

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**EKSENEL GERİNİM ALTINDA
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN
ELEKTRONİK YAPISI**

Gökmen MUŞ

**FBE Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında
Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Gülay DERELİ

İstanbul, 2009

İÇİNDEKİLER

Sayfa

KISALTMA LİSTESİ	iv
ÖNSÖZ	viii
ÖZET	ix
ABSTRACT	x
1. GİRİŞ	1
1.1 Karbon Nanotüpler.....	2
1.1.1 Karbon Nanotüplerin Yapısı	3
1.1.2 Elektronik Özellikleri.....	11
1.1.3 Mekanik Özellikler	12
1.2 Moleküler Dinamik.....	13
1.2.1 Seküler Denklem.....	15
1.2.2 Sıkı Bağ Moleküler Dinamik	18
1.2.2.1 Sıkı-Bağ Formalizmi.....	18
1.2.2.2 O(N) Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi	20
2. METOD VE SONUÇLAR	22
3. YORUM.....	57
KAYNAKLAR.....	61
İNTERNET KAYNAKLARI	62
ÖZGEÇMİŞ	63

SİMGE LİSTESİ

$\vec{C}_h$	Chiral Vektörü
$\vec{T}$	Geçiş Vektörü
$\vec{R}$	Uzay Simetri Vektörü
Ψ	Nanotüp ekseni etrafındaki dönme
τ	$\vec{T}$ yönündeki dönüş
$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$	Bloch fonksiyonu
$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$	Özfonksiyon
k	Dalga sayısı
$E_i(\vec{k})$	k dalga boyundaki enerji
L	Karbon Nanotüpün çevre uzunluğu
d_t	Karbon Nanotüpün çapı
a	Örgü sabiti
ε	Eksenel gerinim

KISALTMA LİSTESİ

KNT	Karbon Nanotüp
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
MD	Molüküler Dinamik
SBMD	Sıkı Bağ Moleküler
TBMD	Tight Binding Molecular Dynamic
SB	Sıkı bağ
$O(N)$	Order N
$O(N^3)$	Order N küp
PVM	Paralel Virtual Machine
DAC	Divide and Conquer
DOS	Density Of States (Durum yoğunluğu)
0D	Sıfır boyutlu
1D	Bir boyutlu
2D	İki Boyutlu
3D	Üç boyutlu

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 1.1	Karbon allotroplarının kristal yapısı. (Katsnelson, materialstoday, 2007)2
Şekil 1.2	Grafit yapısı3
Şekil 1.3	Grafın yüzeyin sarılması3
Şekil 1.4	Açılmış petek levha4
Şekil 1.5	Petek levha üzerinde tüplerin seçimi5
Şekil 1.6	Farklı KNT yapıları a) Armchair b) Chiral c) Zig-zag5
Şekil 1.7	Chiral vektörünün KNT üzerinde gösterimi6
Şekil 1.8	Baz vektörleri.....6
Şekil 1.9	Birim hücrede vektörler (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998) ...9
Şekil 1.10	Simetri Operatörü(R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)..... 11
Şekil 2.1	(5,0) KNT ünün yan ve dik görünüşü22
Şekil 2.2	(15,0) KNT ünün dik ve yan görünüşü23
Şekil 2.3	(26,0) KNT ünün dik ve (27,0) KNT ünün yan görünüşü23
Şekil 2.4	(5,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği25
Şekil 2.5	(15,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği26
Şekil 2.6	(26,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği26
Şekil 2.7	(27,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği27
Şekil 2.8	(5,0) KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği.....28
Şekil 2.9	(5,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği.....29
Şekil 2.10	(5,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği.....30
Şekil 2.11	(5,0) KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği31
Şekil 2.12	(15,0) KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği.....32
Şekil 2.13	(15,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği.....33
Şekil 2.14	(15,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği.....34
Şekil 2.15	(15,0) KNT KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği.....35
Şekil 2.16	(26,0) KNT KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği.....36
Şekil 2.17	(26,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği.....37
Şekil 2.18	(26,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği.....38
Şekil 2.19	(26,0) KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği39
Şekil 2.20	(27,0) KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği.....40
Şekil 2.21	(27,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği.....41
Şekil 2.22	(27,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği.....42
Şekil 2.23	(27,0) KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği43
Şekil 2.24	Farklı KNT lerin ϵ - E_{tot} grafiği.....44
Şekil 2.25	(5,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği.....45
Şekil 2.26	(5,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği46
Şekil 2.27	(15,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği.....47
Şekil 2.28	(15,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği49
Şekil 2.29	(26,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği.....50
Şekil 2.30	(26,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği52
Şekil 2.31	(27,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği.....52
Şekil 2.32	(27,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği54
Şekil 2.33	Farklı KNT ler için ϵ - Bant aralığı grafiği54
Şekil 2.34	(15,0) ve (27,0) KNT leri için ϵ - Bant aralığı grafiği55

