

**T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

KARBON NANOŞERİT SİMÜLASYONU

ÇİSEM ELBASAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
PROF. DR. GÜLAY DERELİ**

İSTANBUL, 2013

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOŞERİT SİMÜLASYONU

Çisem ELBASAN tarafından hazırlanan tez çalışması 30.01.2013 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Prof. Dr. Gülay DERELİ

Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Gülay DERELİ

Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Kubilay KUTLU

Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Nurten ÖNCAN

İstanbul Üniversitesi

ÖNSÖZ

Bu çalışma Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı, Fizik Programında yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır. Tezimin konusunu belirleyip bana yol gösteren ve yardımcı olan Fizik Bölümü “Karbon Nanotüp Bilgisayar Simülasyon” laboratuvarının kurucusu değerli hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ’ye teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca bu süreçte desteklerini esirgemedikleri için öncelikle Dr. Necati VARDAR ve Dr. Önder EYECİOĞLU’na teşekkür ederim.

Bu çalışmayı hazırlayabilmem için gerekli imkanı sağlayan Yıldız Teknik Üniversitesi Rektörü Prof. Dr. İsmail YÜKSEK, Fen Edebiyat Fakültesi Dekanı Prof. Dr. Ulvi AVCIATA, Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Kubilay KUTLU’ ya teşekkürlerimi sunarım.

Benden her türlü maddi ve manevi desteklerini ve sevgilerini hiç esirgemeyen babam Hüseyin ELBASAN ve annem İlknur ELBASAN’a teşekkürler.

Ocak, 2013

Çisem ELBASAN

İÇİNDEKİLER

Sayfa

SİMGE LİSTESİ	vii
KISALTMA LİSTESİ	viii
ŞEKİL LİSTESİ	ix
ÇİZELGE LİSTESİ.....	v
ÖZET.....	vi
ABSTRACT	viii
BÖLÜM 1	
GİRİŞ.....	1
1.1 Literatür Özeti	1
1.2 Tezin Amacı	1
1.3 Hipotez	2
BÖLÜM 2	
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER	3
2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Yapısı	3
2.1.1 Kiral Vektörü.....	5
2.1.2 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$)	7
2.1.3 Simetri Vektörü : ($\vec{R}$)	7
2.1.4 Birim Hücre.....	8
2.2 Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı	8

BÖLÜM 3

SİMÜLASYON SONUÇLARI	10
3.1 Kiralitenin Fiziksel ve Elektronik Özelliklere Etkisi	10
3.1.1 (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel Özellikleri	10
3.1.2 (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Özellikleri	25
3.2 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altındaki (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri	37

BÖLÜM 4

SONUÇ VE ÖNERİLER	53
KAYNAKLAR.....	56
ÖZGEÇMİŞ.....	58

SİMGE LİSTESİ

$\vec{C}_h$	Kiral vektörü
E_F	Fermi enerjisi
E_K	Kinetik enerji
E_{tot}	Toplam enerji
N	Sistemdeki atom sayısı
$\vec{R}$	Uzay simetri vektörü
$\vec{T}$	Öteleme vektörü

KISALTMA LİSTESİ

AKS	Atomik Koordinasyon Sayısı
BADF	Bağ- Açısı Dağılım Fonksiyonu
BUDF	Bağ- Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu
KNT	Karbon Nanotüp
RDF	Radyal Dağılım Fonksiyonu
MD	Moleküler Dinamik
SBMD	Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2. 1	Sırasıyla (Armchair) Koltuksu KNT, Zigzag KNT, (Chiral) Kiral KNT	4
Şekil 2. 2	(4,2) nanotüp balpeteği örgüsü. $(\vec{OA})$; $\vec{C}_h$ vektörü, $(\vec{OB})$; $\vec{T}$ öteleme vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim baz vektörleri (Saito vd., 1998).....	5
Şekil 2. 3	Koltuksu KNT	6
Şekil 2. 4	Zigzag KNT	6
Şekil 2. 5	Kiral KNT	6
Şekil 2. 6	Birim Hücre	8
Şekil 3. 1	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu.....	12
Şekil 3. 2	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	12
Şekil 3. 3	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu.....	13
Şekil 3. 4	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı	13
Şekil 3. 5	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu.....	14
Şekil 3. 6	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	14
Şekil 3. 7	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu.....	15
Şekil 3. 8	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı	15
Şekil 3. 9	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu.....	16
Şekil 3. 10	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	16
Şekil 3. 11	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu	17
Şekil 3. 12	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı	17
Şekil 3. 13	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu	18
Şekil 3. 14	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	18
Şekil 3. 15	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu	19
Şekil 3. 16	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı	19
Şekil 3. 17	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu	20
Şekil 3. 18	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	20
Şekil 3. 19	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu	21
Şekil 3. 20	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı.....	21
Şekil 3. 21	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu	22
Şekil 3. 22	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	22
Şekil 3. 23	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu	23
Şekil 3. 24	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı.....	23

Şekil 3. 25	(10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) zigzag nanoşerit.....	24
Şekil 3. 26	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.3 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	28
Şekil 3. 27	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	28
Şekil 3. 28	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	29
Şekil 3. 29	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	29
Şekil 3. 30	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	30
Şekil 3. 31	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri.....	30
Şekil 3. 32	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	31
Şekil 3. 33	(11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	32
Şekil 3. 34	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	32
Şekil 3. 35	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	33
Şekil 3. 36	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	33
Şekil 3. 37	(28,0) nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8, MD adım: 50000 dt:1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri.....	34
Şekil 3. 38	(10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000, dt: 1fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	35
Şekil 3. 39	(13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	35
Şekil 3. 40	(14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	36
Şekil 3. 41	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	36
Şekil 3. 42	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım : 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT' nin Atomik Koordinasyon Sayısı.....	38
Şekil 3. 43	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu	39
Şekil 3. 44	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Bağ- Açısı Dağılım Fonksiyonu.....	39
Şekil 3. 45	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 50000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Bağ- Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu.....	40
Şekil 3. 46	Gerinim uygulanan (17,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Simülasyon Görüntüsü.....	41
Şekil 3. 47	Gerinim uygulanan (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Simülasyon Görüntüsü.....	42

Şekil 3. 48	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\varepsilon = 6$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	43
Şekil 3. 49	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\varepsilon = 8$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	43
Şekil 3. 50	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\varepsilon = 12$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	44
Şekil 3. 51	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\varepsilon = 18$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	44
Şekil 3. 52	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\varepsilon = 20$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	45
Şekil 3. 53	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 2$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	45
Şekil 3. 54	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 4$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	46
Şekil 3. 55	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 6$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	46
Şekil 3. 56	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8	47
Şekil 3. 57	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 10$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	47
Şekil 3. 58	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 12$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	48
Şekil 3. 59	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 18$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	48
Şekil 3. 60	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = 20$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	49
Şekil 3. 61	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = -2$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	49
Şekil 3. 62	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = -4$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	50
Şekil 3. 63	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon = -8$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri	50
Şekil 3. 64	(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe-sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim.....	51
Şekil 3. 65	(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe- sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim.....	52

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 3. 1	Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel özellikleri..	11
Çizelge 3. 2	Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Ortalama enerji Fermi enerji ve Enerji Bant Aralığı Değerleri (5 katman).....	26
Çizelge 3. 3	Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Ortalama enerji Fermi enerji ve Enerji Bant Aralığı Değerleri (20 katman).....	27

KARBON NANOŞERİT SİMÜLASYONU

Çisem ELBASAN

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Gülay DERELİ

Tek duvarlı karbon nanotüplerin elektronik özellikleri TDKNT'nin çapına ve kiralitesine bağlıdır. Yapısal parametrelerine bağlı olarak metalik, yarıiletken veya metalik yarıiletken olabilirler. Bu tez çalışması 2003 yılında Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından kurulan Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü "Karbon Nanotüp Bilgisayar Simülasyon" laboratuvarında yapılmıştır. Tez çalışmamda Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından geliştirilen ve karbon nanotüplere başarı ile uygulanan "Paralel, N Mertebeli Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon Programı" kullanıldı. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'lerin herbiri için Fermi enerji seviyeleri, elektronik durum yoğunlukları ve enerji bant aralıkları hesaplandı. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) nanoşerit şeklindeki KNT'lerin fiziksel özellikleri (bağ-açısı, bağ-uzunluğu radyal dağılım fonksiyonları ve atomik koordinasyon sayısı) hesaplandı.

Sistem 50000 MD adımda kararlı enerji seviyesine ulaşıktan sonra seçilen (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT üzerine 10000 adım moleküler dinamik adım süresince gerinim uygulanarak, seçilen tüplerin elektronik özellikleri incelendi.

Anahtar kelimeler: Karbon nanotüp, Nanoşerit, karbon nanotüpün elektronik özellikleri, bant aralığı enerjisi, Fermi enerjisi, Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik.

CARBON NANORIBBON SIMULATION

Çisem ELBASAN

Department of Physics

MSc. Thesis

Advisor: Prof. Dr. Gülay DERELİ

The electronic properties of the structure of a single wall carbon nanotubes (SWCNT's) strongly depend upon the tube diameter and chirality (given by the chiral indices m and n). SWCNT's are either metallic or semiconducting depending on their parameters. This thesis has been made at Yıldız Technical University Department of Physics "Carbon Nanotube Simulation Laboratory" founded by Prof. Dr. Gülay Dereli. In this thesis, Order N, Parallel Tight Binding Molecular Dynamics Simulation program written by Prof. Dr. Gülay DERELİ has been used. We calculated the electronic density of state (eDOS), Fermi energy level and band structure energy of each tube with varying chiralities from (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0). We calculated from (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) carbon nanoribbon's physical properties(bond angle, bond length and radial distribution function and atomic coordination number). We applied from (17,0) and (28,0) carbon nanoribbon ten thousand step tension and compression on balanced tubes in fifty thousand MD step. We examined carbon nanoribbon's electronic and physical properties.

Keywords: Carbon Nanotubes, Nanoribbon, electronic properties of Carbon nanoribbon's, Band gap energy, Fermi energy, Tight-binding Molecular Dynamics

1.1 Literatür Özeti

Karbon nanotüp, karbon atomunun izomerlerinden biridir ve boy/ çap oranı çok büyük olduğundan tek boyutlu bir malzeme olarak kabul edilmektedir. Nanotüpün çapı, şimdiye kadar elde edilen yarı iletken aygıtlardan daha küçük boyuttadır. [1]. Grafen levhanın bir silindir etrafında sarılmış halidir. KNT ler sağlamlıkları, önemli mekanik ve elektronik özellikleri nedeniyle nanoteknoloji araştırmalarında ön sıralarda yer almaktadırlar [2]. Tek duvarlı metal veya yarı iletken olan karbon nanotüpün elektronik özelliği çapı ve kiralitesine bağlıdır. Katkılamaya gerek olmadan sadece geometrik parametrelerin değiştirilmesiyle elektronik özelliklerinin değiştirilebilir olması TDKNT'lere elektronik uygulamalarda önemli bir yer verir [3].

1.2 Tezin Amacı

Yüksek Lisans tez çalışmamda Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından geliştirilen ve karbon nanotüplere başarı ile uygulanan Paralel N-Mertebeli Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon programı [4-14] kullanıldı. Yarıçapları 3,9-10,9Å arasında değişen, boyu 4,26Å olan karbon nanotüpler nanoşerit olarak adlandırıldı. Tezimde (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'ler 300K sıcaklıkta, simülasyon süresini belirleyen zaman 1fs alınarak 50000 adımda elektronik özellikleri (Fermi enerji seviyesi, elektronik durum yoğunluğu ve enerji bant aralıkları) incelenmiştir.

Sistem 50000 MD adımda kararlı enerji seviyesine ulaştıktan sonra seçilen (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT üzerine 10000 adım moleküler dinamik adım süresince

gerinim uygulanarak, seçilen tüplerin elektronik özellikleri incelendi. Uygulanan gerinim etkisi altında zigzag nanoşerit TDKNT'lerin yapısal kararlılıklarının bozulup bozulmadığı tespit edildi.

1.3 Hipotez

Karbon nanotüpler sağladıkları önemli mekanik ve elektronik özellikleri nedeniyle nanoteknoloji araştırmalarında ön sıralarda yer almaktadır [2]. Günümüzdeki tipik uygulama örneklerine karbon lifler üreterek hidrojen bataryası olarak kullanma, coca-cola plastik şişelerin monolayer silisyum dioksitle kaplayarak cam ve plastiğin üstün özelliklerinin birleştirilmesini, n ve p tipi transistör ve elektronik devrelerin imalini düşünebiliriz. Kendi kendini temizleyen boyalardan, kirlenmeyen kumaşlara; kanserli hücrelerin vücuda zarar vermeden öldürülmesinden, günlerce etkisini kaybetmeyen kremlere; bakterileri öldürdüğünden dolayı kokmayan çoraplara kadar hayatımıza girmeye başlayan nanoteknoloji yeni bir teknoloji devrimi olarak algılanıyor [15]. Nano bilim çalışmalarıyla yeni elektronik cihazlar üretmek, inorganik dünya ile canlı sistemler arasında bağ kurmak, yeni malzemeler üretmek mümkün olacaktır. İleriki yıllarda biyoteknolojinin nanoteknoloji ile birlikteliği, yeni sektörlerin doğuşuna zemin hazırlayacak ve "Bio-nanoteknoloji Çağı" olarak adlandırılan yeni bir dönem başlayacaktı. Tüm bu gelişmeler doğrultusunda elektronikte, tıpta, tekstilde ve bilimin ışığı doğrultusunda daha birçok alanda KNT'lerin kullanılması hedeflenmektedir. Yüksek lisans tezimde Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından geliştirilen ve karbon nanotüplere başarı ile uygulanan "Paralel, N-Mertebe Sıkı-bağ Moleküler Dinamik Simülasyon Programı" kullanılarak (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin fiziksel ve elektronik özelliklerinin incelenmesi hedeflendi ve gerinim uygulanan (17,0), (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerde yapısal kararlılığın korunup korunmadığı tespit edildi, enerji bant aralığındaki değişim gözlemlendi.

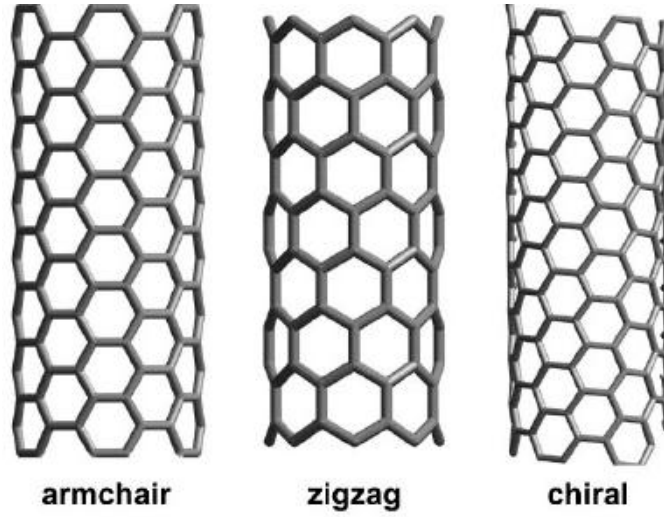
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER

2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Yapısı

Karbon nanotüplerin tarihi, 1984 yılında R. E. Smalley ve arkadaşları tarafından karbon atomunun yapay allotroplarından biri olan “fulleren”lerin bulunmasıyla başlar ve rastlantı sonucu 1991’de NEC laboratuvarlarında (Japonya) çalışan Sumio Iijima’nın, fullerenlerden silindir şeklinde nano yapıların elde etmesiyle devam eder. Iijima tarafından 1991’de bulunan “Karbon Nanotüpler” dikkat çekmiştir. Bunlar çok duvarlı karbon nanotüplerdir. Bu yapılar eş merkezli iç içe birçok tüpten oluşmaktadır. Tek duvarlı karbon nanotüpler ilk kez 1993 yılında geçiş metallerinden oluşan katalizörlerle elde edilmiştir. Karbon nanotüp bir boyutlu kuantum tel, grafit 2 boyutlu iletken ve elmas 3 boyutlu geniş bant aralığına sahip yarı iletken şeklinde farklı boyutta örnekleri olan malzemelerdir [2]. 1996 Rice Üniversitesi Araştırma Grubunun tek katmanlı nanotüp grupları oluşturmada daha etkin bir yöntem bulmasıyla, çok sayıda karbon nanotüp deneyleri yapıldı.

2.2 Tek Duvarlı Karbon Nanot plerin Sınıflandırılması

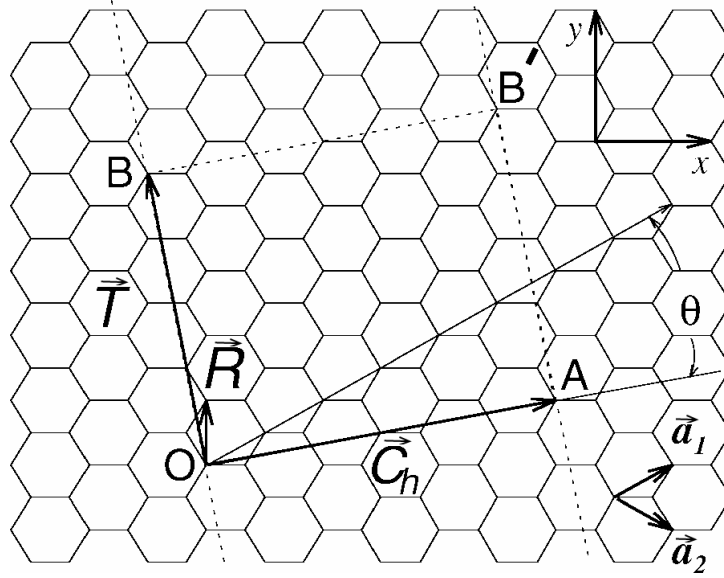
Karbon nanot p grafen levhanın bir silindir etrafında sarılmış halidir. Grafin (tek grafit yapısı) levhayı oluşturan altıgen  rg n n t p ekseni etrafındaki y nelimi KNT yapısını belirlemektedir. TDKNT'ler, Akiral ve Kiral olmak  zere iki sınıfa ayrılırlar. Akiral yapı kendi ayna yansıması orijinalinin yapısına  zdeř olan bir karbon nanot ple tanımlanır. Koltuksu ve Zigzag yapı olarak ikiye ayrılır. Kiral yapı ayna yansıması orijinal řeklini vermeyen bir simetri g sterir. řekil 2.1'de sırasıyla Koltuksu KNT, Zigzag KNT, Kiral KNT g sterilmiřtir.



řekil 2. 1 Sırasıyla (Armchair) Koltuksu KNT, Zigzag KNT, (Chiral) Kiral KNT

2.1.1 Kiral Vektörü

Kiral vektörü (n,m) indis çifti ile tanımlanır. Kiral vektörün büyüklüğü karbon nanotüpün çevre uzunluğunu belirlememizi sağlar [16].



Şekil 2.2 (4,2) nanotüp balpeteği örgüsü. $(\vec{OA})$; $\vec{C}_h$ vektörü, $(\vec{OB})$; $\vec{T}$ öteleme vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim baz vektörleri (Saito vd., 1998).

$\vec{OB}$ vektörü yönü nanotüp ekseninin yönüdür ve $\vec{OA}$ vektörü (4,2) karbon nanotüpün $\vec{C}_h$ kiral vektörünü tanımlar. Şekilde O noktası A noktasıyla; B noktası B' noktasıyla üst üste gelecek şekilde katlandığında bir KNT modeli oluşturmuş oluruz. Şekil 2.2 TDKNT altıgen örgüsünün düzleme açılmış halidir.

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m) \quad (n, m \text{ tamsayı}), 0 \leq |m| \leq n \quad 2.1$$

şeklinde tanımlanır [16]. Burada “n” ve “m” katsayıları sırasıyla $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleri

doğrultusundaki tam sayılardır. Örgünün altıgen simetrisinden dolayı

$$0 \leq |m| \leq n \text{ olur.}$$

Örgünün altıgen yapısı nedeniyle aralarındaki açı 60° olan $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleri Kartezyen koordinatlar cinsinden

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}, \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} \quad (2.2)$$

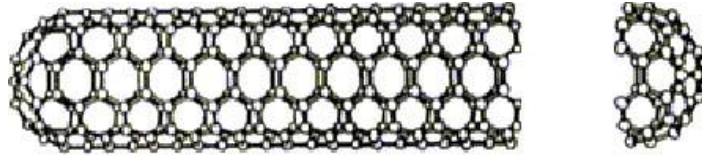
olduğundan

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = a^2, \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{a^2}{2} \quad (2.3)$$

ifadeleri elde edilebilir [2]. KNT yapıda karbon atomları arasındaki bağ uzunluğu 1.44Å bulunur.

$\vec{C}_h$ vektörü, n ve m sayılarına bağlı olarak altıgen karbon örgülerinin tüp eksenini doğrultusundaki yönlendirilmelerini belirler.

