

**ÖZET****SİLİCENE SENSÖRLER: TEORİK ARAŞTIRMA**

Özlem ARSLANALP

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı  
Tez Danışmanı: Doç. Dr. Ethem AKTÜRK  
2014, 57 sayfa

Silikon 'un iki boyutlu bal peteği yapısı olarak adlandırılan Silicene daha önce rapor edildiği gibi manyetik olmayan yarımetaldir. Silicene, ters örgü uzayında  $K$  ve  $K'$  simetri noktalarında Fermi seviyesi etrafında doğrusal dağılım nedeniyle kütleli Dirac fermiyonlarına sahiptir. Bunun bir sonucu olarak, yük taşıyıcıların titreme hareketi, Klein Tünellemesi, yüksek mobilite yük taşıyıcıları, ambipolar etki ve anormal Kuantum Hall etkisi Silicene 'de gözlemlenebilir. Silicene yapısı  $sp^2$ -  $sp^3$  hibritleşmesi nedeniyle düzlemsel geometrisi kararlı değildir. Bu yüzden 0.44  $\Delta$  bükülme parametresi ile bükülmüş balpeteği formu kararlıdır [1]. Grafen ile karşılaştırıldığında zayıf  $\pi$  bağları Silicene'in metallerle kuvvetli bağ yapabilir. Bu yüzden Silicene'in elektronik ve manyetik özellikleri ekatom tutunması ile modifiye edilebilir.

Bu tezde,  $Ag_n$  tutunmuş ve saf Silicene 'in elektronik ve manyetik özellikleri incelendi. Ayrıca Pt tutunmuş ve katkılanmış Silicene yüzeyi incelendi. Son olarak Pt tutunmuş ve katkılanmış yüzeyin C, H, O atomları ve  $CH_4$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2$  molekülleri ile etkileşimleri detaylı bir şekilde incelendi. Bir çok çalışmalar arasında Silicene yüzeyine tutunmuş Ag atomu ile ilgili hiçbir çalışmayla karşılaşılmadı. Gümüş ve Platin atomları, antibakteriyel aktiviteye, ısıl kararlılığa ve yüksek katalitik özelliğe sahiplerdir. Bu yüzden Pt ve Ag 'nin Silicene yüzeyi ile etkileşimlerini araştırmak önemlidir. Biz inanıyoruz ki, bizim sonuçlarımız Silicene ile gümüş ve platin atomlarının etkileşmesinin temel işleyişini anlamada çok önemlidir.

**Anahtar Sözcükler**

YFT (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi), Silicene, Sensör.