Şekil 3.1	(26,0) KNT ünde %23 germe değerinde atom kopması resmi	57
Şekil 3.2	(27,0) KNT ünde %23 germe değerinde atom kopması resmi	58
Şekil 3.3	Gerinim ile bant aralığı değişimi, Sreekela ve arkadaşları (2008).....	60

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Tablo 2.1	Çalışılan KNT lerin yarıçapları.....22
Tablo 2.2	Çalışılan KNT lerin Alt sistem büyüklükleri, (Vardar, 2006)24
Tablo 2.3	KNT ler gerilmeden önce ortalama dengelenme enerjileri.....25
Tablo 2.4	Gerinim uygulanmadan önceki Fermi enerji seviyeleri ve Bant aralıkları.....27
Tablo 2.5	(5,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu.....29
Tablo 2.6	(5,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu.....30
Tablo 2.7	(15,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu.....32
Tablo 2.8	(15,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu.....34
Tablo 2.9	(26,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu.....37
Tablo 2.10	(26,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu.....38
Tablo 2.11	(27,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu.....40
Tablo 2.12	(27,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu.....41
Tablo 2.13	(5,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu45
Tablo 2.14	(15,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu48
Tablo 2.15	(26,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu51
Tablo 2.16	(27,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} - Bant aralığı tablosu.....53

ÖNSÖZ

Bu tez, Yıldız Teknik Üniversitesi'nde yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır.

Öncelikle yüksek lisans eğitimimi bırakmayı düşündüğüm zaman beni kararımdan vazgeçirerek eğitimimi tamamlamama sebep olan tez danışmanım Prof. Dr. Gülay DERELİ'ye bu fırsatı bana tanıdığı için minnettarım. Karbon Nanotüp simülasyon Laboratuvarı'nı kurup çalışmalarımızda rehberlik ederek yardımcı olduğu için teşekkürü borç bilirim.

Bana çalışma imkânı ve çalışma ortamı sağlayan Fen Edebiyat Fakültesi Dekan Yardımcısı Doç. Dr. Ayşe KARA 'ya, Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Kubilay KUTLU 'ya ve eski Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Emel ÇINGİ 'ya ayrıca teşekkür ederim.

Çalışmam boyunca yardımlarını esirgemeyen saat gözetmeksizin yardımına koşan doktora öğrencisi Necati VARDAR 'a ve yardımlarını esirgemeyen Araş. Gör. Önder EYECİOĞLU ile Araş. Gör. Dr. Banu SÜNGÜ 'ye teşekkür ederim.

Her türlü manevi desteği benden esirgemeyen başta annem babam Menşure ve Mehmet MUŞ olmak üzere bütün aile fertlerine, çalışmalarım boyunca yanımda olan ikiz kardeşim Köksal MUŞ ile eşi Sinem Şaşmaz Muş'a, manevi kardeşim Erhan GÜNDOĞDU 'ya ve tez dönemimin bitmesini sabırla bekleyip hoşgörüsünü esirgemeyen Merve ÖKDEM 'e teşekkür ederim.

Lisans ve yüksek lisans eğitimim boyunca yanımda olup beni destekleyen ve ihtiyaç duyduğum her an yanımda olan İstanbul Üniversitesi 'nde Araş. Gör. Fatma AYDOĞMUŞ 'a teşekkür ederim.