$n = m$ durumunda $\vec{C}_h = (n, n)$ vektörü Koltuksu KNT örnek : $\vec{C}_h = (5,5), (10,10) \dots$



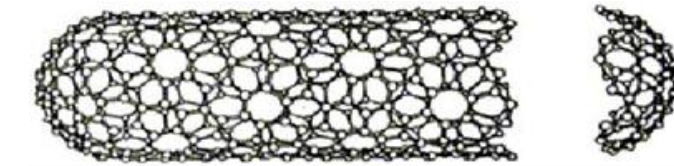
Şekil 2. 3 Koltuksu KNT

$m = 0$ durumunda $\vec{C}_h = (n, 0)$ vektörü Zigzag KNT (örnek: $\vec{C}_h = (5,0), (17,0) \dots$);



Şekil 2. 4 Zigzag KNT

$0 < |m| < n$ durumunda $\vec{C}_h$ vektörü Kiral KNT yapıyı ifade eder.



Şekil 2. 5 Kiral KNT

Kiral vektörü KNT'nin özelliklerini belirlemektedir. Örnek olarak, (n,n) koltuksu KNT'ler metalik; (n,0) zigzag KNT'ler ise n sayısı 3 sayısının tam katları olduğunda metalik, bunun dışındaki durumlarda yarı iletken özellik gösterirler.

2.1.2 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$)

Öteleme vektörü $\vec{T}$, bir boyutlu birim hücrede tanımlanır ve KNT eksenine paralel olan kiral vektörünün ($\vec{C}_h$) normalidir. Tüp eksen boyunca öteleme periyodunu belirler. Öteleme vektörü $\vec{T}$, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleriyle ifade edilir.

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \equiv (t_1 \text{ ve } t_2 \text{ tamsayı}) \quad (2.4)$$

Öteleme vektörü T, iki boyutlu grafen tabakanın ilk örgü noktasına karşı gelir ve

Şekil 2.2'deki $\vec{OB}$ vektörüdür. $\vec{C}_h \cdot \vec{T} \equiv 0$ bağıntısını kullanarak t_1 ve t_2 yi elde ederiz.

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{2m + n}{d_R} \\ t_2 &= -\frac{2n + m}{d_R} \end{aligned} \quad (2.5)$$

d_R , n ve m nin en büyük ortak bölenidir.

Eğer $(n - m)$, 3d nin tam katı ise $d_R = 3d$;

Eğer $(n - m)$, 3d nin tam katı değil ise $d_R = d$ ifadesi geçerlidir.

2.1.3 Simetri Vektörü : ($\vec{R}$)

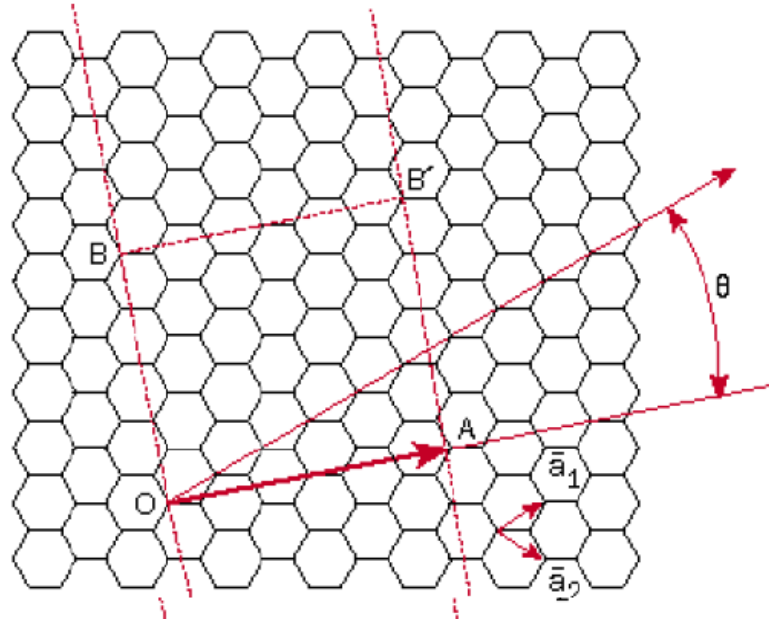
$\vec{R}$ vektörüyle, bir boyutlu nanotüp birim hücresinde karbon atom örgü noktası vektörleri tanımlanır. R simetri vektörü, $\vec{C}_h$ kiral vektör yönünde en küçük bileşene sahip olan örgü noktası vektörü olarak tanımlanır ve aşağıdaki gibi ifade edilirler:

$$\vec{R} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 \equiv (p, q) \quad (p \text{ ve } q \text{ tamsayı}) \quad (2.6)$$

p ve q tam sayılarının "1"den başka ortak böleni yoktur.

$\vec{R}$ vektörü KNT içindeki karbon atomlarının koordinatlarını belirlemek için kullanılır.

2.1.4 Birim Hücre



Şekil 2. 6 Birim Hücre

Bir kristal örgünün, kristalin bütün özelliklerini taşıyan en küçük parçasına birim hücre denir. Bir birim hücrenin şekli ve büyüklüğü orijin olarak alınan köşeden çizilen vektörler ile belirtilir. Şekilde $\vec{C}_h(\vec{OA})$ ve $\vec{T}(\vec{OB})$ öteleme vektörleri vektörlerinden oluşturulmuş OAB'B dikdörtgenidir.

2.2 Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı

Karbon nanotüplerin elektronik yapısı çapına ve kiralitesine bağlı olarak metalik veya yarıiletken olabilir. Yuvarlanarak karbon nanotüp oluşturulduğunda daire çevresinde karbon atomları, elektronların kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları da uyumlu olarak düzenlenir. Radyal doğrultularda, elektronlar inceltilmiş tek katmanlı grafit düzlem tarafından sınırlandırılmıştır. TDKNT'lerin elektronik yapıları, 2 boyutlu grafinden elde edilebilir. Tüp eksenı doğrultusundaki dalga vektörleri (T vektörü) sonsuz tüp için süreklidir. Bir KNT'nin boyu sonlu olduğundan (L), ayırık $\vec{k}$ dalga vektörleri beklenebilir.

$$\Delta k = 2\pi/L \quad (2.7)$$

BÖLÜM 3

SİMÜLASYON SONUÇLARI

Bu tez çalışmasında (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin ve gerinim uygulanan (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin fiziksel ve elektronik özellikleri Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından yazılan Parelel N-Mertebeli Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemi ile incelendi. Simülasyon süresini saptayan moleküler dinamik adımı 1fs olarak seçildi. Simülasyon programında zigzag nanoşerit TDKN'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (nlayer) 5 olarak seçildi. Simülasyonlarda, (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ler için 50000 moleküler dinamik simülasyon adımları çalışıldı. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) nanoşerit KNT'lerin 300K 'de ortalama enerji değerleri lineer fit alınarak hesaplanmıştır ve sırasıyla; -7,7374, -7,8797, -7,9076, -7,8389 ve -7,9261 eV değerindedir. Fermi enerji değerleri sırasıyla 3,4105, 3,1720, 3,3045, 3,2145, 3,3555, 3,3315 eV değerindedir bu değerler civarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafiklerine bakılarak zigzag nanoşerit TDKNT'lerin elektronik özellikleri gözlemlendi. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüplerde metalik davranış, gözlenmiyorsa yarı iletken davranış beklenir. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde eğimlerdeki değişiklikler bize orada bir durum yoğunluğu olduğu bilgisini verir.

Her bir zigzag nanoşerit TDKNT için BADF, BUDF, RDF ve AKS grafikleri çizilmiştir. 300K sıcaklıkta bağ- açısı dağılım fonksiyonu KNT'nin altıgen örgüsü yapısından dolayı (10,0), (11,0), (13,0), (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerde 119.4° derece değerinde pik

yapmaktadır. (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT’de $118,2^\circ$; ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT’de $118,2^\circ$ ve $121,8^\circ$ değerlerinde pik yapmaktadır. Bağ-uzunluğu dağılım fonksiyonu $1.42\text{\AA}$ değerinde bir pik yapmaktadır. Altıgen bir örgüde her karbon atomu komşu atomlarla üç bağ yapmaktadır. Atomik koordinasyon grafikleri incelendiğinde Şekil 3.4’te ve Şekil 3.20’de referans alınan bir karbon atomu etrafındaki 2 karbon atomu ile komşudur, bu nedenle dağılım fonksiyonlarında 2 civarında dağılımlar gözlemlenmektedir. Sistem 50000 MD adımda kararlı enerji seviyesine ulaştıktan sonra seçilen (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT üzerine 10000 adım moleküler dinamik adım süresince gerinim uygulanarak, seçilen tüplerin elektronik özellikleri incelendi. Uygulanan gerinim etkisi altında zigzag nanoşerit TDKNT’lerin yapısal kararlılıklarının bozulup bozulmadığı tespit edildi.

3. Kiralitenin Fiziksel ve Elektronik Özelliklere Etkisi

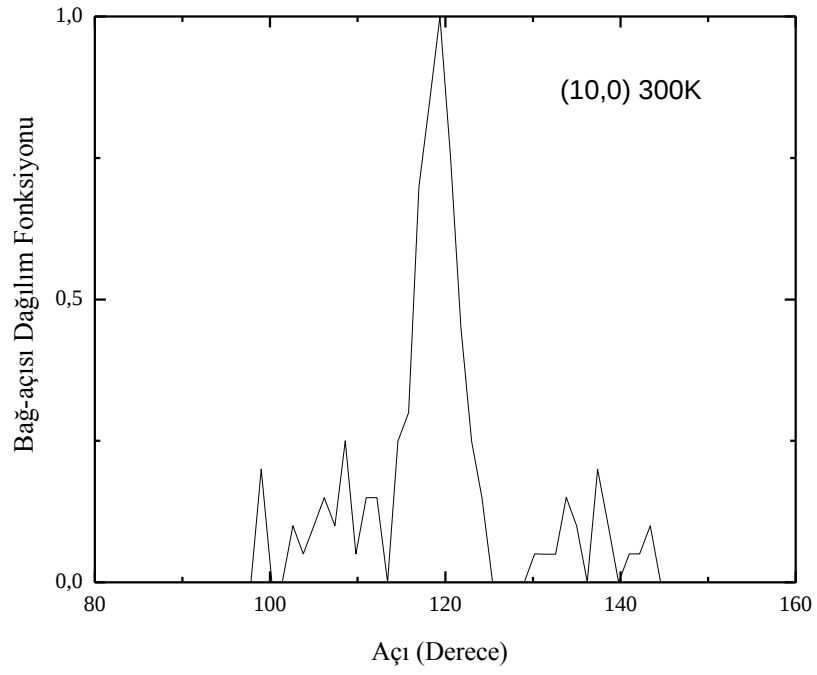
3.1.1 (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel Özellikleri

KNT’ yi meydana getiren grafin levhanın bir altıgen örgüsünde bağlar arasındaki açı 120° derecedir. 300K sıcaklığında (10,0), (11,0), (13,0) ve (14,0) zigzag nanoşerit TDKNT’ler için bağ açısı dağılım fonksiyonları sırasıyla Şekil 3.1, Şekil 3.5, Şekil 3.9, Şekil 3.13’te görülmektedir. (17,0) zigzag nanoşerit TDKNT için bağlar arasındaki açı $118,2^\circ$ derece olarak Şekil 3.17’de gösterilmiştir. Şekil 3.21 incelendiğinde (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT için bağlar arasındaki açı $118,2^\circ$, $121,8^\circ$ değerlerinde pik yapmaktadır. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT’lerde 300K sıcaklıkta bağ-uzunluğu dağılım fonksiyonu $1.44\text{\AA}$ değerinde bir pik yaptığını Şekil 3.2, Şekil 3.6, Şekil 3.10, Şekil 3.14 ve Şekil 3.18, Şekil 3.22’te gözlemliyoruz. Atomik koordinasyon sayısı grafikleri incelendiğinde; Şekil 3.8, Şekil 3.12 ve Şekil 3.16’da referans alınan atomun komşu atomlarla 3 bağ yaptığı gözlemlenmektedir. Şekil 3.4’te ve Şekil 3.20’de referans alınan bir karbon atomu etrafındaki 2 karbon atomu ile komşudur, bu nedenle dağılım fonksiyonlarında 2 civarında dağılımlar gözlemlenmektedir. Radyal dağılım fonksiyonuna göre Şekil 3.3’te (10,0) zigzag nanoşerit TDKNT için atomlar arası uzaklıklara ait ilk 3 tepe sırasıyla $2.48\text{\AA}$, $2.82\text{\AA}$,

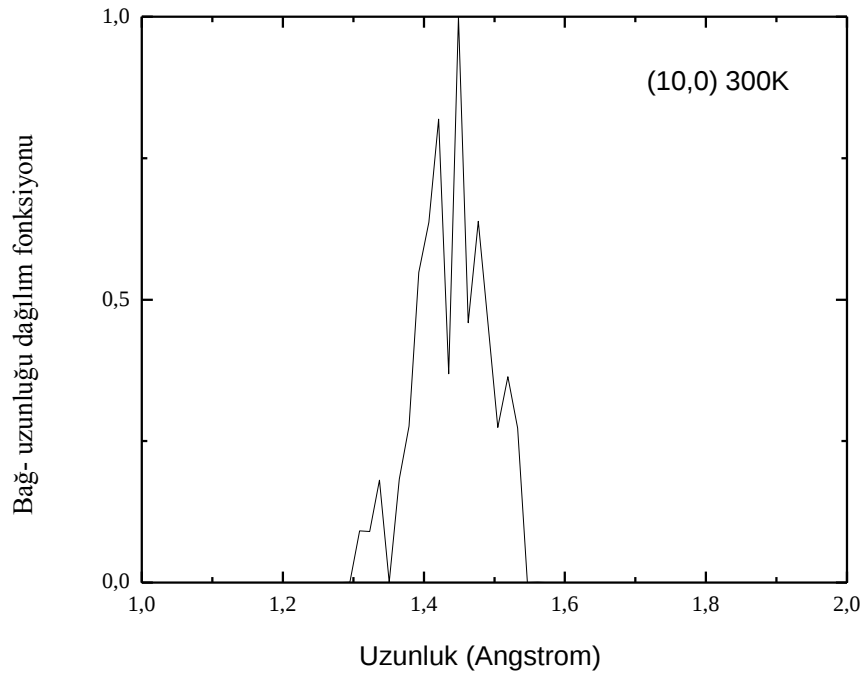
3.69Å değerlerinde olduğu görüldü. Şekil 3.7’de (11,0) zigzag TDKNT için atomlar arası uzaklıklara ait ilk 3 tepe sırasıyla 2.44Å, 2.82Å, 3.19Å değerlerinde olduğu görüldü. Benzer şekilde (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT’lerin radyal dağılım fonksiyonları sırasıyla Şekil 3.11, Şekil 3.15, Şekil 3.19, Şekil 3.23’te gösterilmiştir. Çizelge 3.1’de (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT’lerin atom sayıları sırasıyla; 50, 55, 65, 70, 85 ve 140 bulunmuştur, kiraliteye bağlı olarak atom sayıları artmaktadır. Yarıçapları sırasıyla 3,93058, 4,32054, 5,10116, 5,49172, 6,66401 ve 10,96616; ve boyları 4,26Å’dır. Şekil 3.25’te sırasıyla (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT’lerin simülasyon görüntüleri verilmiştir.

Çizelge 3. 1 Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel özellikleri

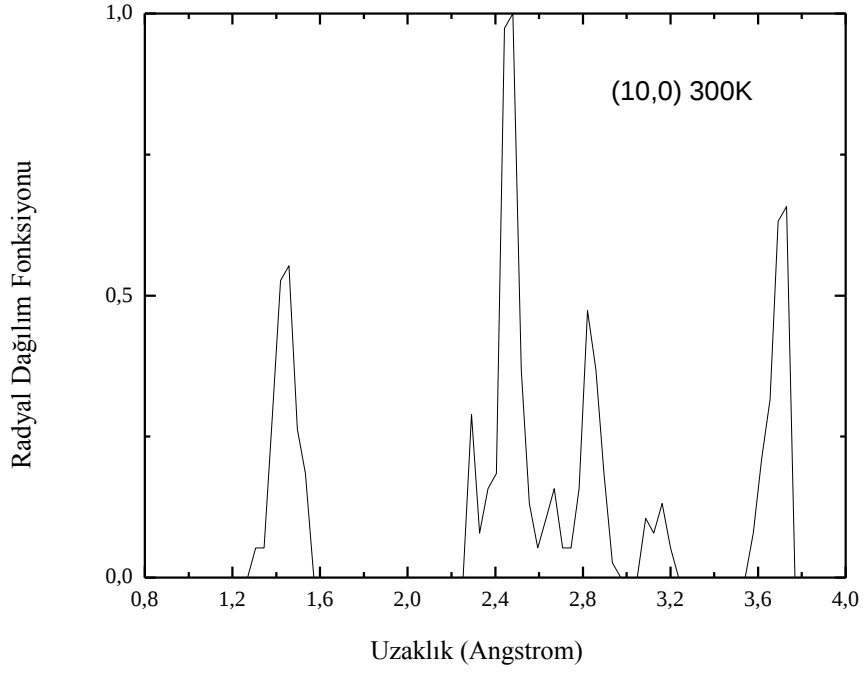
<i>Kiralite</i>	<i>Atom sayısı (N)</i>	<i>Yarıçapı (Simülasyon) (Å)</i>	<i>Boy (Å)</i>	<i>Buffer Skin Size</i>
(10,0)	50	3,93058	4,26	4,3
(11,0)	55	4,32054	4,26	4,5
(13,0)	65	5,10116	4,26	4,6
(14,0)	70	5,49172	4,26	4,5
(17,0)	85	6,66401	4,26	4,6
(28,0)	140	10,96616	4,26	4,8



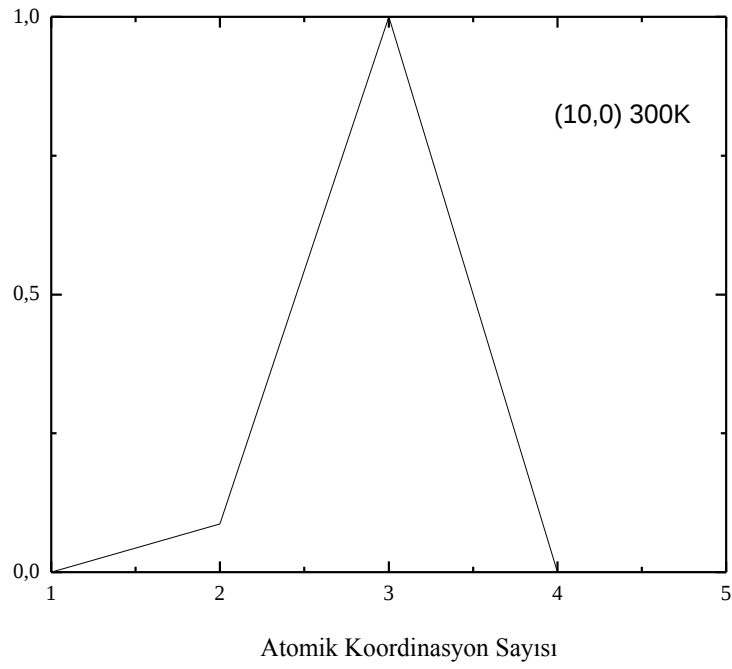
Şekil 3. 1 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



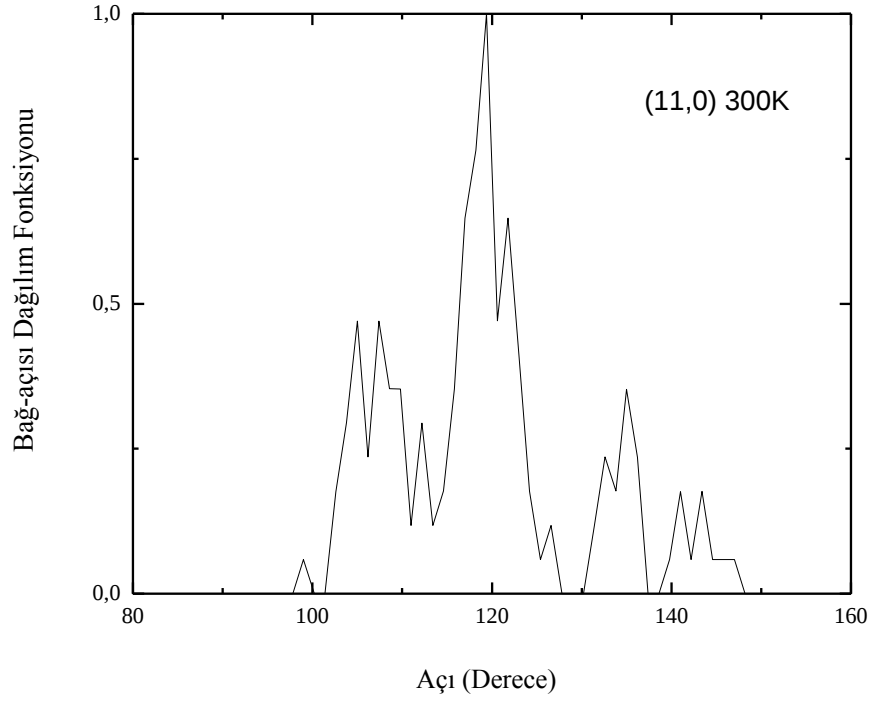
Şekil 3. 2 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



