B4C'yi önemli hale getirmektedir. Sertlik ve dayanıklılık/yoğunluk oranının önemli olduğu askeri amaçlı uygulamalarda uygun bir malzeme özelliği kazandırır. Bor karbür zırh malzemesi olarak kullanılan alüminadan daha iyi özelliklere sahiptir [3]. Bu çalışmada B4C ince filmler RF magnetron püskürtme sistemi ile Si ve cam alttaş üzerine, ˜10-6 mTorr temel basıncına düşürülen püskürtme odasında, 4mmTorr Ar gaz basıncı altında, 30W RF hedef gücü uygulanarak kaplandı ve kaplanan numunenin bir parçası Geleneksel Isıl Tavlama (CTA) sisteminde 1 saat hava ortamında 1000 ⊠C'de tavlandı. İnce filmlerin yapısal, morfolojik ve optik analizleri yapıldı. B4C ince filmlerin XRD deseni (003) yönelimlerinde gözlenen kırınım piklerinden rombohedral yapıda oluştuğu belirlendi. UV-Vis ölçümünden elde edilen optik geçirgenlik ve soğurma spektrumundan (Tauc eğrisi), kaplanan filmin enerji bant aralığı yaklaşık olarak 3,7 eV olarak elde edildi. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ölçümlerinden elde edilen görüntüler incelenerek B4C ince filmlerin yüzey morfolojisi araştırıldı. B4C ince filmlerin kaplama ve tavlama sonrası numunelerin ölçümünden elde edilen yüzey pürüzlülüğünün kök ortalama kare (RMS) değerleri ve tanecik boyut değerleri karşılaştırılarak değerlendirildi.
Teşekkür: Bu çalışma 2016K121220 ve 2019K12-149045 nolu projeler ile Türkiye Cumhuriyeti Cumhurbaşkanlığı Strateji ve Bütçe Başkanlığı tarafından desteklenmiştir.

Kaynaklar:
[1]Lattemann, M. and Ulrich, S. (2007). Investigation of structure and mechanical Properties of magnetron sputtered monolayer and multilayer coatings in the ternary system SiBC. Surface and Coatings Technology, 201, 5564-5569.
[2]Chen, Y., Chung, Y. W., & Li, S. Y. (2006). Boron carbide and boron carbonitride thin films as protective coatings in ultra-high density hard disk drives. Surface and Coatings Technology, 200(12-13), 4072-4077.
[3]Shi, L., Gu, Y., Chen, L., Qian, Y., Yang, Z., & Ma, J. (2003). A low temperature synthesis of crystalline B4C ultrafine powders. Solid state communications, 128(1), 5-7.

Poster Oturumu / 47

Üçlü-zincir yapılarına sahip ortorombik lityum bor karbürlerin (o-LiBC) ilk-prensiplerle incelenmesi

Yazarlar: Kübra ÖZTÜRK[1]; sezgin aydın[None]

[1] *Öğrenci*

Bor-zengini bileşiklerin sahip oldukları kimyasal, mekanik ve elektronik özellikler sayesinde çok fazla kullanım alanı mevcuttur [1]. Genel olarak, B12-ikosahedral yapıtaşları ve bunları birleştiren ikili veya üçlü zincirlerden oluşan kristal yapılara sahiptirler. Ayrıca, farklı zincir yapılarına bağlı olarak değişik fiziksel özellikler sergileyebilirler [2].
Bu çalışmada, CBC-zincirine sahip o-LiBC [3] kristalinin zincir kısmı NBN ve NCN şeklinde değiştirilerek elde edilen bileşiklerin yapısal, mekanik, elektronik ve dinamik özellikleri ilk prensipler yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile incelendi. Termodinamik kararlılık için oluşum entalpileri, mekanik kararlılık için elastik sabitler ve dinamik kararlılık için fonon dispersiyon eğrileri hesaplandı. Kararlı kalabilen bileşik için detaylı bir bağlanma analizi sunuldu. Bağ uzunluğu, ikosahedral hacim ve yüzey alanı gibi değişik yapısal parametreler yoluyla detaylı bir yapısal inceleme yapıldı. Farklı yönlerde çekme testleri uygulanarak zor-zorlanma eğrileri hesaplandı. Bağlanma karakteristikleri yardımıyla farklı sertlik metotları kullanılarak sertlik hesabı yapıldı. Sonuçlar CBC zincirine sahip orijinal yapı ile kıyaslandı.
Oluşum entalpileri yoluyla her iki bileşiğin termodinamik kararlı olduğu, hesaplanan elastik sabitlerin mekanik kararlılık şartlarını sağladığı ve böylece bileşiklerin mekanik kararlı oldukları görüldü. Fonon dispersiyon eğrilerinden NCN-zincirli yapının dinamik kararlı olduğu, ancak NBN-zincirli yapının negatif frekanslar üreterek dinamik kararlı olmadığı tespit edildi. CBC-zincirli orijinal yapı yarıiletken iken, kararlı kalabilen NCN-zincirli bileşiğin metalik özellik sergilediği görüldü. CBC-zincirli yapının sertliği 8 GPa (11.3 GPa [3]) iken, NCN-zincirli yapının sertliğinin 22.3-30.1 aralığında değiştiği ve zincir değişimiyle birlikte mekanik özelliklerin iyileştiği görüldü.
Kaynaklar
[1] M. Ludwig, H. Hillebrecht, Phys. Chem. Chem. Phys (2021) 23, 470-486
[2] X. Guo, J. He, Z. Liu, Y. Tian, Phys. Rev. B (2006) 73, 104115
[3] Z. Yuan, L. Hao, F. Ling, D. Yu, Solid State Sci. (2021) 111, 106499