Yüksek Lisans eğitimimin başından beri çalışmakta olduğum Özel Efdal Eğitim Kurumları'nda bana aile sıcaklığı yaşatarak yüksek lisans derslerimi almam konusunda programımı değiştiren Başta Efdal IRMAK, Turgut IRMAK, Fırat ATAĞLI, Pembe KARAKAYA ve Yavuz AYDINOĞLU 'na gösterdikleri hoşgörüden dolayı teşekkürü borç bilirim.

ÖZET

Bu tezde tek duvarlı karbon nanotüplerin (TDKNT) eksenel gerinim altında elektronik yapıları incelenirken, Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilen $O(N)$ N. Mertebe Sıkı Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) simülasyon programı kullanılarak farklı simetrik yapılardaki zigzag yapıları karbon nanotüpler (KNT) üzerinde çalışıldı.

Simülasyonda ilk adımda başlangıç koşulları KNT ün elektronik yapısı incelenebilecek şekilde seçildi. KNT e eksenel gerinimler uygulamaya başlamadan önce 3000 adımlık simülasyonlarla enerjisinin dengeye gelmesi beklendi ve enerji dengeye geldikten sonra farklı genliklerdeki eksenel gerinimleri 2000 adım uygulandı. Durum yoğunluğu fonksiyonu grafikleri kullanılarak eksenel gerinimle enerji bant aralığının değişimi incelenerek elektronik yapıları incelendi.

Farklı elektronik yapıları inceleyebilmek için simülasyonda KNT lerin çap uzunlukları küçük çap uzunluğu bölgesinde (5,0), orta çap uzunluğu bölgesinde (15,0) ve büyük çap uzunluğu bölgesinde (26,0), (27,0) karbon nanotüpleri ile çalışıldı.

Tezin ilk bölümü iki aşama olarak anlatıldı. İlkinde, tek duvarlı karbon nanotüplerin yapısı, terminolojisi, sınıflandırılması ve elektronik yapıları anlatıldı. İkinci aşamada yöntemin anlaşılması için moleküler dinamik yöntem ve çalışmada kullanılan Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilen $O(N)$ N Mertebeli Sıkı Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) simülasyon programı anlatıldı. Tezin ikinci bölümünde çalışmadaki yöntem verilerek sonuçlar açıklandı. Tezin üçüncü bölümünde sonuçlar literatürle karşılaştırılarak yorumlar yapıldı.

Anahtar kelimeler: karbon nanotüp, eksenel gerinim, enerji bant aralığı, elektronik yapı, moleküler dinamik simülasyonu

ABSTRACT

In this thesis electronic structures of single-walled carbon nanotubes under the axial strain are investigated. We used the simulation program ‘O(N) Algorithms in Tight Binding Molecular Dynamic (TBMD)’ developed by Prof. Dr. Gülay DERELI to investigate zig-zag carbon nanotubes of various kind of symmetrical structures.

In the simulation, as a first step, we chose the initial conditions such as to analyse the electronic structure of carbon nanotube. After the energy of carbon nanotube balanced at the end of 3000 step, we applied 2000 step of axial strains with various kind of amplitudes onto the carbon nanotube. We observed the variation of energy band gap with axial strain by using the graphics of state density function.

We chose the radius length of carbon nanotubes’ to investigate different electronic structures such as (5,0) in the small radius region, (14,0), (15,0) in the medium radius region and (26,0), (27,0) in the large radius region.

We separated first chapter of the thesis into two sections. In the first section we summarized the general properties, classification and electronic structures of carbon nanotubes. In the second section to explain the method we summarized molecular dynamics method and ‘O(N) Algorithms in Tight Binding Molecular Dynamic (TBMD)’ simulation. In the second chapter we presented the method and results. In the third chapter we compared and discussed our results with literature.

Keywords: carbon nanotube, uniaxial strain, energy band gap, electronic structure, molecular dynamic simulation.

1. GİRİŞ

Milimetrenin milyonda biri büyüklüğündeki yapılara inerek maddelere yeni özellikler kazandıran nanoteknoloji yakın gelecekte tüm dünyanın sanayi kollarına ve insan hayatına yön verecek. Nanoteknoloji atom ve molekül ölçeğinde ölçme, tahmin etme, izleme ve yapım faaliyetlerinde bulunmayı bu ölçeğin bazı temel özelliklerinden yararlanarak yapıların ve materyallerin inşa edilmesini ifade eder.