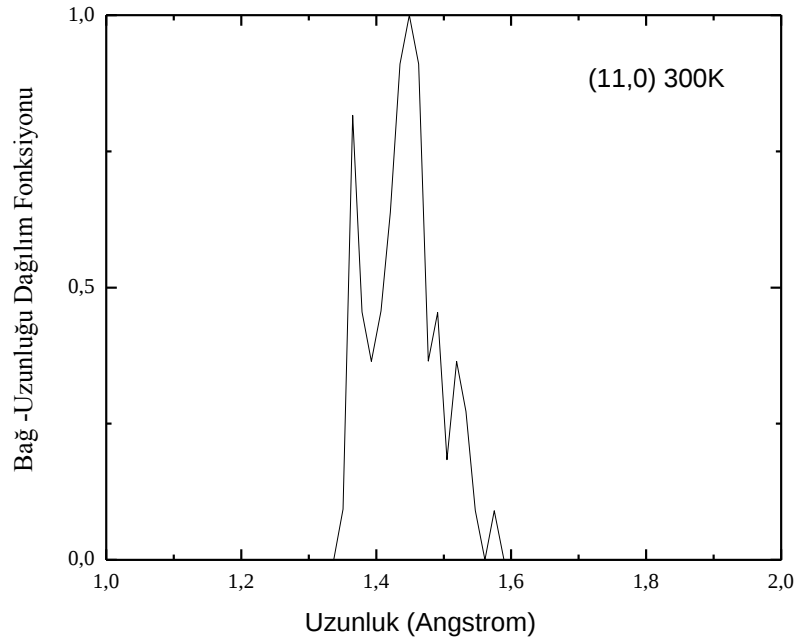
Şekil 3. 3 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



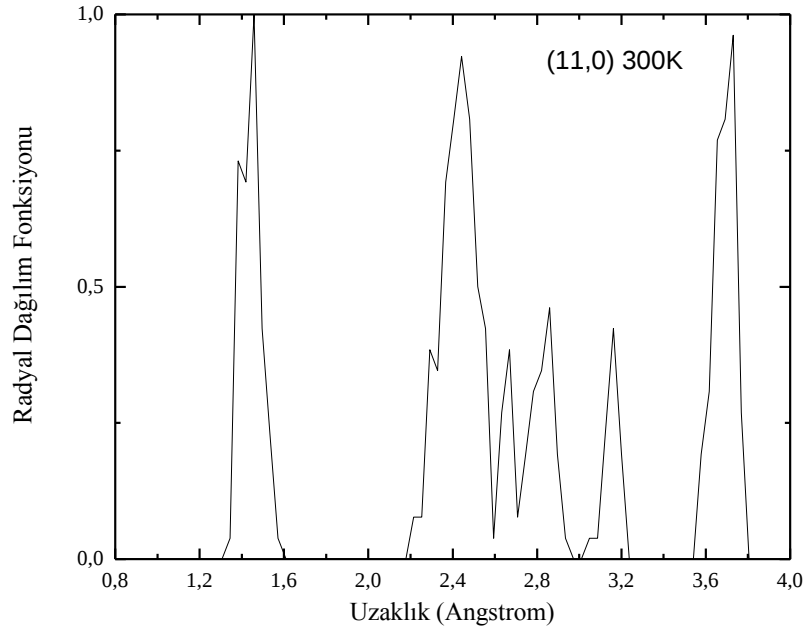
Şekil 3. 4 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



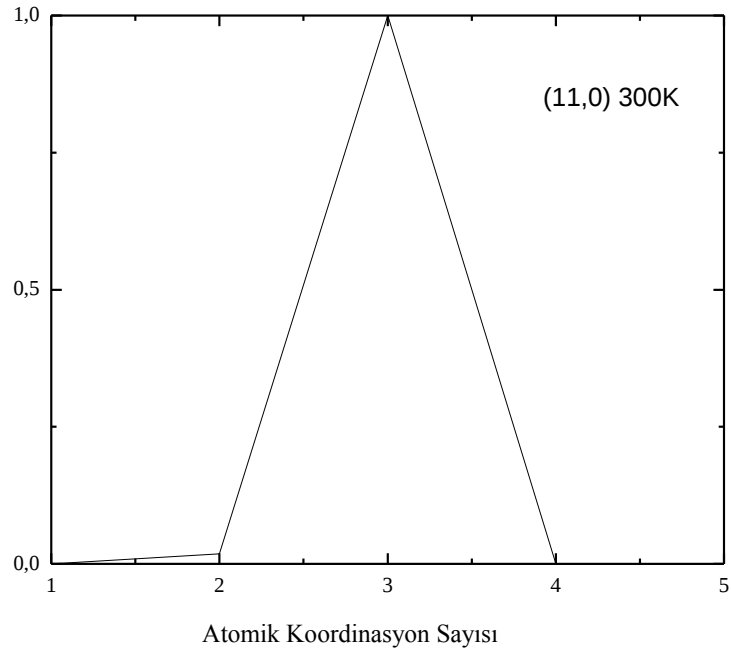
Şekil 3. 5 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



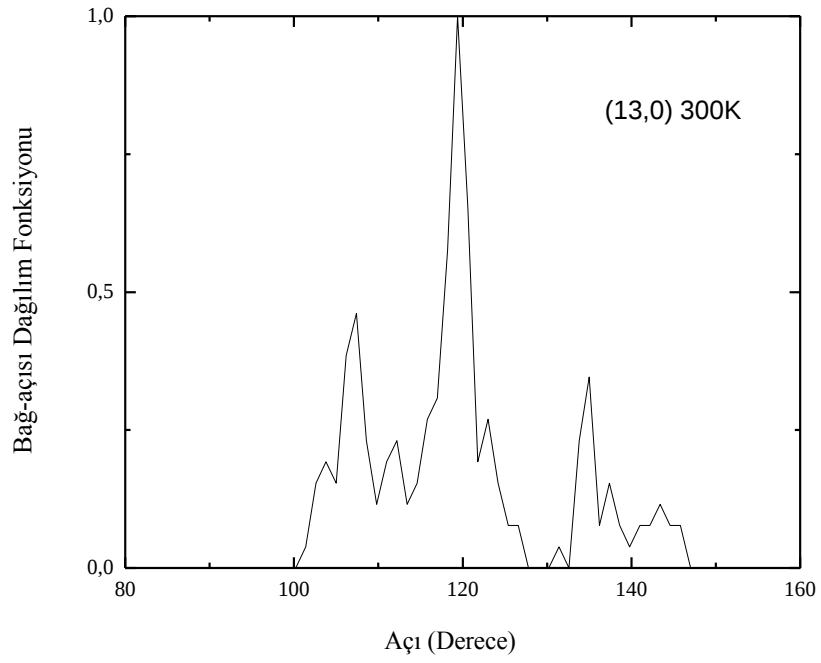
Şekil 3. 6 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



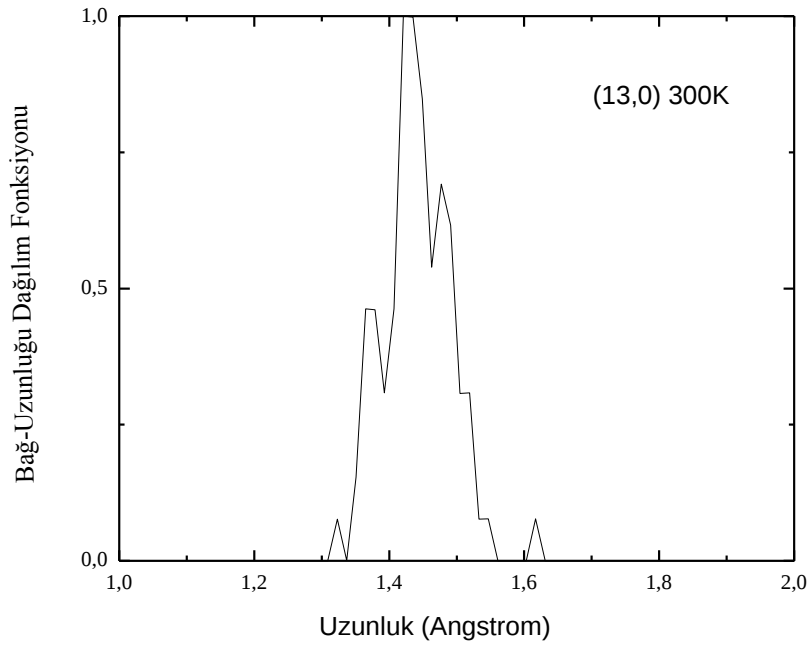
Şekil 3. 7 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



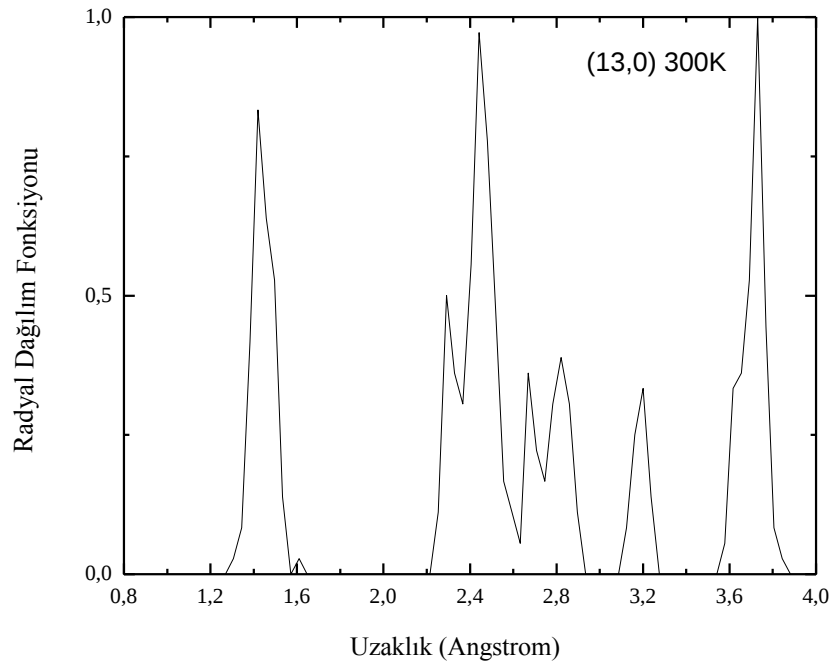
Şekil 3. 8 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



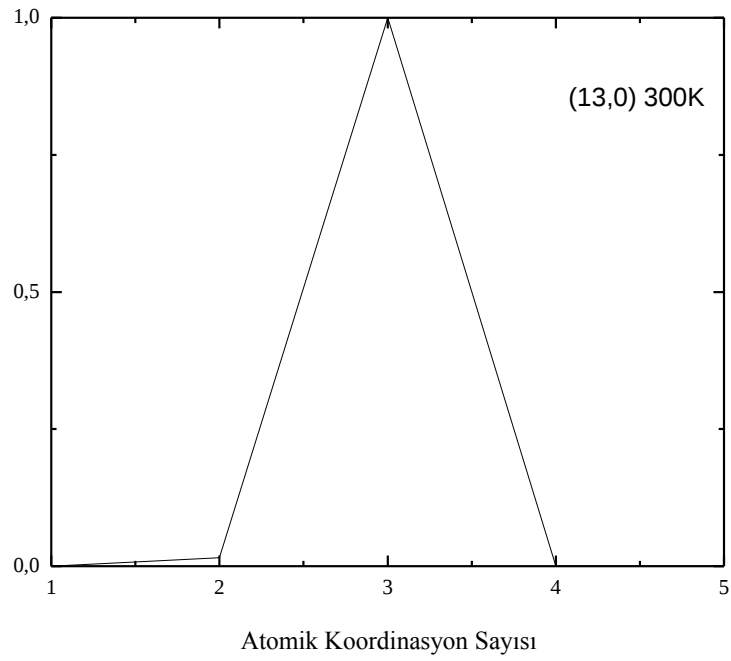
Şekil 3. 9 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



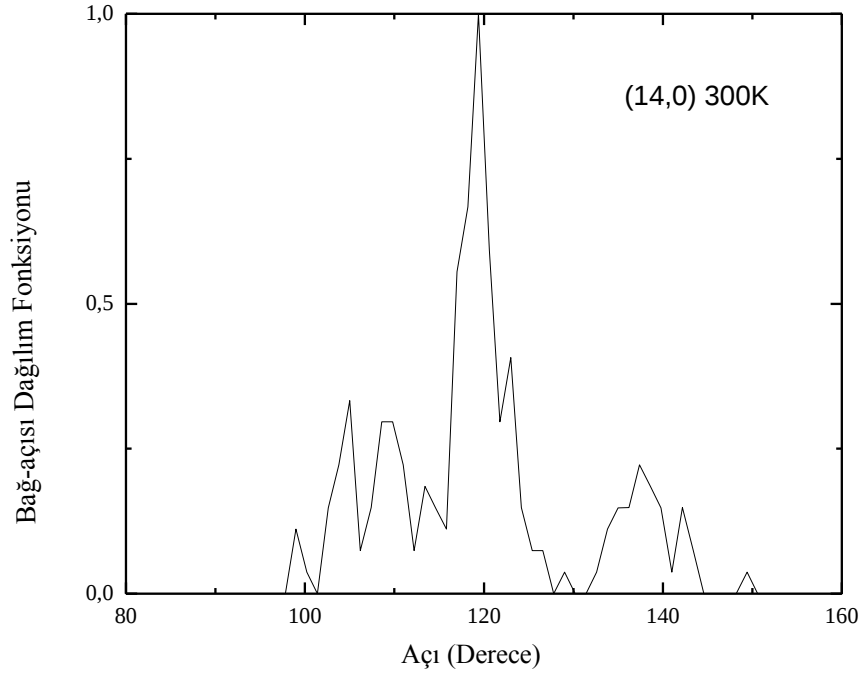
Şekil 3. 10 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



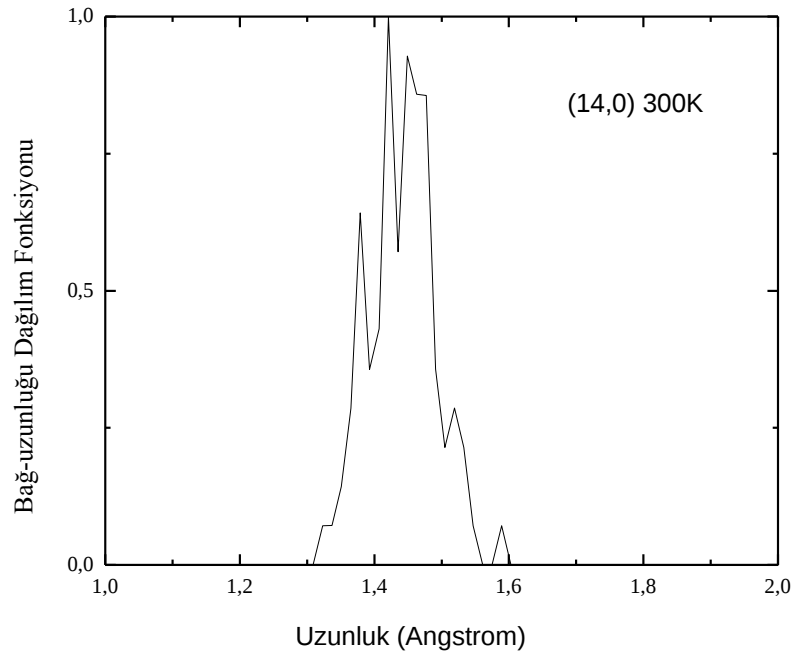
Şekil 3. 11 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



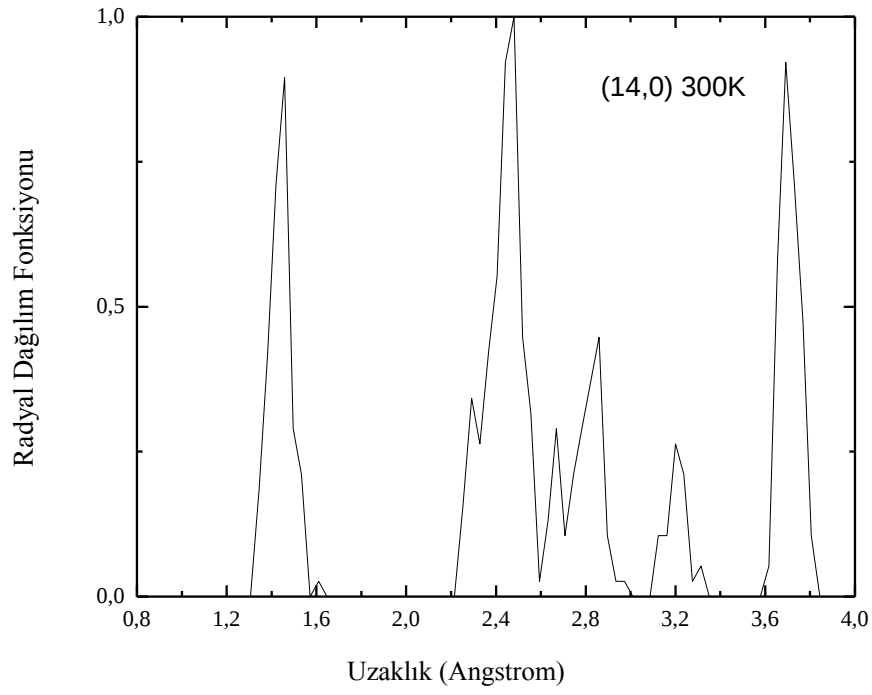
Şekil 3. 12 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



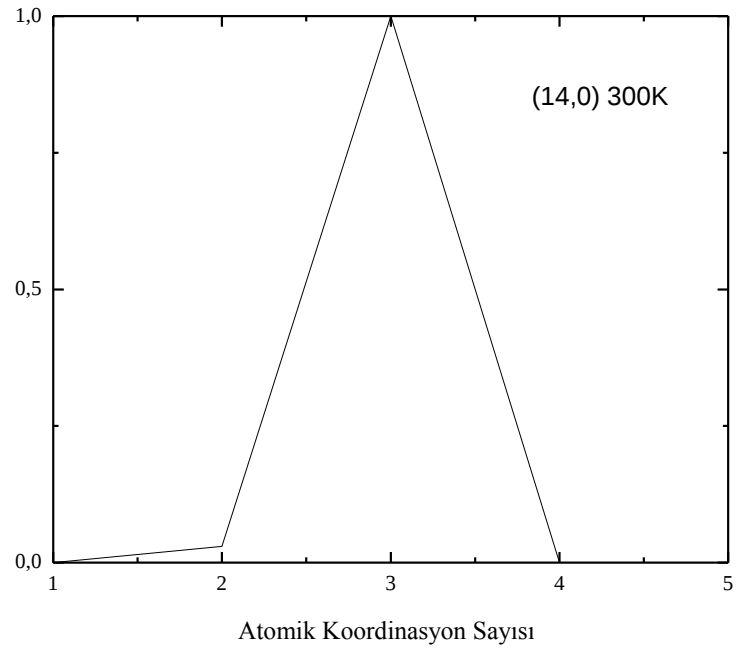
Şekil 3. 13 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



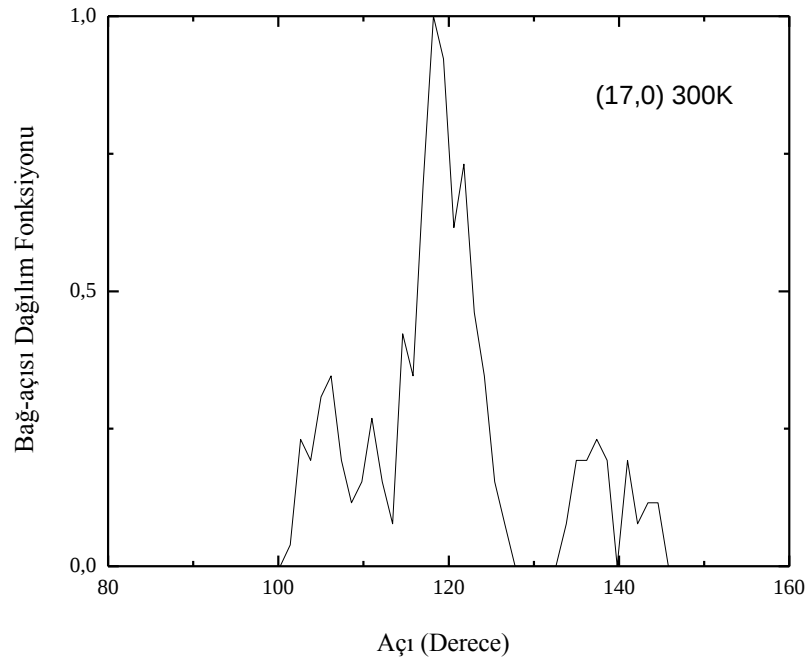
Şekil 3. 14 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



