl, "Projector augmented-wave method," *Physical review B*, vol. 50, no. 24, p. 17953, 1994.
- [115] R. M. Neal, "Probabilistic inference using Markov chain Monte Carlo methods," 1993.

- [116] F. Wang and D. Landau, "Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram," *Physical Review E*, vol. 64, no. 5, p. 056101, 2001.
- [117] S. Şehirli, "BexZn(1-x)O Üçlü Bileşiğinin Elektronik, Optik Ve Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi " Yüksek Lisans Fizik Anabilim Dalında Dumlupınar Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 2015.