Nanoteknoloji, kullandığımız aletleri, bilgisayarları, yapıları, elbiseleri ve materyalleri değiştirecek ve yeni ürünler, piyasalar ve yaşam tarzını gündeme getirecektir. Nanoteknoloji, yalnızca minyatürize olmuş ürün ve üretim yapıları ortaya çıkarmayacaktır; bunun yanı sıra üretim sürecinde kullanılan materyaller atom ve moleküler düzeyde ele alınıp işleneceğinden atom (kuantum) fiziği devreye girecektir. Bu anlamda nanoteknoloji çeşitli alanlarda yeni teknoloji, piyasa ve ürünlerin ortaya çıkmasına olanak tanımaktadır.

Bugün hayal gibi görünse de, kullandıklarımızdan binlerce kat hızlı bilgisayarlar, damarların içinde ilerleyerek hastalıkları tedavi edecek nanoaygıtlar, organların içinde ameliyat yapabilecek robotlar, betondan daha dayanıklı plastik binalar, hareketleri şarj edilmiş elektrik ile sağlanan yapay kaslar, çok daha hafif ve gelişmiş silah sistemleri gelecekte karşımıza çıkacak. Enerji konusundaki temel sıkıntı olan enerji sarfiyatı sıfıra inecek ve zararlı her tür atıktan kurtulmak mümkün olacaktır.

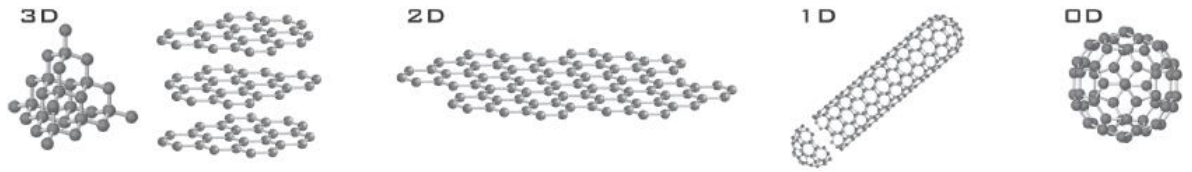
Bu tezin konusunu oluşturan karbon nanotüpler üzerinde yapılan çalışmaların sonuçları çok önemli olacaktır. Çünkü mekanik ve elektronik özelliklerinden dolayı geleceğin elektronik ve optik aygıtlar, nano ölçeklerdeki basınç algılayıcıları ve nanoelektromekanik çeviricilerin tasarımında çok önemli rol oynayacaktır.

Nano boyutta yapılan çalışmaların fiziksel ortamda gerçekleştirilmesi oldukça zordur. Bu nedenle, deneyleri bilgisayar ortamında simüle ederek problemlerin çözülmesinde olanak sağlanmaktadır.

1.1 Karbon Nanotüpler

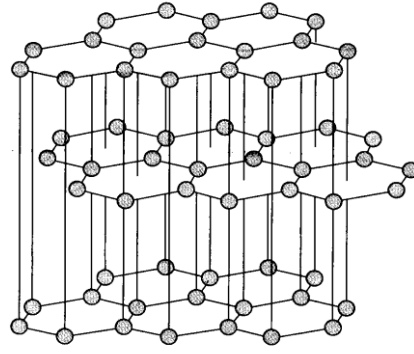
Karbon periyodik tabloda altıncı ve dördüncü sütundaki elementler arasında en düşük atom numarasına sahip elementtir. Yıldızların içerisinde nükleer tepkimeler ile evrendeki en ağır elementlerin ve nano ölçeklerde karbon nanotüplerin üretilmesinde önemli rol oynar

Karbonun iki ana allotrobu vardır; Grafit ve elmas. Grafit ve elmasın haricinde yakın zamanda keşfedilmiş allotropları fulleren ve nanotüplerdir. Elmas ve Grafit karbonun üç boyutlu, nanotüp bir boyutlu ve fulleren sıfır boyutlu allotrobudur. Yakın zamanda da iki boyutlu allotrobu olan grafin keşfedilmiştir.