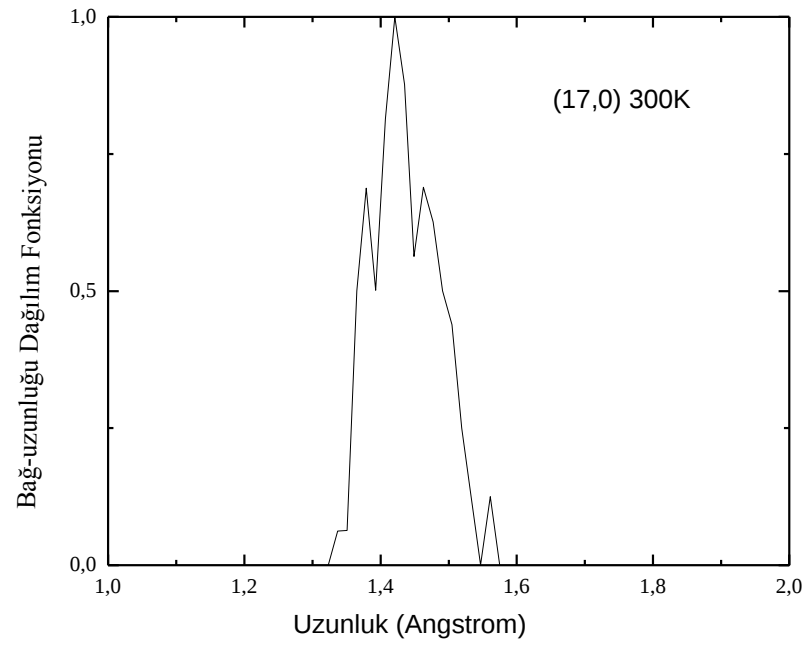
Şekil 3. 15 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



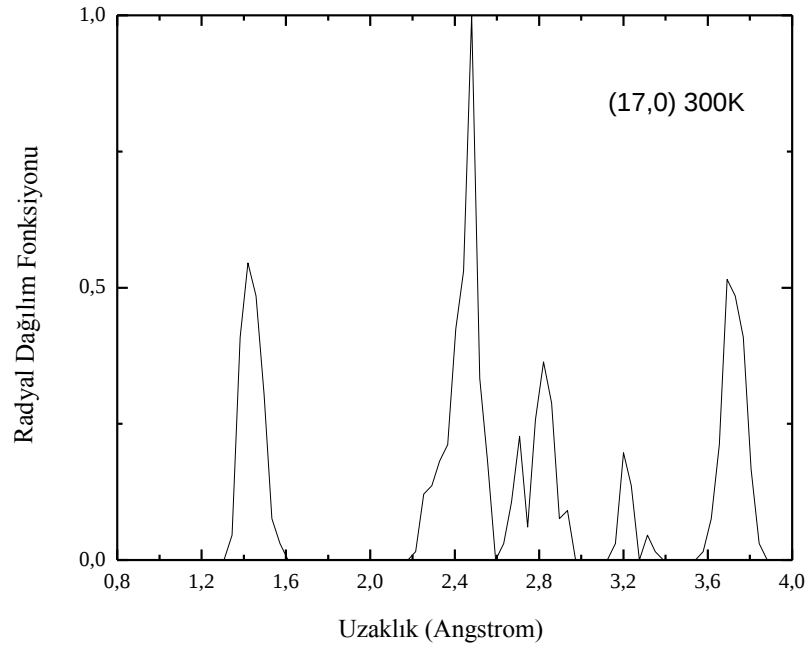
Şekil 3. 16 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



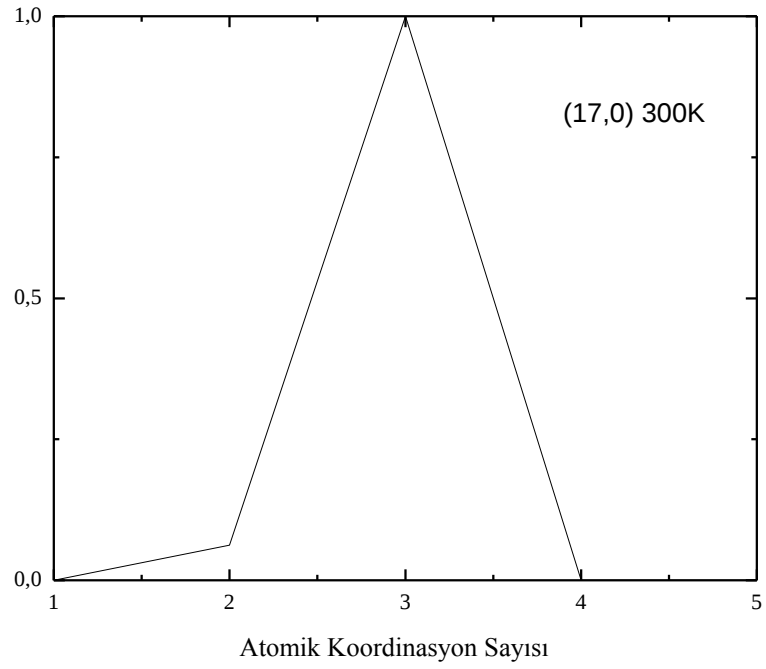
Şekil 3. 17 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



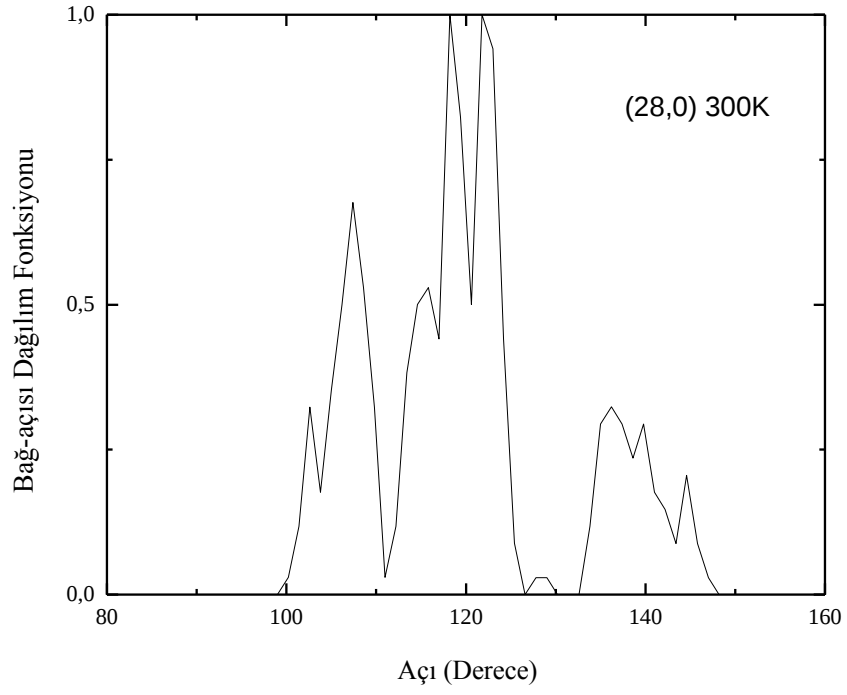
Şekil 3. 18 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



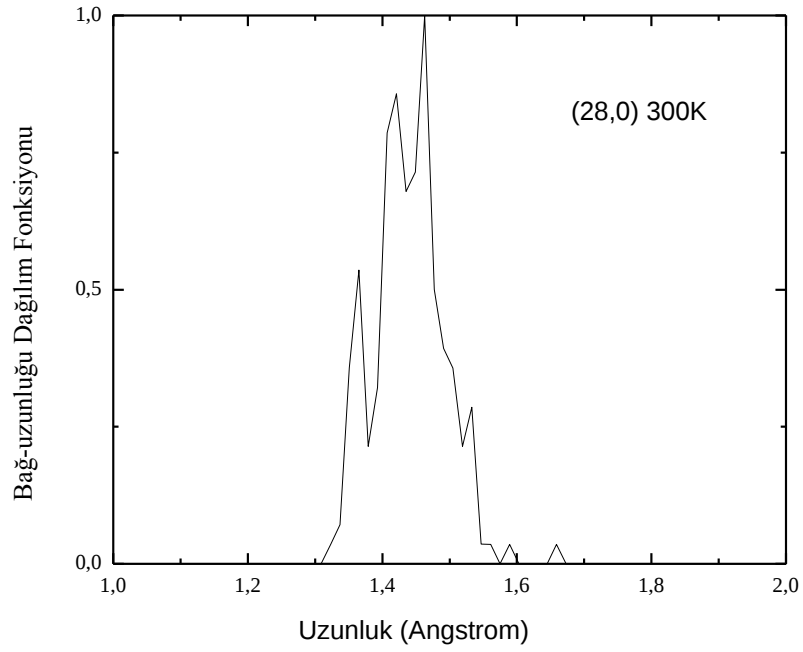
Şekil 3. 19 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



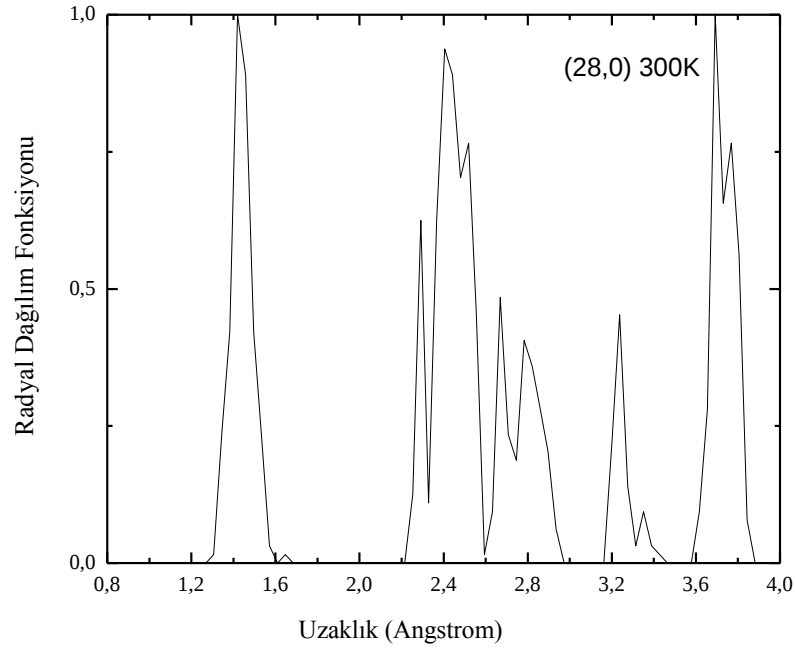
Şekil 3. 20 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



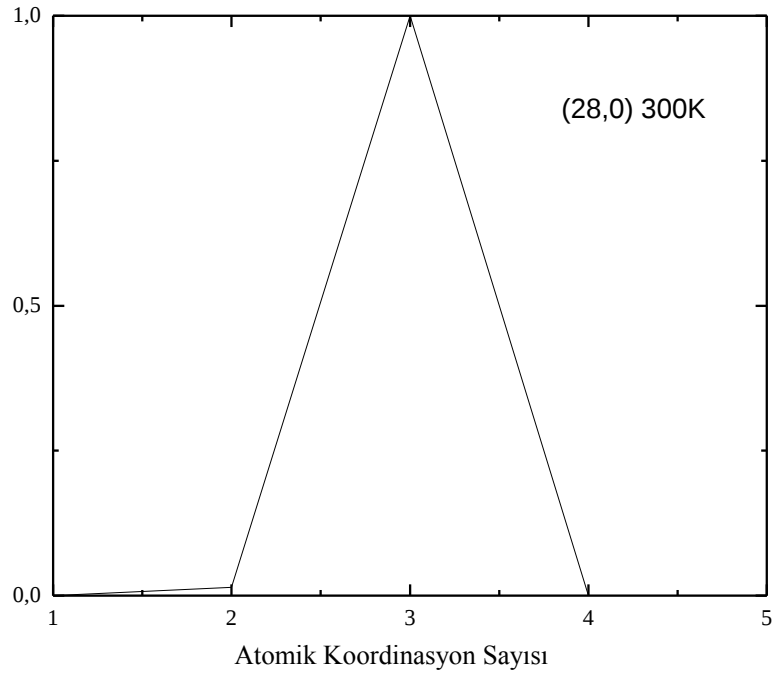
Şekil 3. 21 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu



Şekil 3. 22 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Bağ-uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



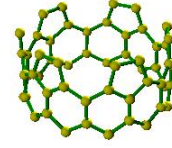
Şekil 3. 23 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



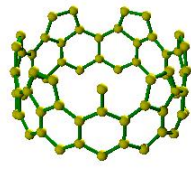
Şekil 3. 24 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin Atomik Koordinasyon Sayısı



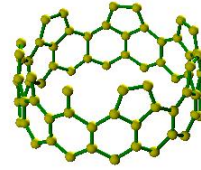
(10,0)



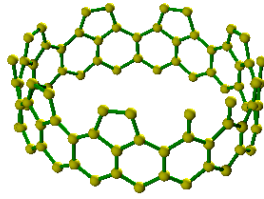
(11,0)



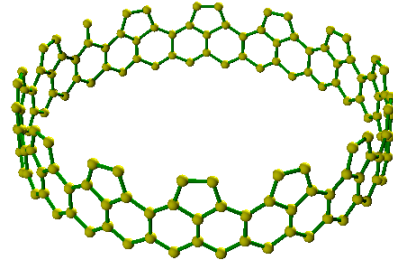
(13,0)



(14,0)



(17,0)



(28,0)

Şekil 3. 25 (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit

TDKNT'lerin Simülasyon görüntüleri

3.1.2 (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı

Karbon Nanotüplerin Elektronik Özellikleri

Simülasyon programında zigzag nanoşerit TDKN'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (nlayer) 5 olarak seçildi. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüplerin denge durumundaki ortalama enerji grafikleri Şekil 3.26-3.31'de gösterilmiştir. Şekillerdeki lineer fit, 50000 MD adım boyunca ortalama enerjiyi göstermektedir ve sırasıyla; -7,7374, -7,8797, -7,9076, 7,8861, -7,8389 ve -7,9261 eV değerleri bulunmuştur. Fermi enerji değerleri (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpler için sırasıyla 3,4105, 3,1720, 3,3045, 3,2145, 3,3555 ve 3,3315 eV değerinde bulunmuştur. Moleküler dinamik adımına bağlı fermi enerji grafikleri Şekil 3.32-3.37'de gösterilmiştir. Şekil 3.38'den 3.41'e kadar 300K'de elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri (10,0), (13,0), (14,0), (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpler için çizilmiştir. Fermi seviyeleri grafikler üzerinde okla işaretlenmiştir. Bu grafikler bize fermi enerjisi civarında yerleşmiş durumların olup olmadığına dair bilgi vermektedir. Buda KNT'lerin metal, yarı iletken, veya metalik yarı iletken özellik göstermeleri ile ilgili bilgiler vermektedir. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde eğimlerdeki değişiklikler bize orada bir durum yoğunluğu olduğu bilgisini verir. Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa karbon nanotüplerde metalik davranış, gözlenmiyorsa yarıiletken davranış gözlenmesi beklenir. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'lerin metalik yarı iletken olduğu tespit edilmiştir. Bu grafiklerden elde edilen enerji bant aralıkları değerleri Çizelge 3.2'te verilmiştir. Zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüplerin boyunu belirleyen katman sayısı (nlayer) 5 olarak seçildiğinde (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpler için enerji bant aralığı değerleri sırasıyla; 0,05, 0,06, 0,07, 0,11, 0,04, 0,10 (eV) bulunmuştur. Katman sayısı (nlayer) 20 olarak seçildiğinde 3000 moleküler dinamik simülasyon adımında (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpler için Çizelge 3.3'te ortalama enerji, fermi enerji ve band aralığı değerleri verilmiştir. Denge durumundaki ortalama enerji grafikleri sırasıyla; -8,20792, -8,22670, -8,25567, -8,26493, -8,78388 ve -8,84234 eV değerlerinde bulunmuştur. Fermi enerji değerleri 3,6940, 3,7090, 3,7111,

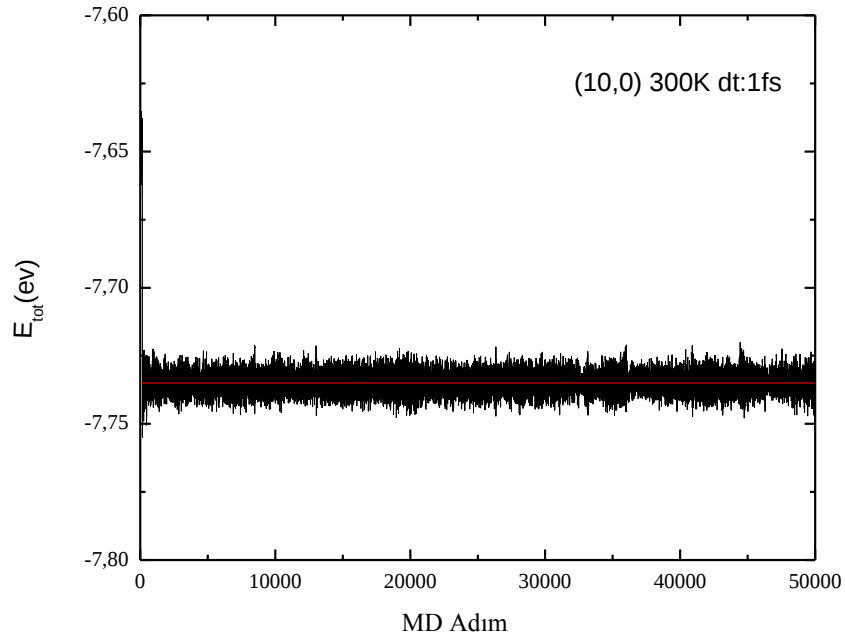
3,7109, 3,7108 ve 3,8205 bulunmuştur ve enerji bant aralığı değerleri 0,58, 0,66, 0,45, 0,43, 0,35, 0,24 eV bulunmuştur. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag tek duvarlı karbon nanotüplerin bant aralığı değerleri 20 katman (n layer)'da artmıştır.