Şekil 1.1 Karbon allotroplarının kristal yapısı. (Soldan sağa) Üç boyutlu elmas ve grafit (3D); iki boyutlu grafin (2D); bir boyutlu nanotüp (1D); ve sıfır boyutlu fullerene (0D). (Katsnelson, 2007)

Elmasta karbon atomları elmasa dayanıklılığını veren düzgün bir kristal yapı oluşturur. Fakat grafitte ise durum tam tersidir. Grafin tek atom kalınlığındaki karbon atomlarının petek şeklinde dizilmesi ile oluşmuştur. Grafit ise birçok grafin tabakasının bir biri üzerine kümelenmesi ile oluşmuştur. Tabakalar birbirlerine zayıf Van der Waals kuvvetleri ile bağlıdır. Bu da tabakaların kolayca hareket etmesine neden olur.



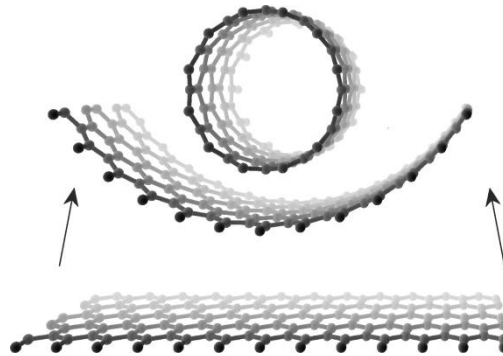
Şekil 1.2 Grafit yapısı *

Karbon nanotüpler nanometre ölçülerindeki grafin tabakasının silindir oluşturacak şekilde katlanması ile elde edilir. Karbon nanotüplerin özelliklerine daha sonra ayrıntılı olarak değinilecektir.

Karbon atomlarının kafes oluşturacak şekilde dizilmesi ile fulleren oluşur. Geometrik olarak futbol topuna benzer. En yaygın üyesi C_{60} 'dir.

1.1.1 Karbon Nanotüplerin Yapısı

Grafin levhasının bir eksen etrafında kendi üzerine kapanmasıyla oluşan, çapı birkaç nm (10^{-9} m) boyu birkaç mikrometre (10^{-6} m) uzunluğundaki içi boş silindir şeklindeki yapıya karbon nanotüp denir.



Şekil 1.3 Grafin yüzeyin sarılması †

* <http://www.benbest.com/cryonics/graphite.gif>, 2008

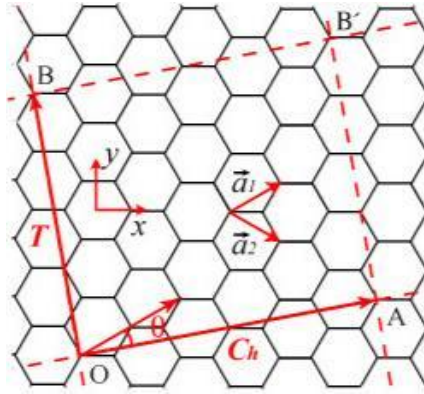
† http://www.worldscibooks.com/nanosci/etextbook/v002/v002_chap01.pdf, 2008

Grafit levhası yarımetaldir, yuvarlanarak nanotüp oluşturulduğunda; daire çevresinde yalnızca karbon atomları sıralanmaz, aynı zamanda elektronların kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları da uyumlu olarak düzenlenir. Radyal doğrultularda, elektronlar inceltilmiş tek katmanlı grafit düzlem tarafından sınırlanmıştır. Nanotübün daire çevresinde periyodik sınır şartları ortaya çıkmaktadır. Karbon nanotüpler (KNT) Iijima, (1991) tarafından fulerenin ark boşalması yöntemi ile sentezlenmesi esnasında keşfedilmiştir. Bu malzemelerin elektrik ve ısısal iletkenlikleri çok yüksektir. Bu tüplerin geometrisi, grafin şeridi tüp oluşturmak üzere silindir haline getirilmesiyle oluşur. $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleri, hegzagonal kafesteki birbirine dik olmayan gerçek uzay birim vektörleri ve n, m (n, m tamsayı, $0 \leq |m| \leq n$) katsayıları da bu birim vektörler doğrultusundaki genlikleri ile KNT ün katlama eksenini belirlenir. Eksen Chiral ($\vec{C}_h$) vektörüdür ve

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (n, m \text{ tamsayı}, 0 \leq |m| \leq n) \quad (1.1)$$

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right) \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a, -\frac{a}{2} \right) \quad (1.2)$$

şeklinde tanımlıdır.

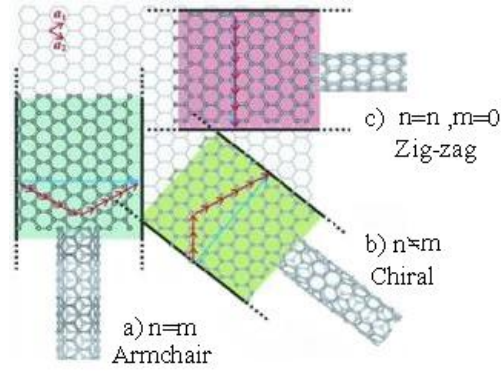


Şekil 1.4 Açılmış petek levha *

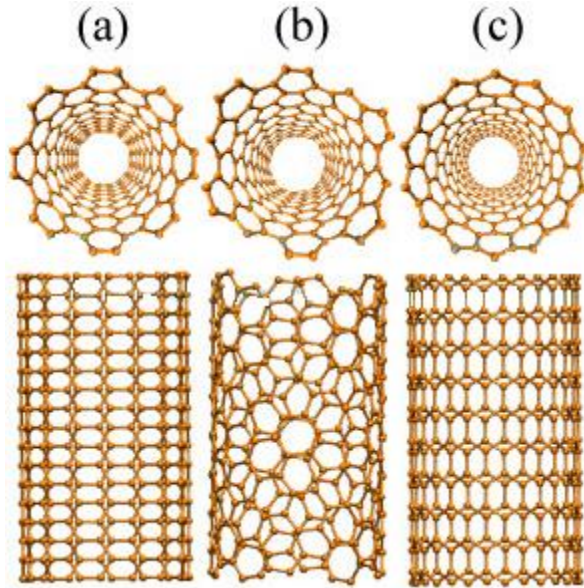
n ve m tamsayıları aynı zamanda KNT ün ismini de (m,n) şeklinde belirler. n ve m tamsayılarının değişimine göre KNT ün elektronik özelliği ve yapısı değişiklik göstermektedir.

* http://www.ks.uiuc.edu/Research/nanotube/lattice_combine.jpg, 2008

- m ve n tamsayılar birbirlerine eşit olduğunda (n,n) armchair nanotüp, metal özelliği gösterirler.
- $(m \neq n)$ ise chiral nanotüp olarak adlandırılır, elektronik yapıları m ve n nin değişimine göre farklılık göstermektedir.
- $n \neq n^+$ ve $m=0$ olduğunda $(n,0)$ zigzag nanotüp, $n-m \equiv 0 \pmod{3}$ metal özelliği ve $n-m \equiv 1 \pmod{3}$ ve $n-m \equiv 2 \pmod{3}$ yarıiletken özelliği göstermesi beklenir.

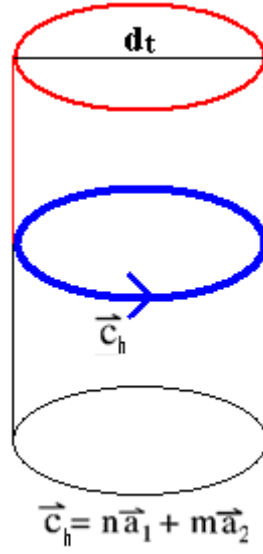


Şekil 1.5 Petek levha üzerinde tüplerin seçimi **



Şekil 1.6 Farklı KNT yapıları a) Armchair b) Chiral c) Zig-zag *

** <http://www2.phys.chemie.uni-muenchen.de/hartschuh/typo3temp/pics/8dac4d2b16.jpg>, 2008



Şekil 1.7 Chiral vektörünün KNT üzerinde gösterimi

Chiral vektörünün büyüklüğüne C dersek

$$|\vec{C}_h| = C = \sqrt{(n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2)^2} = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (1.3)$$

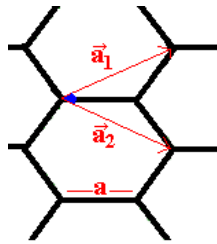
şeklinde olur.