Çizelge 3. 2 Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Ortalama enerji Fermi enerji ve Enerji Bant Aralığı Değerleri (5 katman)

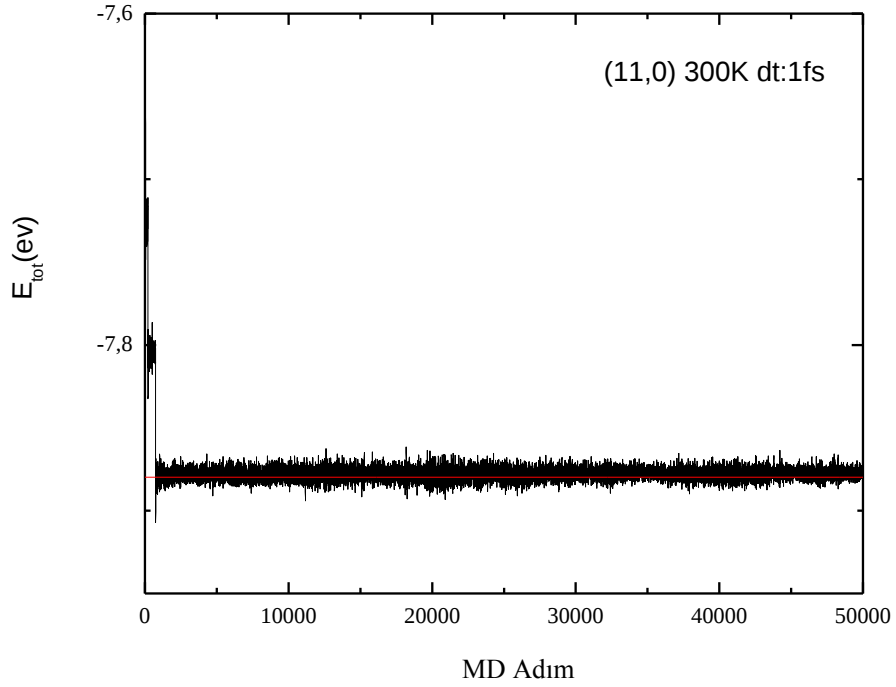
<i>Kiralite</i>	<i>MD Step</i>	<i>E_{tot}</i>	<i>E_{fermi}</i>	<i>E_{gap}(eV)</i>
(10,0)	50000	-7,7374	3,4105	0,05
(11,0)	50000	-7,8797	3,1720	0,06
(13,0)	50000	-7,9076	3,3045	0,07
(14,0)	50000	-7,8861	3,2145	0,11
(17,0)	50000	-7,8389	3,3555	0,04
(28,0)	50000	-7,9261	3,3315	0,10

Çizelge 3. 3 Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Ortalama enerji Fermi enerji ve Enerji Bant Aralığı Değerleri (20 katman)

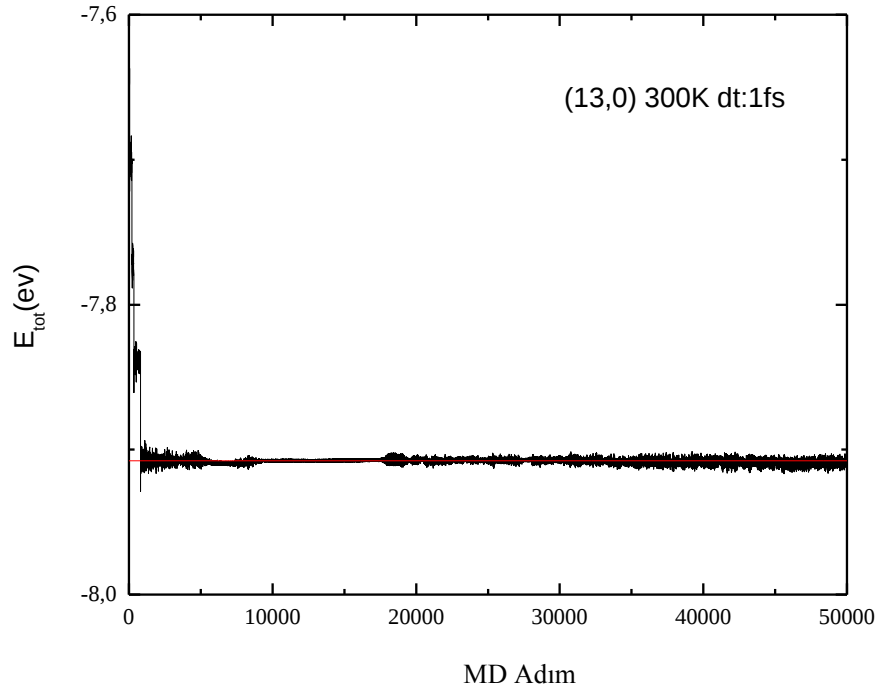
<i>Kiralite</i>	<i>MD Step</i>	<i>E_{tot}</i>	<i>E_f</i>	<i>E_{gap}(eV)</i>
(10,0)	3000	-8,20792	3,6940	0,58
(11,0)	3000	-8,22670	3,7090	0,66
(13,0)	3000	-8,25567	3,7111	0,45
(14,0)	3000	-8,26493	3,7109	0,43
(17,0)	3000	-8,78388	3,7408	0,35
(28,0)	3000	-8,84234	3,8205	0,24



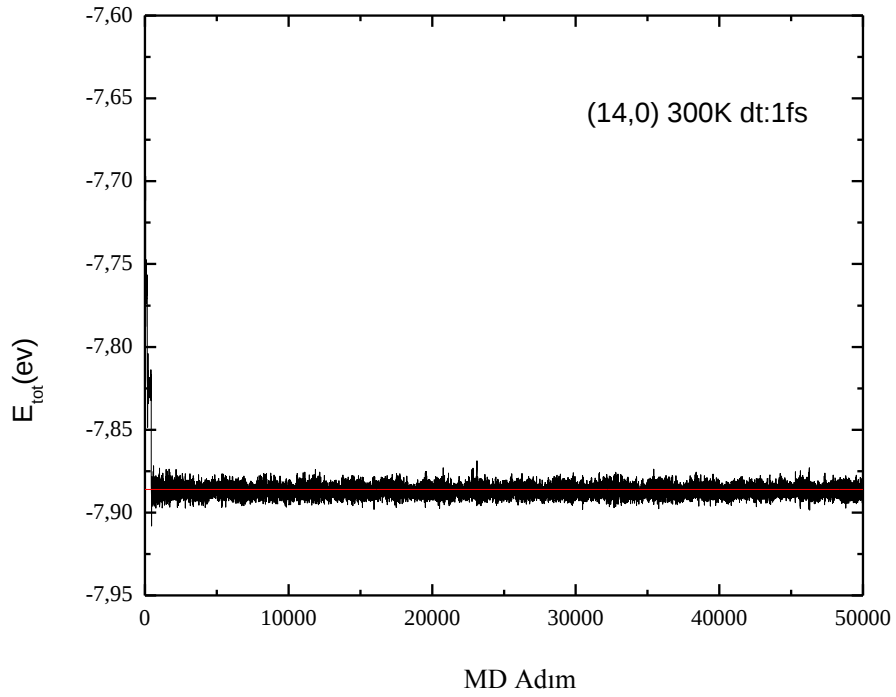
Şekil 3. 26 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.3 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



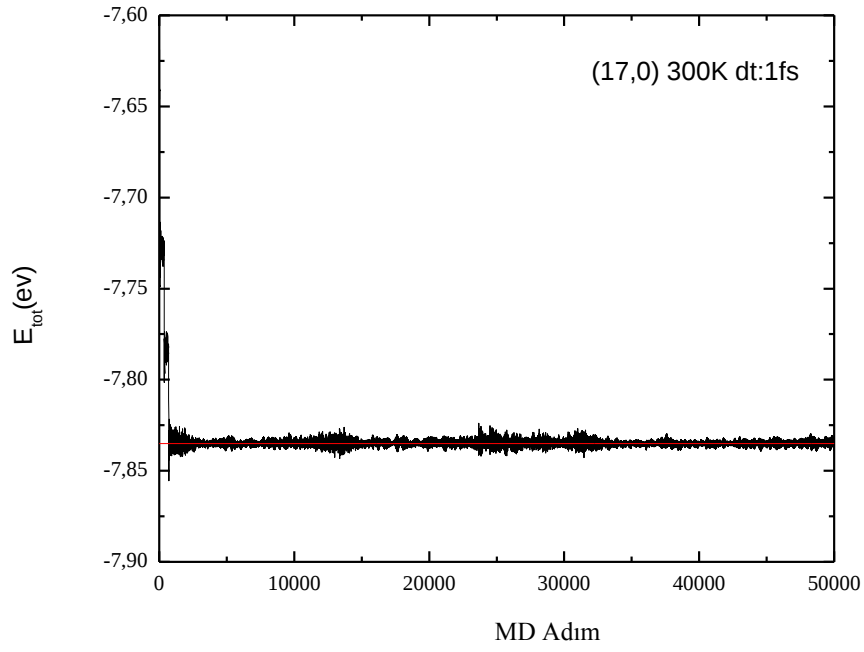
Şekil 3. 27 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



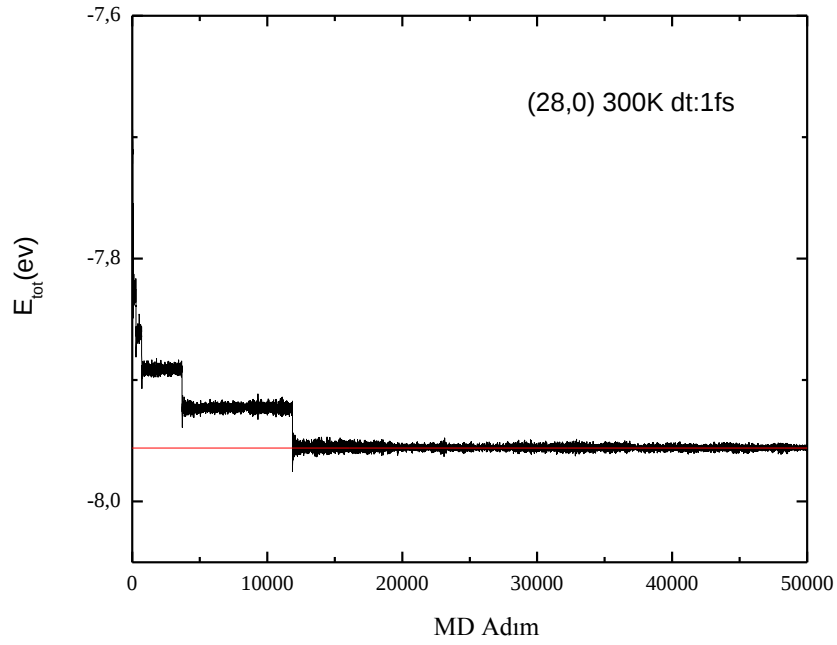
Şekil 3. 28 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



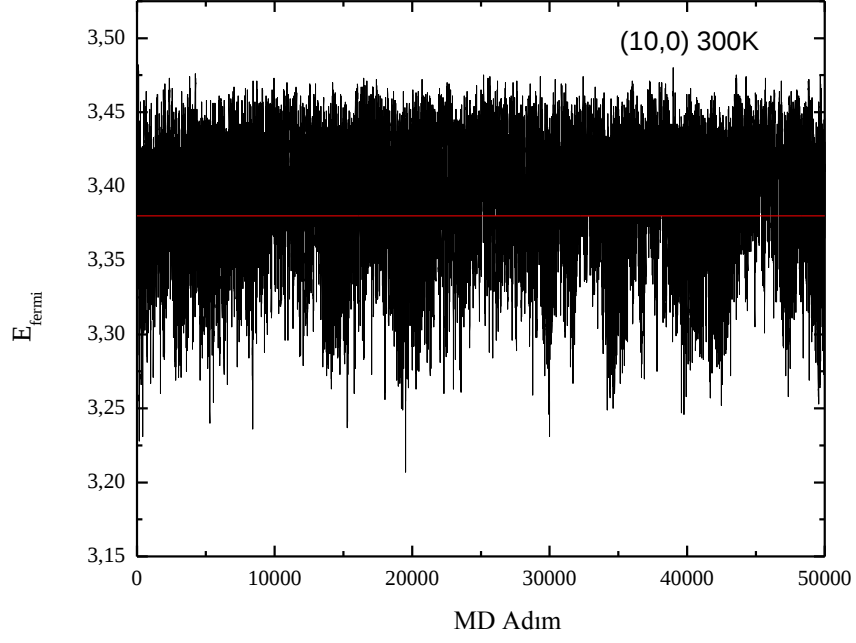
Şekil 3. 29 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



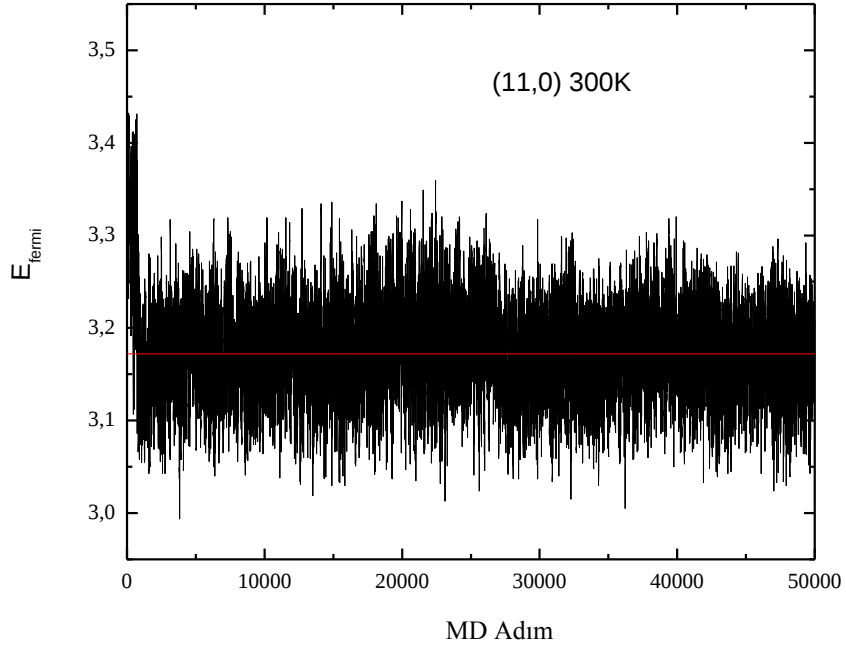
Şekil 3. 30 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



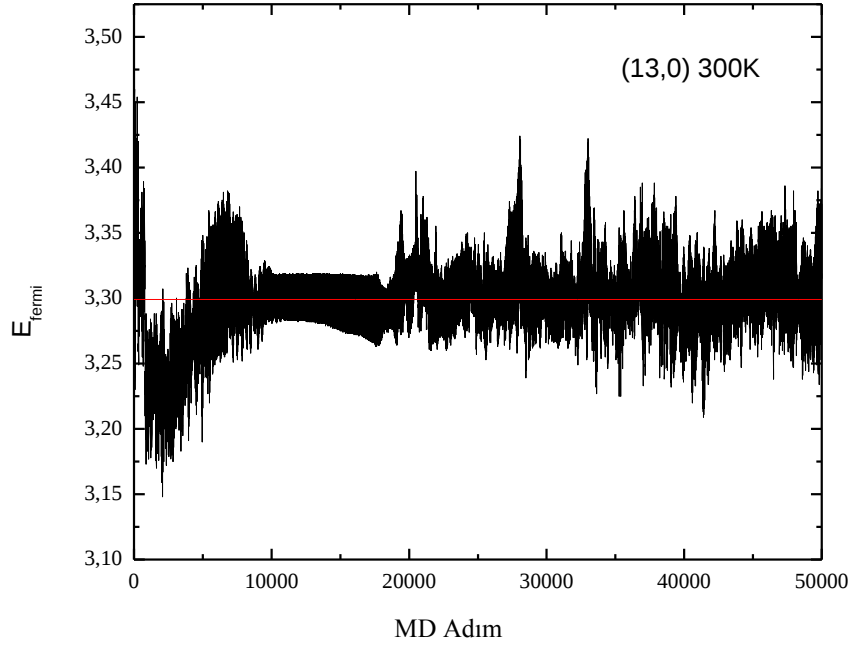
Şekil 3. 31 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{tot} grafikleri



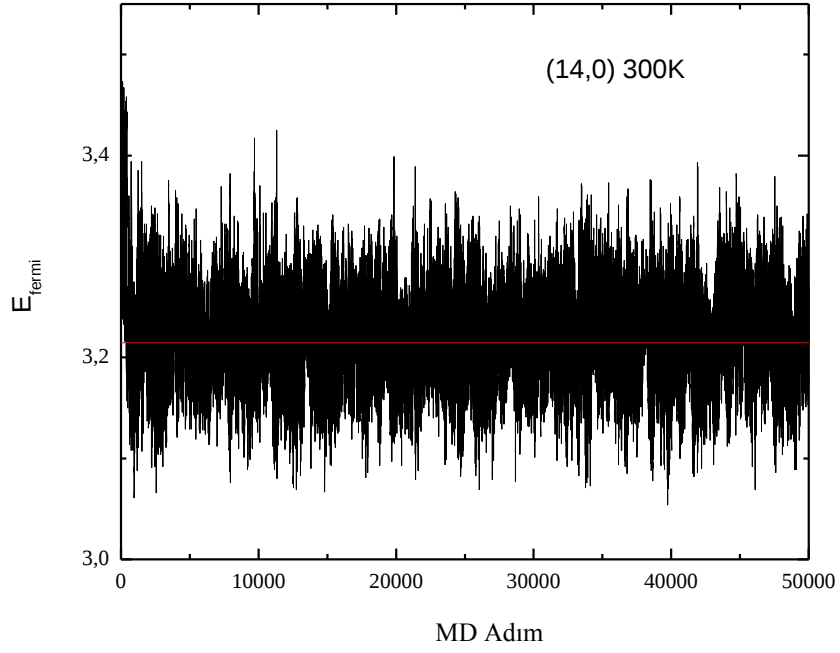
Şekil 3. 32 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



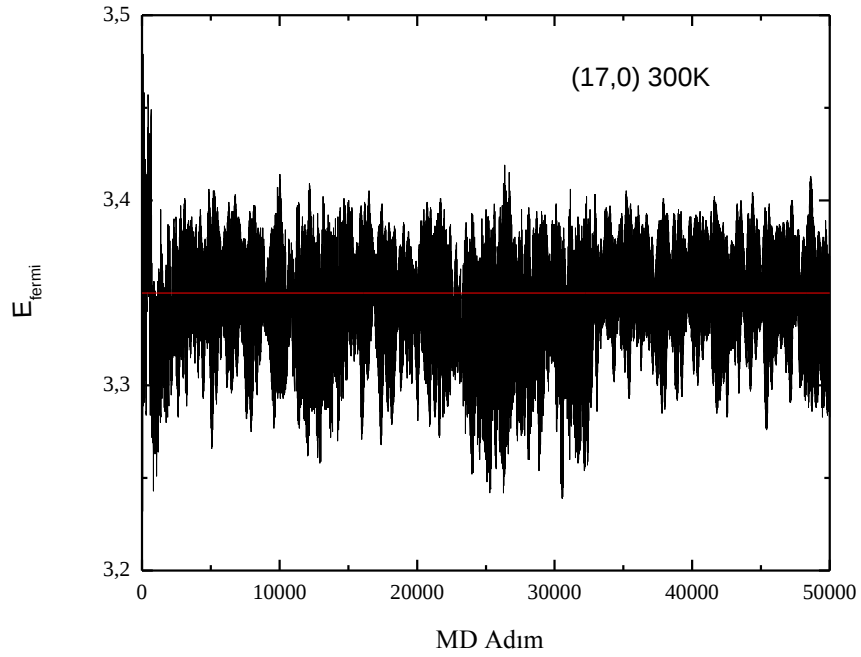
Şekil 3. 33 (11,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



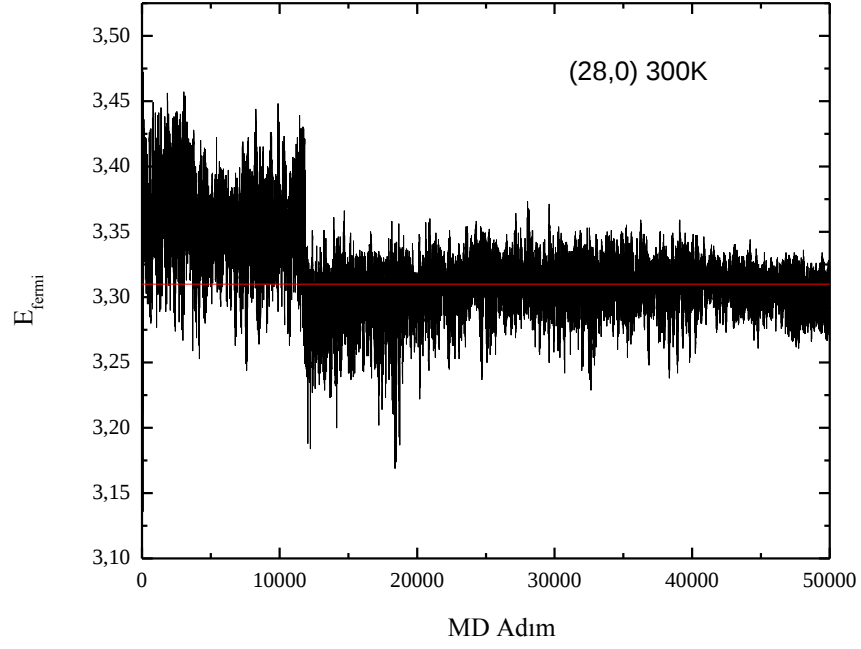
Şekil 3. 34 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



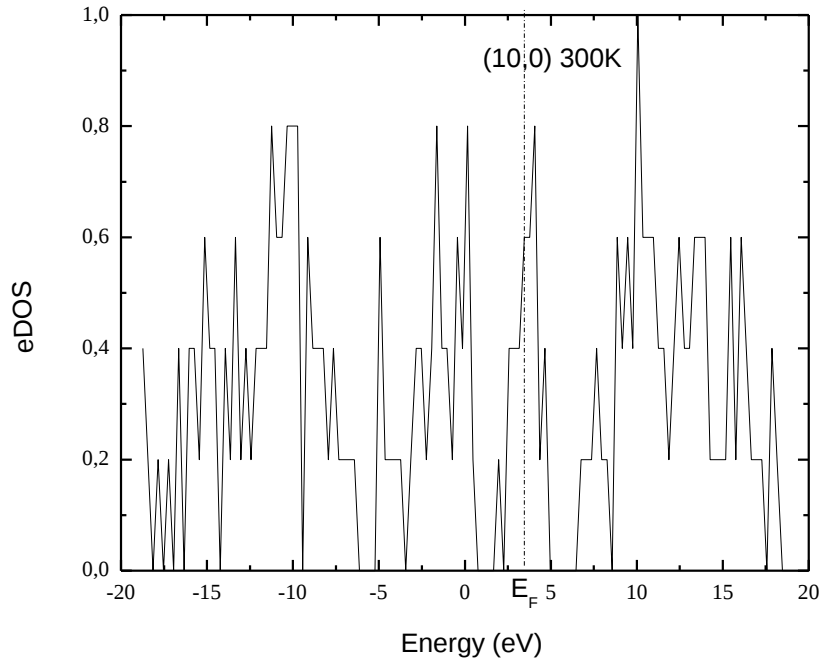
Şekil 3. 35 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