KNT ün yarıçapı d_t de C yi yerine yazarsak,

$$d_t = \frac{C}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (1.4)$$

olarak buluruz.

$\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ 'nin ortogonal değildir yani skaler çarpımları sıfırdan farklıdır.



Şekil 1.8 Baz vektörleri

* http://www.ks.uiuc.edu/Research/nanotube/lattice_combine.jpg, 2008

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = a^2, \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{a^2}{2} \quad (1.5)$$

Burada a, bal peteği yapısındaki kafes sabitidir ve

$$a = 1,42 \text{ Å} \times \sqrt{3} = 2,49 \text{ Å} \quad (1.6)$$

değerindedir.

Chiral açısı θ , $\vec{C}_h$ vektörü ile $\vec{a}_1$ vektörü arasındaki açıdır. Kosinüs teoremi kullanılarak,

$$\cos\theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{C}_h| |\vec{a}_1|} = \frac{(n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) \cdot \vec{a}_1}{a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} a} = \frac{2na^2 + ma^2}{2a^2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} = \frac{(2n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (1.7)$$

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{(2n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \right) \quad (1.8)$$

Denklemden de görüldüğü gibi Chiral açısı (θ), “n” ve “m” katsayıları ile dolayısıyla da KNT ün tipi ile ilişkilidir.

Zig zag KNT için ($n=n$ ve $m=0$) ‘ı yerlerine yazarsak,

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{(2n+0)}{2\sqrt{n^2 + 0 + 0}} \right) \quad (1.9)$$

Buna göre, Zig zag KNT için $\theta=0^\circ$ olur.

Armchair KNT için ($m=n$) i yerlerine yazarsak

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{(2n+n)}{2\sqrt{n^2 + n^2 + nn}} \right) = \cos^{-1} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (1.10)$$

Armchair KNT için $\theta=30^\circ$ olur.

Chiral KNT için ise ($\theta<30^\circ$) olur.

Geçiş vektörü ($\vec{T}$), KNT lerin birim vektörünü tanımlar. Şekil 1.1 ‘de görüleceği gibi geçiş vektörü, tüp eksenine paralel ve chiral vektöre diktir. Baz vektörler cinsinden geçiş vektörü,

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (t_1, t_2 \in \mathbb{N}) \quad (1.11)$$

şeklinde tanımlanır. $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ nin birbirlerine dik olduklarından $\vec{C}_h \cdot \vec{T} = 0$ dir. $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ vektörlerini yerlerine yazıp $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörlerini yerlerine koyarsak,

$$(n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2)(t_1\vec{a}_1 + t_2\vec{a}_2) = 0 \quad (1.12)$$

$$nt_1\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 + nt_2\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 + mt_1\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1 + mt_2\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = 0 \quad (1.13)$$

$$nt_1a^2 + nt_2\frac{a^2}{2} + mt_1\frac{a^2}{2} + mt_2a^2 = 0 \quad (1.14)$$

$$nt_1 + \frac{nt_2}{2} + \frac{mt_1}{2} + mt_2 = 0 \quad (1.15)$$

$$t_1(2n + m) + t_2(n + 2m) = 0 \quad (1.16)$$

$(2m + n)$ ve $(2n + m)$ EBOB una d_R diyip ona bölersek,

$$t_1 = \frac{2m+n}{d_R} \quad t_2 = \frac{2n+m}{d_R} \quad (1.17)$$

Elde etmiş oluruz.