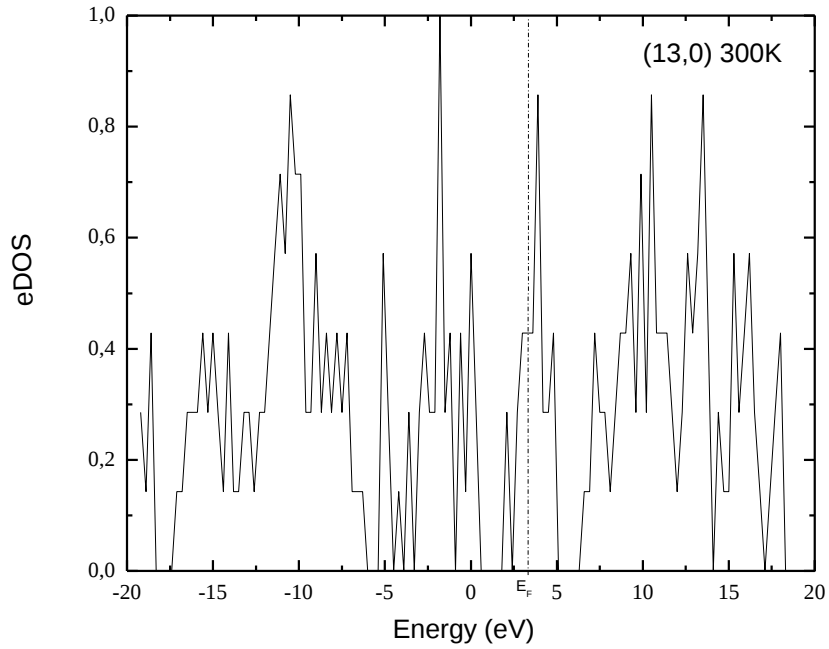
Şekil 3. 36 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 dt: 1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



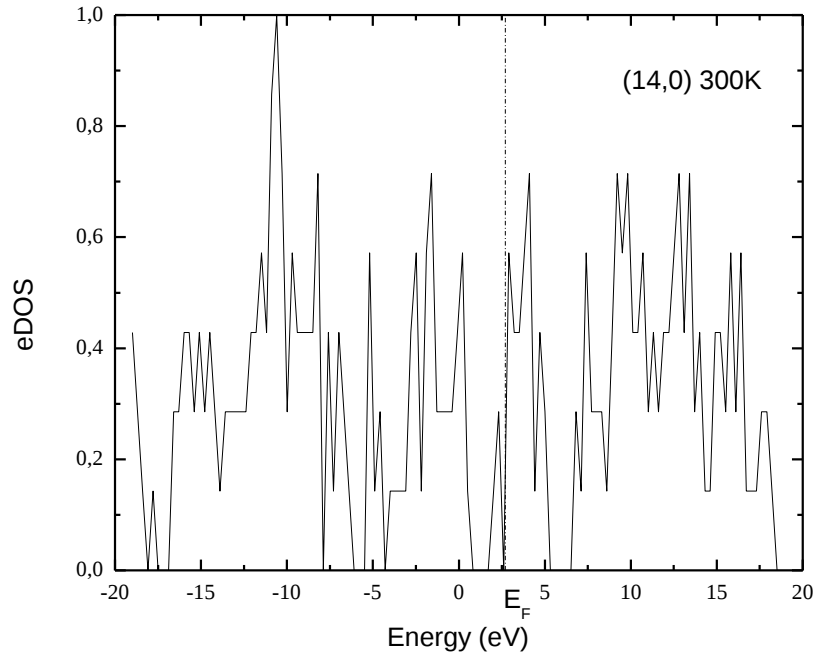
Şekil 3. 37 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8, MD adım: 50000 dt:1fs çalışmaları için E_{fermi} grafikleri



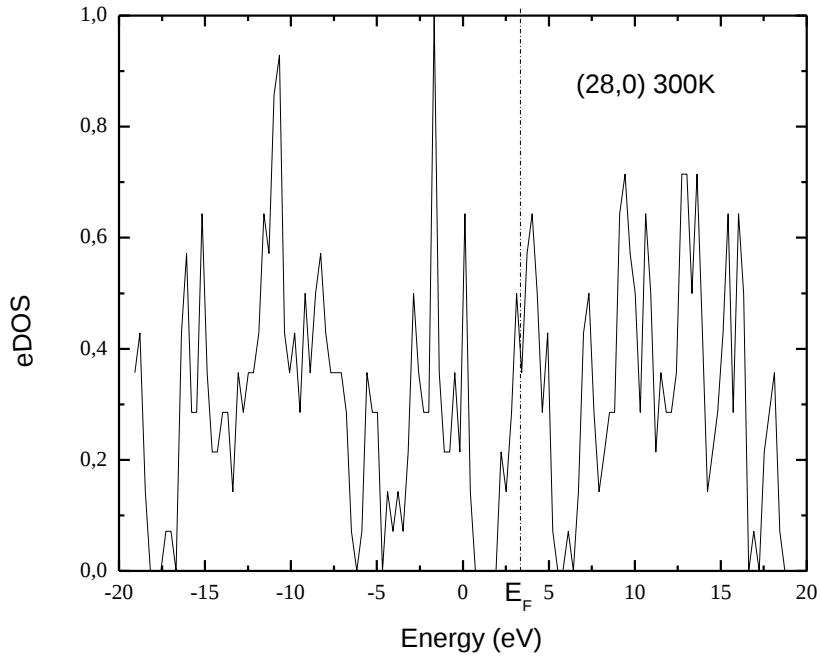
Şekil 3. 38 (10,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000, dt: 1fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 3. 39 (13,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 3. 40 (14,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.5 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri

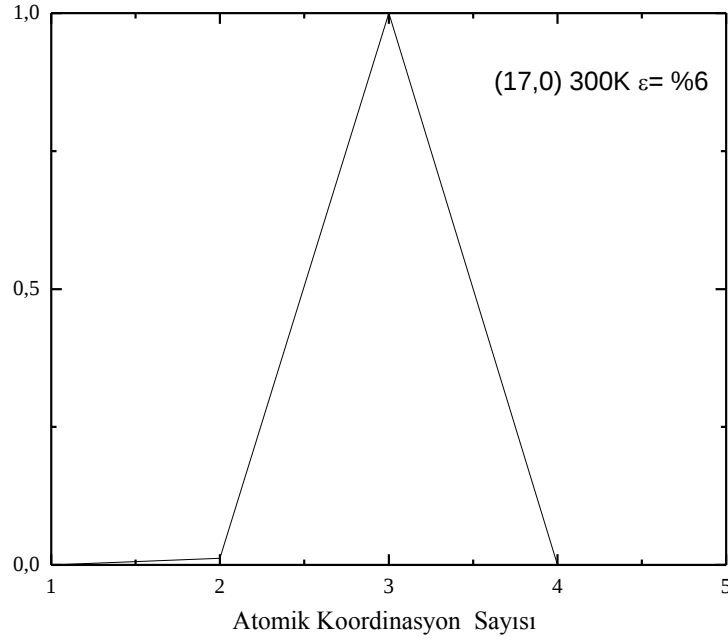


Şekil 3. 41 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım: 50000, dt:1fs çalışmaları için eDOS grafikleri

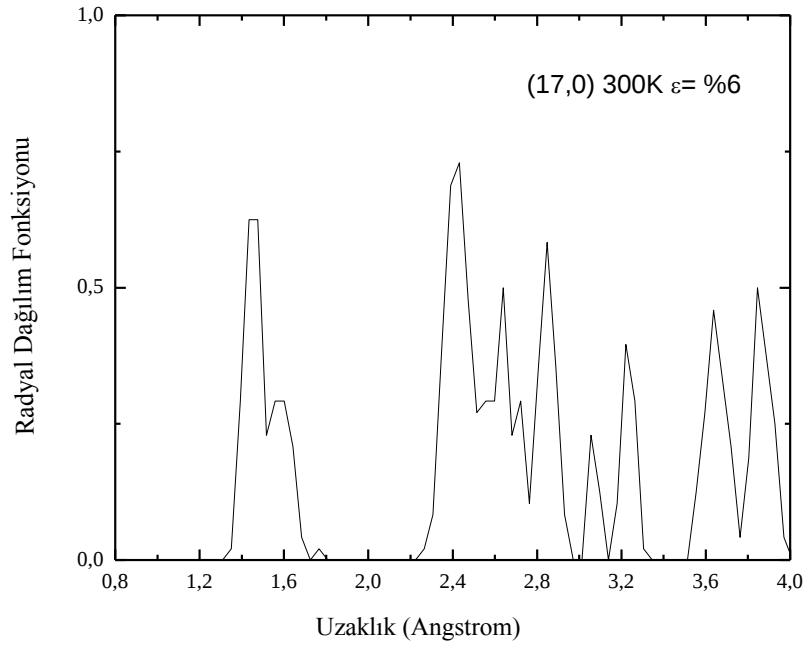
3.2 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altındaki (17,0) ve (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri

Çalışmalarımnda (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lere germe ve sıkıştırma uygulanmıştır. Pozitif gerinimler eksenel germeye, negatif gerinimler eksenel sıkıştırmaya karşılık gelmektedir. 300K sıcaklıkta germe ve sıkıştırma uygulanan (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT' lerin toplam enerji değişimlerinde, ilk 50000 adım gerilimden önce dengeye getirilen sistemin, son 10000 adım ise gerilim altındaki sistemin enerji seviyelerine karşılık gelmektedir. (17,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ye %6, %8, %12, %18, %20 germe ve %-16 sıkıştırma uygulanmıştır. (17,0) zigzag nanoşerit TDKNT'e %6 uygulanan germe sonucunda; atomik koordinasyon sayısı, radyal dağılım fonksiyonu, bağ-açısı dağılım fonksiyonu, bağ-uzunluğu dağılım fonksiyonu grafikleri çizilmiştir. Radyal dağılım fonksiyonuna göre Şekil 3.43'te atomlar arası uzaklıklara ait ilk 3 tepe sırasıyla; 2,43Å, 2,47Å, 2,84Å değerindedir. Şekil 3.44'te bağlar arasındaki açı değerleri 102,6°, 109,8°, 124,2°, 138,6° değerindedir. Karbon atomları arasındaki bağ açı değerlerinin arttığı ve buna bağlı olarak yapısal kararlılıkta değişiklikler olduğu gözlemlenmiştir. Şekil 3.45'te bağ- uzunluğu dağılım fonksiyonu 1,36Å, 1,42Å, 1,46Å pik yaptığı gözlemlenmiştir. (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ye %2, %4, %6, %8, %10, %12, %18, %20 germe ve %-2, %-4, %-8 sıkıştırma uygulanmıştır. Her iki tüpün denge durumu üzerine 10000 adım uygulanan germe sıkıştırma için E_{tot} grafikleri çizilmiştir. (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin 300K sıcaklıkta germe etkisi altında $E_{tot}(eV)$ grafikleri Şekil 3.48'den Şekil 3.52'ye kadar verilmiştir. %18, ve % 20' lik germe sonucunda (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin yapısındaki değişiklik Şekil 3.51 ve 3.52' de tespit edilmiştir. (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinim etkisi altında $E_{tot}(eV)$ grafikleri Şekil 3.53'den Şekil 3.63'e kadar verilmiştir. %18, ve %20 germe sonucunda (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpün yapısındaki değişiklik Şekil 3.59 ve Şekil 3.60'ta gösterilmiştir. Şekil 3.46'ta germe uygulanan (17,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpün simülasyon görüntüleri verilmiştir. Atomlar arasındaki bazı bağların koptuğu %18, %20, %-16 gerinim uygulanan zigzag tek duvarlı karbon nanotüpün simülasyon görüntülerinde gözlemlenmiştir. Şekil 3.47'de

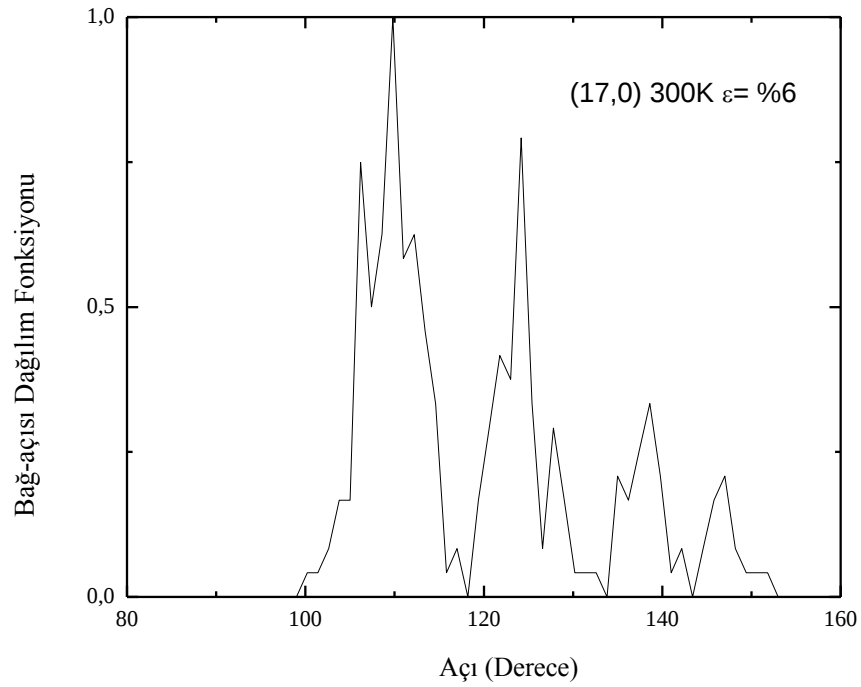
(28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüpün simülasyon görüntüleri verilmiştir. Atomlar arasındaki bazı bağların koptuğu %18 germe sonucunda Simülasyon görüntüsünde verilmiştir. En son simülasyon görüntüsünde %-16 sıkıştırma sonucunda bağlar arasındaki kopmanın olduğu görülmektedir.



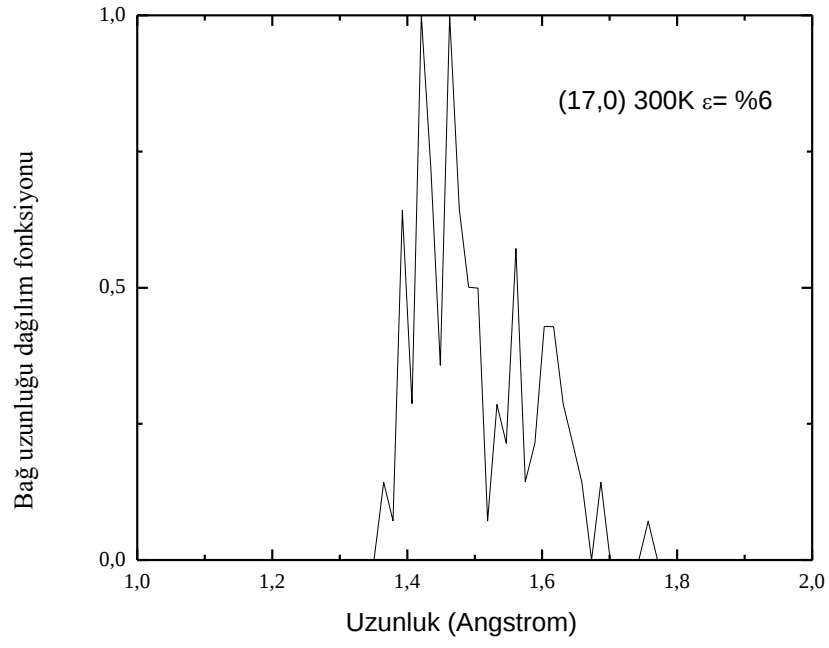
Şekil 3. 42 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım : 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT' nin Atomik Koordinasyon Sayısı



Şekil 3. 43 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Radyal Dağılım Fonksiyonu



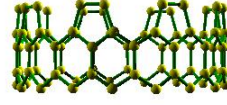
Şekil 3. 44 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 60000 $\varepsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Bağ- Açısı Dağılım Fonksiyonu



Şekil 3. 45 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için 300K MD Adım: 50000 $\epsilon = 6$ Zigzag TDKNT'nin Bağ- Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu



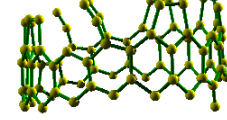
$$\varepsilon = 6$$



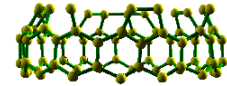
$$\varepsilon = 8$$



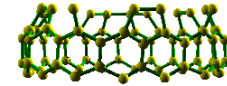
$$\varepsilon = 12$$



$$\varepsilon = 18$$

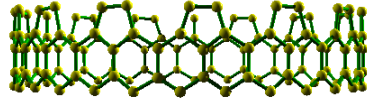


$$\varepsilon = 20$$

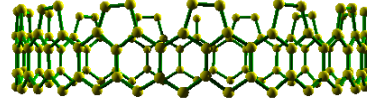


$$\varepsilon = -16$$

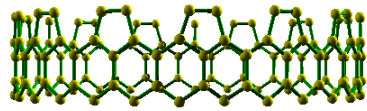
Şekil 3. 46 Gerinim uygulanan (17,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı
Karbon Nanotüpün Simülasyon Görüntüleri



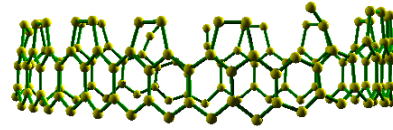
$$\varepsilon = 6$$



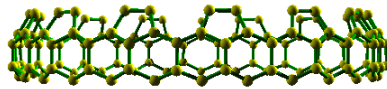
$$\varepsilon = 10$$



$$\varepsilon = 12$$

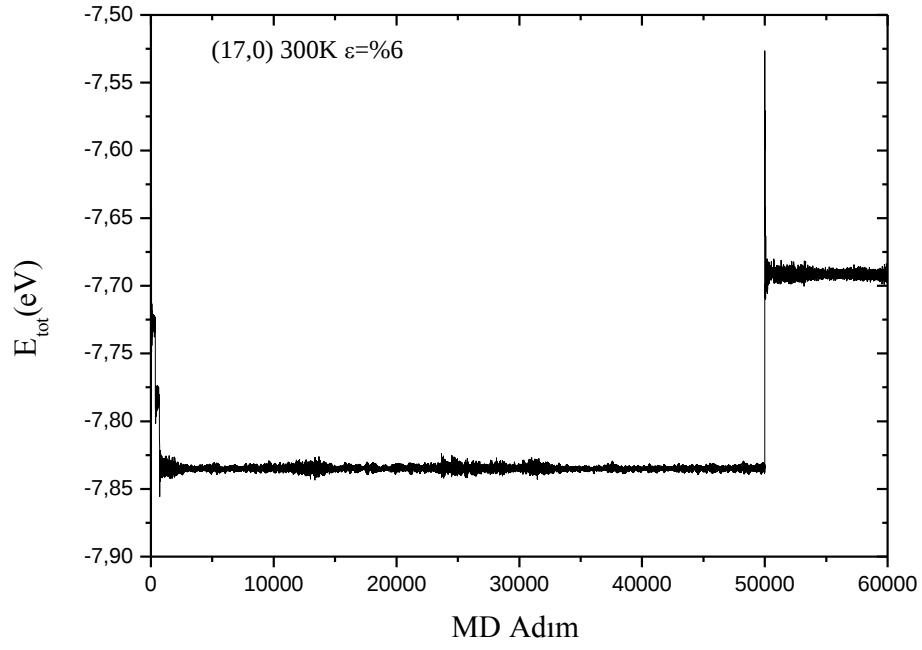


$$\varepsilon = 18$$

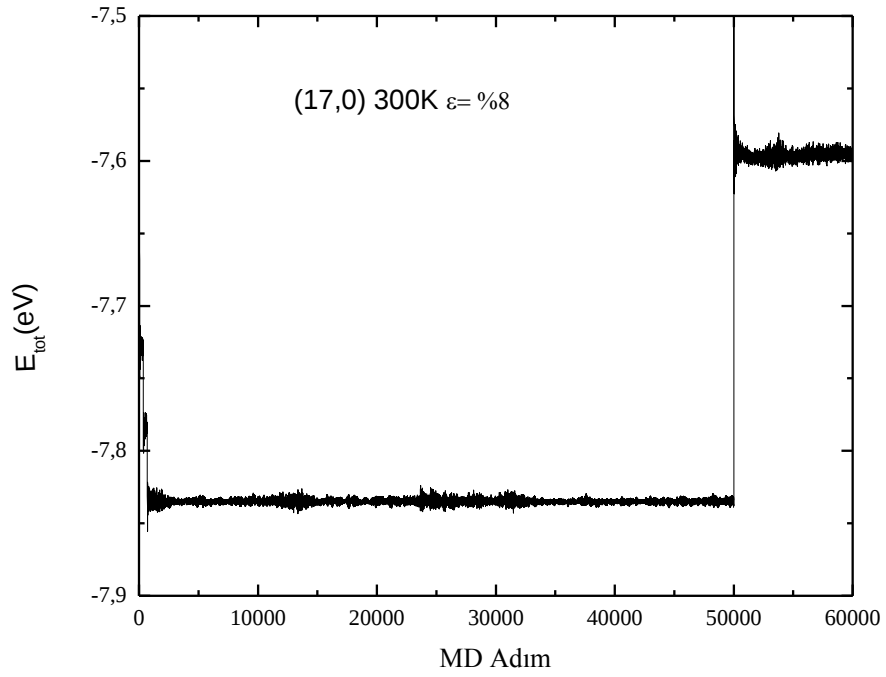


$$\varepsilon = -16$$

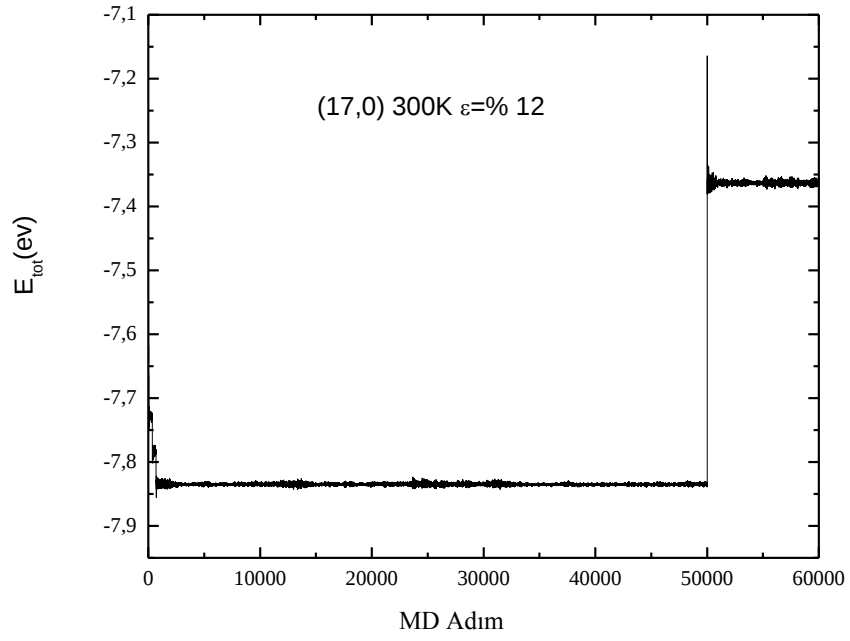
Şekil 3. 47 Gerinim uygulanan (28,0) Zigzag Nanoşerit Tek Duvarlı
Karbon Nanotüpün Simülasyon Görüntüleri



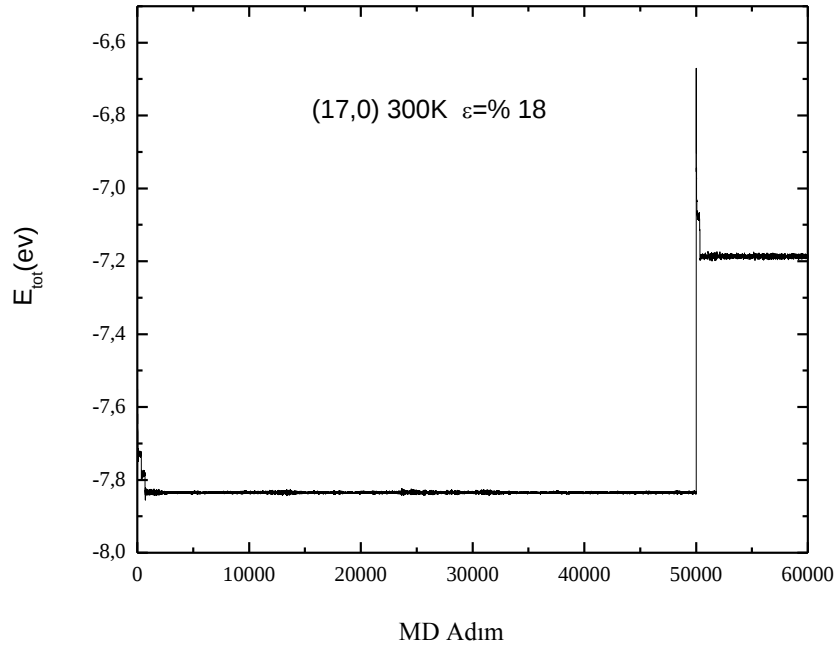
Şekil 3. 48 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\epsilon = 6$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



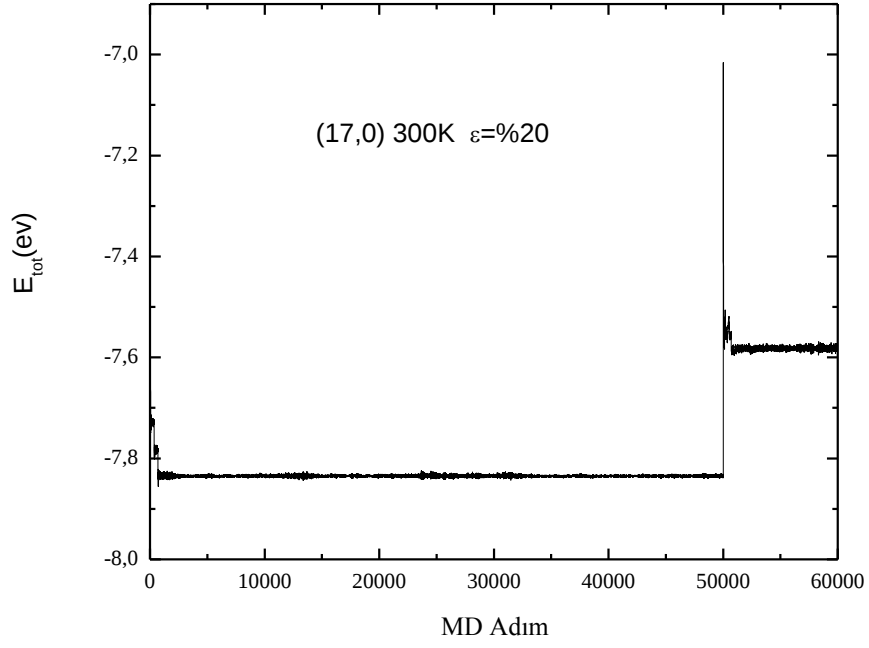
Şekil 3. 49 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\epsilon = 8$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



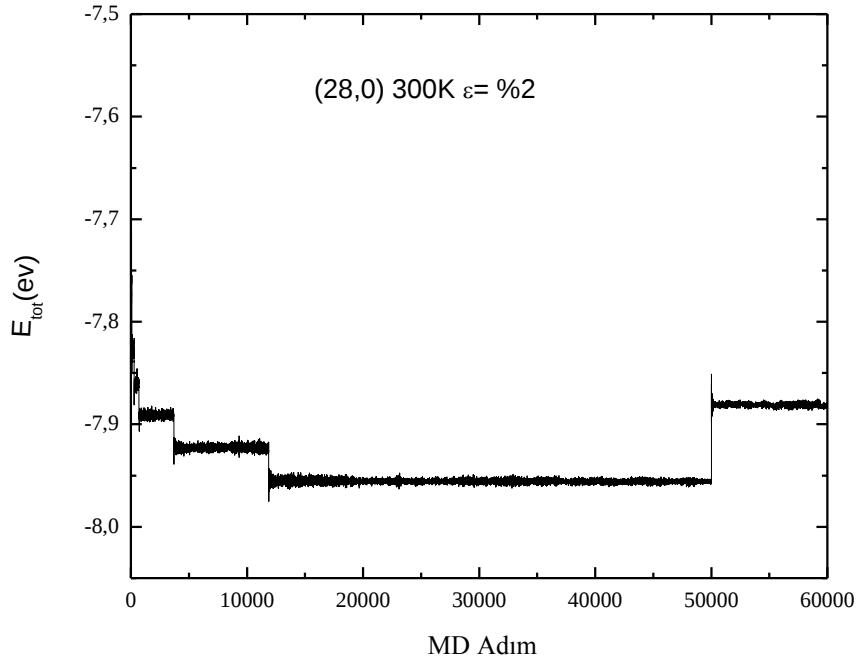
Şekil 3. 50 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\epsilon=12$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



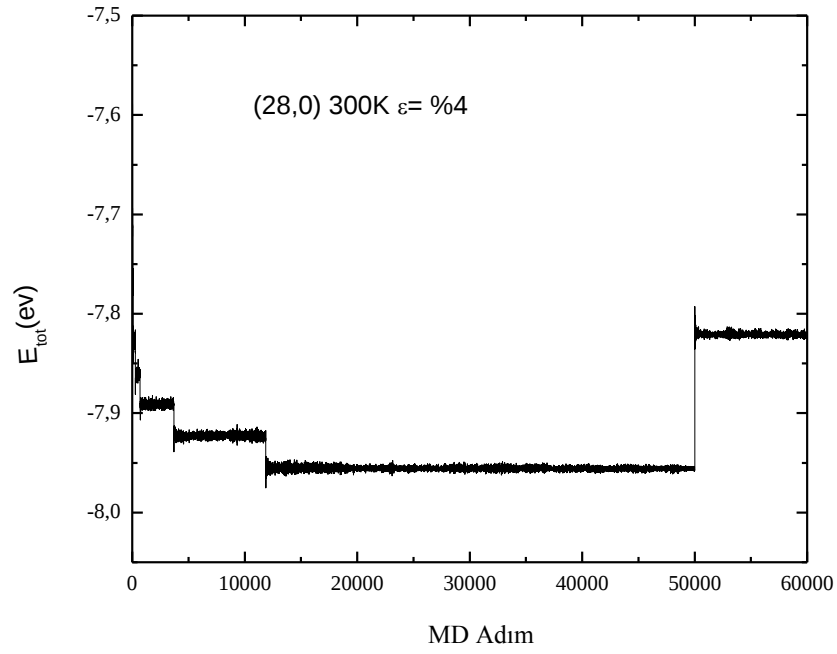
Şekil 3. 51 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\epsilon=18$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



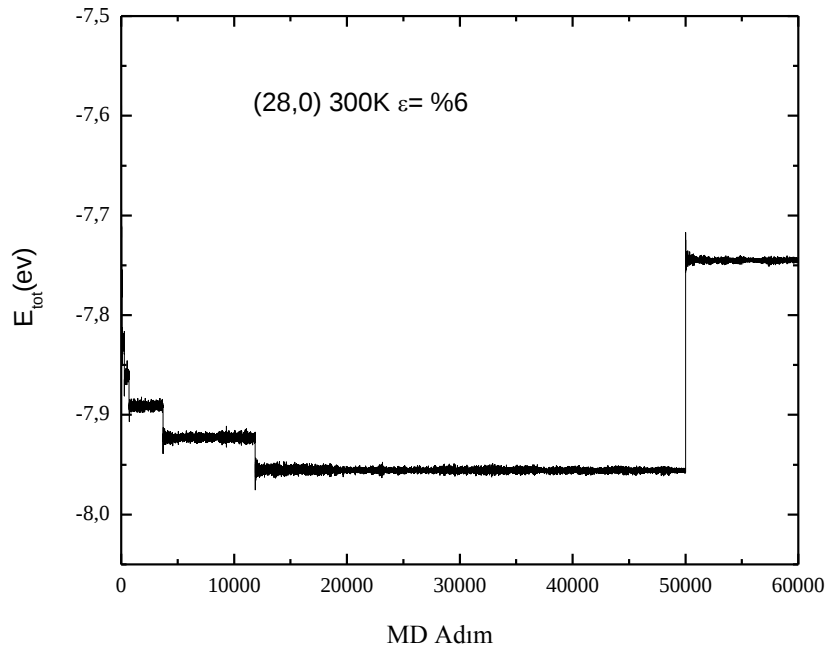
Şekil 3. 52 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50000 $\epsilon=20$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



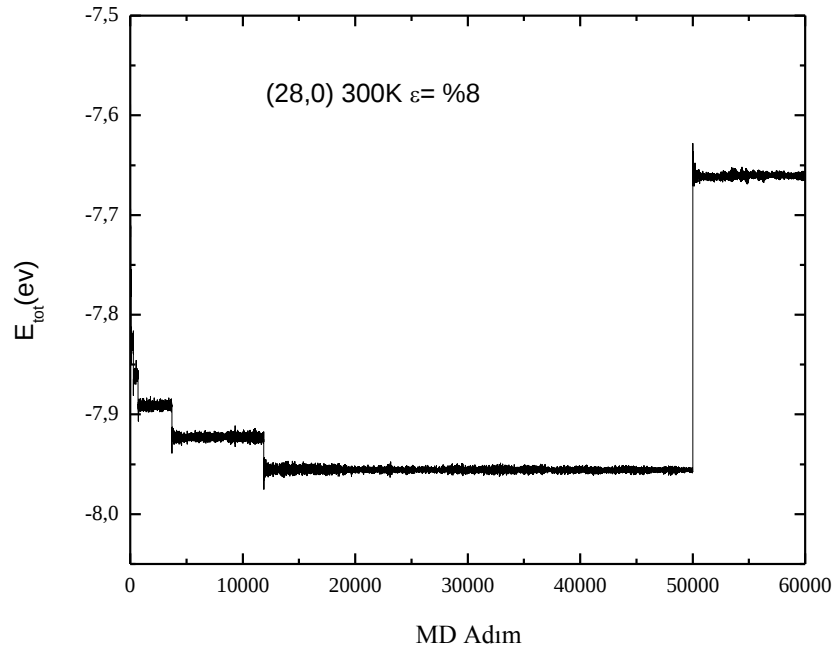
Şekil 3. 53 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon=2$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



Şekil 3. 54 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = 4$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri

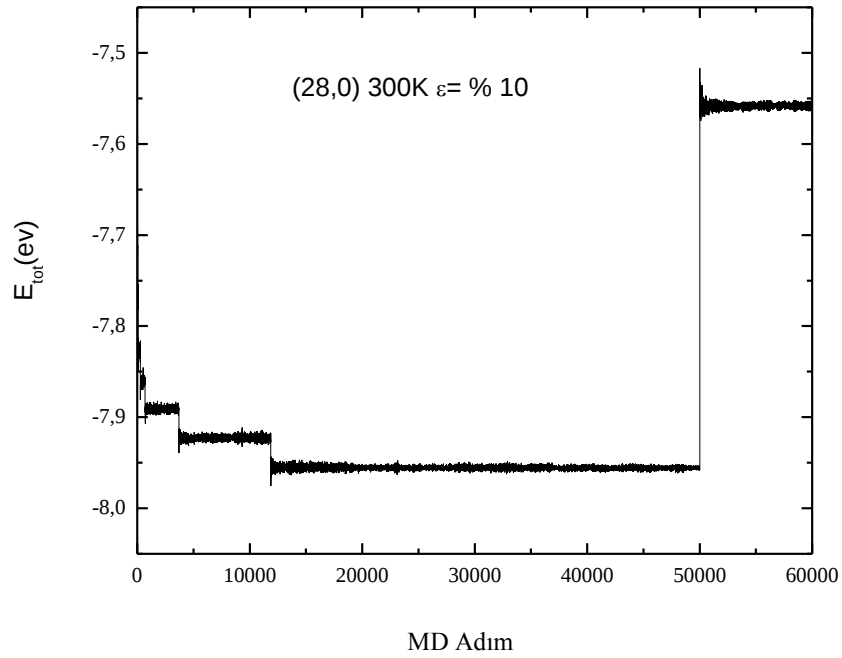


Şekil 3. 55 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = 6$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri

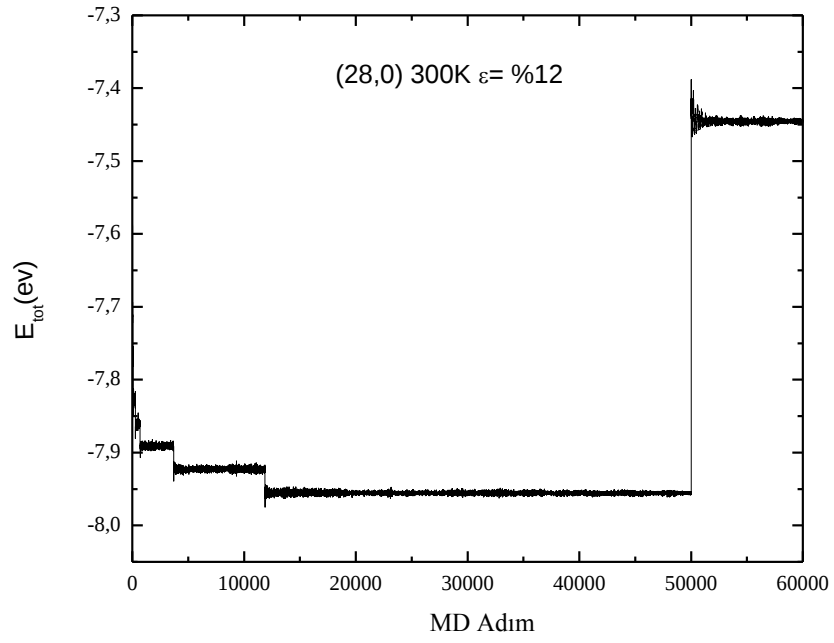


Şekil 3. 56 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8

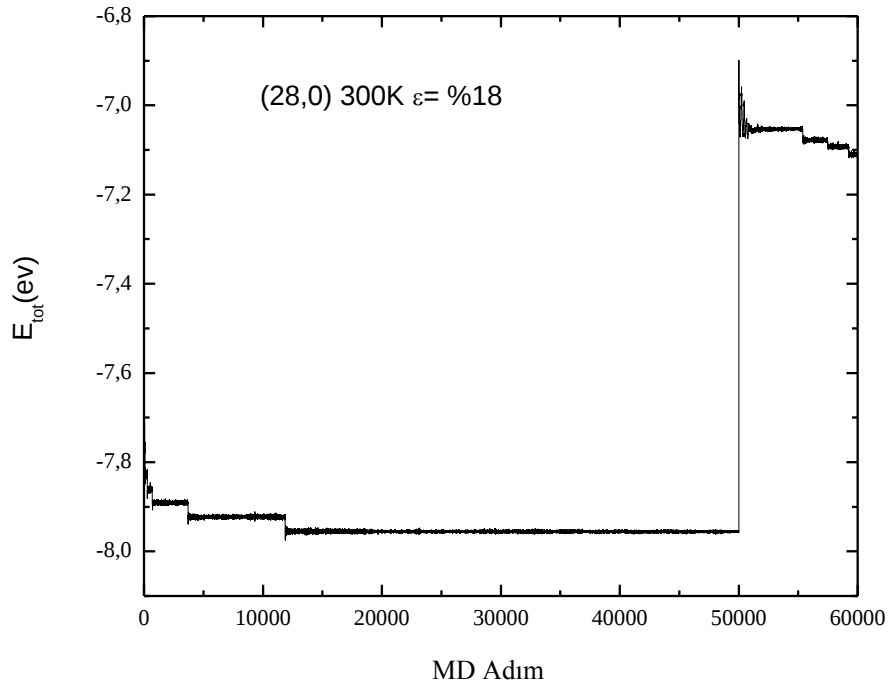
MD adım : 50000 $\varepsilon=8$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



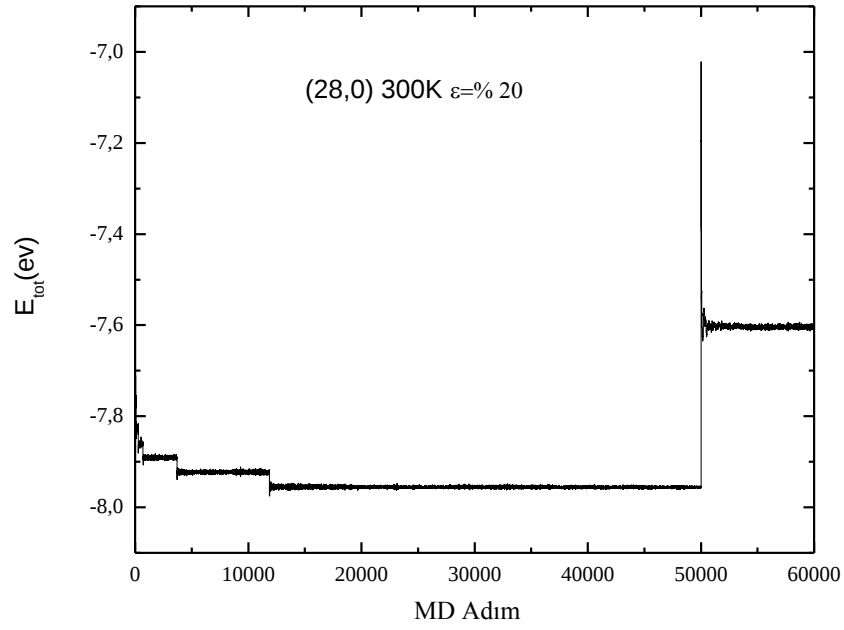
Şekil 3. 57 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\varepsilon=10$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



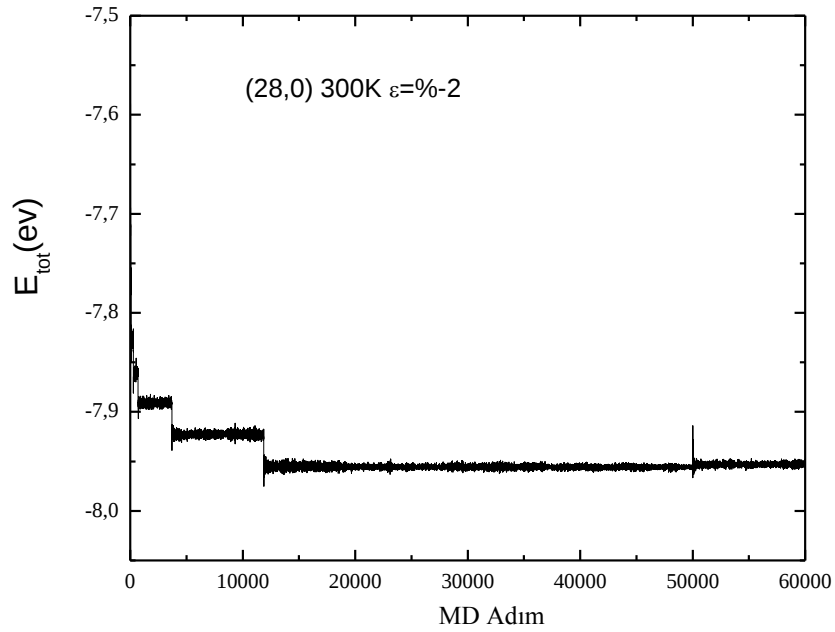
Şekil 3. 58 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = 12$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



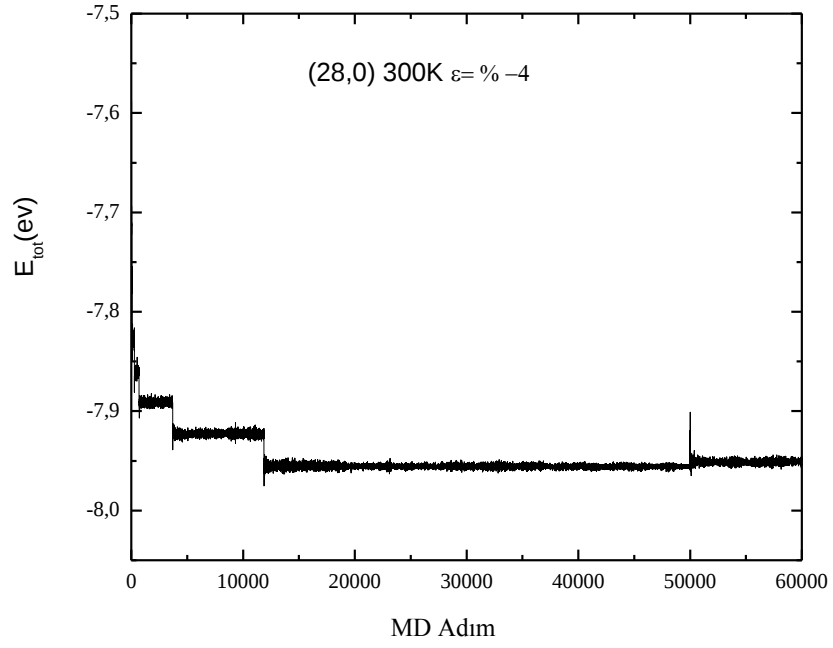
Şekil 3. 59 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = 18$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



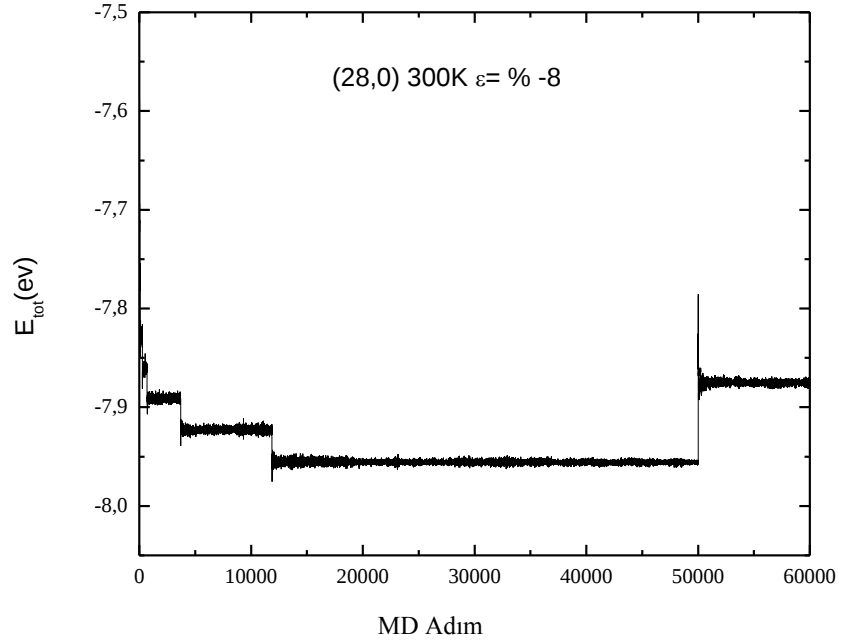
Şekil 3. 60 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = 20$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



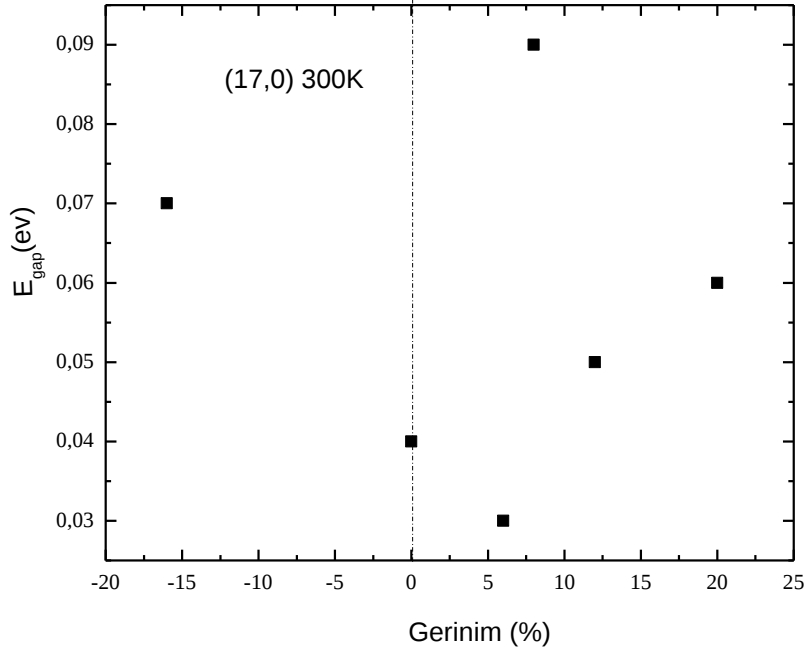
Şekil 3. 61 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = -2$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



Şekil 3. 62 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = -4$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri

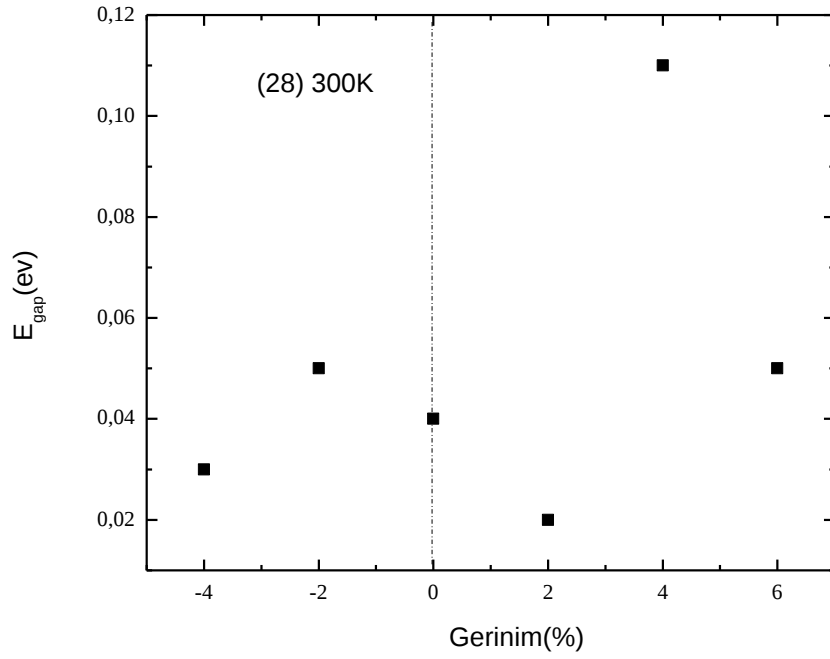


Şekil 3. 63 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT için, 300K, Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50000 $\epsilon = -8$ çalışmaları için E_{tot} grafikleri



Şekil 3. 64 (17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe-sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim

(17,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinim etkisi altında enerji bant aralığı altındaki değerlerin verildiği grafik incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,04 eV değerindeyken; %6 germe etkisi altında 0,03 eV, %8 germe etkisi altında 0,09 eV, %12 germe etkisi altında 0,05 eV, %20 germe etkisi altında 0,06 eV %-16 sıkıştırma etkisi altında 0,07 eV değerindedir. Fermi enerjisi civarındaki bant aralığı değeri %6 ve %8 germe etkisi altında daha fazla genişlemiştir. % 12 germe uygulandığında bant aralığında azalma görülmüştür ve %20 germe sonucunda bant aralığının arttığı gözlemlenmiştir. Fermi enerjisi civarındaki bant aralığı değerinin %-16 sıkıştırma etkisi altında arttığı gözlemlenmiştir.



Şekil 3. 65 (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe- sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim

(28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinim etkisi altında enerji bant aralığındaki değerlerin verildiği grafik incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerjisi seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,04 eV değerindeyken ; %2 germe etkisi altında 0,02 eV, %4 germe etkisi altında 0,12 eV, %6 germe etkisi altında 0,05 eV değerindedir. %-2 sıkıştırma etkisi altında 0,05 eV, % -4 sıkıştırma etkisi altında 0,03 eV değerindedir. Fermi enerjisi civarındaki bant aralığı değeri; %2 germe etkisi altında azalmış, %4 germe etkisi altında artmış, ve %6 germe etkisi altında yine azalmıştır. Fermi enerjisi civarındaki bant aralığı değeri %-4 sıkıştırma etkisi altında azalmıştır.

Tez çalışmamda Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin fiziksel ve elektronik özellikleri Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından yazılan Parelel N-Mertebeli Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemi ile incelendi. Simülasyon süresini saptayan moleküler dinamik adımı 1fs olarak seçildi. Simülasyon programında zigzag nanoşerit TDKN'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (nlayer) 5 olarak seçildi.

Simülasyonlarda, (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ler için 50000 moleküler dinamik simülasyon adımları çalışıldı. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) nanoşerit TDKNT'lerin 300K 'de ortalama enerji değerleri lineer fit alınarak hesaplanmıştır ve sırasıyla; -7,7374, -7,8797, -7,9076, -7,8389 ve -7,9261 eV değerindedir. Fermi enerji değerleri sırasıyla 3,4105, 3,1720, 3,3045, 3,2145, 3,3555 ve 3,3315 eV değerindedir bu değerler civarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafiklerine bakılarak zigzag nanoşerit TDKNT'lerin metalik yarı iletken bir davranış gösterdiği belirlendi. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüplerde metalik davranış, gözlenmiyorsa yarıiletken davranış beklenir. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde eğimlerdeki değişiklikler bize orada bir durum yoğunluğu olduğu bilgisini verir. Her bir nanoşerit TDKNT için BADF, BUDE, RDF ve AKS grafikleri çizilmiştir. Altıgen bir örgüde her karbon atomu komşu atomlarla üç bağ yapmaktadır. Atomik koordinasyon grafikleri incelendiğinde bu değeri gözlemlemiş oluyoruz.

Sistem 50000 MD adımda kararlı enerji seviyesine ulaştıktan sonra seçilen (17,0) ve (28,0) tüpleri üzerine 10000 adım moleküler dinamik adım süresince gerinim uygulanarak, seçilen tüplerin elektronik özellikleri incelendi. Uygulanan gerinim etkisi altında zigzag nanoşerit TDKNT'lerin yapısal kararlılıklarının bozulup bozulmadığı tespit

edildi. Şekil 3.25'te (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0) ve (28,0) zigzag nanoşerit tek duvarlı karbon nanotüplerin simülasyon görüntüleri verilmiştir. Kiralitelere bağlı olarak tüplerin yarıçaplarında da artma olmuştur. (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'lerde 300K sıcaklıkta bağ-uzunluğu dağılım fonksiyonu 1.44Å değerinde bir pik yaptığını gözlemliyoruz. Bir atoma en yakın atomların sayısına koordinasyon denir. Radyal dağılım fonksiyonuna göre Şekil 3.3'te (10,0) zigzag nanoşerit TDKNT için atomlar arası uzaklıklara ait ilk 3 tepe sırasıyla 2.48Å, 2.82Å, 3.69Å değerlerinde olduğu görüldü. Şekil 3.7'de (11,0) zigzag TDKNT için atomlar arası uzaklıklara ait ilk 3 tepe sırasıyla 2.44Å, 2.82Å, 3.19Å değerlerinde olduğu görüldü. Çizelge 3.1'de (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lerin atom sayıları sırasıyla; 50, 55, 65 ve 70 bulunmuştur, kiraliteye bağlı olarak atom sayılarında da artma gözlemlenmiştir. Yarıçapları sırasıyla 3,93058, 4,32054, 5,10116, 5,49172Å ve boyları 4,26Å' dır. Şekil 3.25'te sırasıyla (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (17,0), (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'lerin simülasyon görüntüleri verilmiştir.

Çalışmalarında (17,0) ve (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'lere germe ve sıkıştırma uygulanmıştır. Pozitif gerinimler eksenel germeye, negatif gerinimler eksenel sıkıştırmaya karşılık gelmektedir. 300K sıcaklıkta germe ve sıkıştırma uygulanan bu KNT'lerin toplam enerji değişimlerinde, ilk 50000 adım gerilimden önce dengeye getirilen sistemin, son 10000 adım ise gerilim altındaki sistemin enerji seviyelerine karşılık gelmektedir. (17,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ye %6, %8, %12, %18, %20 germe uygulanmıştır. (17,0) zigzag nanoşerit TDKNT'e %6 uygulanan germe sonucunda; atomik koordinasyon sayısı, radyal dağılım fonksiyonu, bağ açısı dağılım fonksiyonu, bağ uzunluğu dağılım fonksiyonu grafikleri çizilmiştir. (28,0) zigzag nanoşerit TDKNT'ye %2, %4, %6, %8, %10, %12, %18, %20 germe ve %-2, %-4, %-8 sıkıştırma uygulanmıştır. Her iki tüpün denge durumu üzerine 10000 adım uygulanan germe sıkıştırma için $E_{tot} (eV)$ grafikleri çizilmiştir. (17,0) Zigzag nanoşerit şeklindeki TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinim etkisi altında enerji bant aralığı altındaki değerlerin verildiği grafik incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,04 eV değerindeyken; %6 germe etkisi altında 0,03 eV, %8 germe etkisi altında 0,09 eV, %12 germe etkisi altında 0,05 eV, %20 germe etkisi altında 0,06 eV %-16 sıkıştırma etkisi altında 0,07 eV değerindedir. Fermi enerjisi civarındaki band aralığı

değeri %6 ve %8 germe etkisi altında daha fazla genişlemiştir. % 12 germe uygulandığında band aralığında azalma görülmüştür ve %20 germe sonucunda band aralığının arttığı gözlemlenmiştir. Fermi enerjisi civarındaki band aralığı değerinin %-16 sıkıştırma etkisi altında arttığı gözlemlenmiştir. (28,0) Zigzag nanoşerit TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinim etkisi altında enerji bant aralığındaki değerlerin verildiği grafik incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,04 eV değerindeyken ; %2 germe etkisi altında 0,02 eV, %4 germe etkisi altında 0,12 eV, %6 germe etkisi altında 0,05 eV değerindedir. %-2 sıkıştırma etkisi altında 0,05 eV, % -4 sıkıştırma etkisi altında 0,03 eV değerindedir. Fermi enerjisi civarındaki band aralığı değeri; %2 germe etkisi altında azalmış, %4 germe etkisi altında artmış, ve %6 germe etkisi altında yine azalmıştır. Fermi enerjisi civarındaki band aralığı değeri %-4 sıkıştırma etkisi altında azalmıştır.

KAYNAKLAR

- [1] Saito,R., Dresselhaus,G.,ve Dresselhaus, M., (1998).“Physical Properties of Carbon Nanotubes”, Imperial College Press, London.
- [2] Sng,B.,(2006), Sıkı Baę Molekler Dinamik Yntemiyle Karbon Nanotplerin Bilgisayar Simlasyonu, Doktora Tezi, YT Fen Bilimleri Ensits, İstanbul.
- [3] Vardar, N., (2012), Nano malzemelerin Bilgisayar Simlasyonu, Doktora Tezi, YT Fen Bilimleri Ensits, İstanbul.
- [4] Yıldız Teknik niversitesi, Karbon Nanotp Bilgisayar Simlasyon Laboratuvarı, http://www.yildiz.edu.tr/~gdereli/lab_homepage/index.htm, 18 Eyll 2012.
- [5] zdoęan, C., Dereli, G. ve aęın, T., (2002). “O(N) Parallel Tight Binding Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotubes”, Computer Physics Communications, 148: 188-205.
- [6] Dereli G. ve zdoęan C., (2003). “O(N) Algorithms in Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of the Electronic Structure of Carbon Nanotubes”, Physical Review B, 67: 0354415 (1-7).
- [7] Dereli G. ve zdoęan, C., (2003). “The Structural Stability and Energetics of Single – Walled Carbon Nanotubes under Uniaxial Strain”, Physical Review B, 67: 0354416 (1-6).
- [8] Dereli, G. ve Sng, B., (2007). “Temperature Dependence of the Tensile Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes: O(N) Tight-Binding Molecular-Dynamics Simulations”, Physical Review B, 75: 184104 (1-6).
- [9] Dereli, G., Sng, B. ve zdoęan, C., (2007). “Thermal Stability of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes: an O(N) Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation Study”, Nanotechnology, 18: 245704.

- [10] Dereli G., Süngü, B., Eyecioğlu, Ö., ve Vardar, N., (2007). "Temperature Effect on the Physical and Electronic Properties of Single Walled Carbon Nanotubes", Sixth International Conference of the Balkan Physical Union, American Institute of Physics Conference Proceedings, 899: 381-382.
- [11] Onat, B., Konuk, M., Durukanoğlu S. ve Dereli, G., (2009). "Energetics and Atomic Relaxations of Cu Nanowires: The Effect of Local Strain and Cross-Sectional Area" Nanotechnology, 20: 075707.
- [12] Dereli G., Süngü, B. ve Eyecioğlu, Ö., (2010). "Vacancy Effect on the Thermal and Tensile Stability of (10,10) Single Walled Carbon Nanotube" Balkan Physics Letters, 18: 181023.
- [13] Dereli, G., Vardar, N. ve Eyecioğlu, Ö., (2010). "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (13,0) and (15,0) Carbon Nanotubes", Nanotech 2010 1 (2) : Carbon Nano Structures & Devices, 292-295.
- [14] Dereli, G., Mısırlıoğlu, B.S., Eyecioğlu, Ö., and Vardar, N., "A New Lower Limit for the Bond Breaking Strains of Defect-Free Carbon Nanotubes: Tight Binding MD Simulation Study", Computational Materials Science,.69 (2013), 234-242.
- [15] Başaran, E.,2002, Nanoteknoloji; "Dünden Bugüne Türkiyede Bilim-Teknoloji ve Geleceğin Teknolojileri Ayhan, A'da: Beta Yayını, İstanbul, 379-388.
- [16] Vardar, N., (2006), "Farklı Simetrik Yapılarda Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunluklarının Simülasyonu", Yüksek Lisans Tezi, YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Çisem ELBASAN
Doğum Tarihi ve Yeri : 18.08.1989 TEKİRDAĞ
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : cisemelbasan@hotmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2013
Lisans	Fizik	Balıkesir Üniversitesi	2011
Lise	Sayısal	Tuğlacılar Süper Lisesi	2007

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2012	Keşif ELEKTRONİK LTD.ŞTİ.	Satış ve Pazarlama Uzmanı