Diğer yandan m ve n nin EBOB una d dersek, d ile d_R arasında aşağıdaki bağıntılar yazılabilir.

$$d_R = \begin{cases} d, & (n - m) \text{ } 3d \text{ nin katı değil} \\ 3d, & (n - m) \text{ } 3d \text{ nin katı} \end{cases} \quad (1.18)$$

Geçiş vektörünün uzunluğu ;

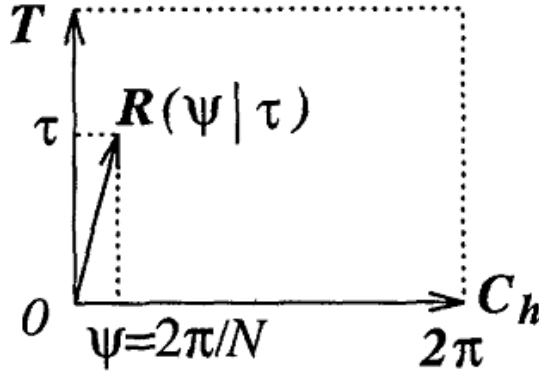
$$T = |T| = \frac{\sqrt{3}L}{d_R} \quad (1.19)$$

ile verilir.

Burada L , KNT ün çevre uzunluğunu göstermektedir. Vurgulanması gereken (n,m) ‘nin ortak böleni olduğunda ya da $(n-m)$, $3d$ ‘nin katı olduğunda T uzunluğunun fazlaca azalacak olmasıdır.

KNT eksenini etrafındaki dönmeyi, Ψ ve $\vec{T}$ yönündeki dönüşümü, τ ile göstererek Uzay grup simetri operatörü $R(\Psi|\tau)$ olur.

Karbon atom katı vektörü, i bir tamsayı olmak üzere ($i=1,\dots,N$) i defa 1D KNT birim hücre, iR ile verildi. iR birim hücrenin dışına çıktığında, içeride kalması için periyodik sınır koşulları kullanılarak geçiş üzerinden $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ vektörlerinin tamsayı katları ile kaydırırız.



Şekil 1.9 Birim hücrede vektörler (R. Saito vd., 1998)

$\vec{R}$ vektörü, KNT içindeki karbon atomlarının koordinatlarını üretmek için kullanıldı. $\vec{R}$ vektörü, bu vektörün KNT birim hücresinin $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ dik vektörleri üzerindeki izdüşümü ile ifade edilmeye uygundur. Bu durumda simetri vektörü $\vec{R}$, $\vec{C}_h$ yönündeki en küçük bileşene sahip katı vektör olarak tanımlanır ve $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ cinsinden $\vec{R}$,

$$\vec{R} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 \equiv (p, q), \quad (p \text{ ve } q \text{ aralarında asal}) \quad (1.20)$$

$\vec{R}$ 'nin $\vec{C}_h$ bileşeni veya $\vec{C}_h \cdot \vec{R}$ aşağıda verilen $\vec{T} \times \vec{R}$ değeri ile orantılıdır.

$$\vec{T} \times \vec{R} = (t_1 q - t_2 p)(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (1.21)$$

Denklem...1'in sağındaki $(t_1 q - t_2 p)$ terimi bir tamsayıdır. $\vec{R}$ 'deki "p" ve "q" en küçük katı vektör ($i=1$) elde edilecek şekilde seçildi. Öyle ki ,

$$t_1 q - t_2 p = 1, \quad (0 < np - mq \leq N) \quad (1.22)$$

Eğer t_1 ve t_2 'nin dışında ortak böleni yok ise, "p" ve "q" için bir tek çözüm vardır. denklem 3.12 'deki ikinci koşul, $0 < np - mq \leq N$, $\vec{R}$ 'nin bir boyutlu KNT birim hücre için mevcut olmasından kaynaklanmaktadır. Bu yüzden, denklem (3.2), (3.8) ve (3.9) kullanılarak,

$$0 \leq \frac{\vec{R} \cdot \vec{T}}{T^2} = \frac{|\vec{C}_h \cdot \vec{R}|}{L \cdot T} = \frac{np - mq}{N} < 1 \quad (1.23)$$

Benzer şekilde, denklem (3.6) ve (3.9) kullanılarak $\vec{R}$ 'nin 1D birim hücre içerisinde oluşundan dolayı bir diğer gerekli koşul elde edilir.

$$0 \leq \frac{\vec{R} \cdot \vec{C}_h}{L^2} = \frac{|\vec{R} \times \vec{T}|}{L \cdot T} = \frac{t_1 q - t_2 p}{N} \leq 1 \quad (1.24)$$

Ve denklem 3.14 kullanılarak aşağıdaki koşul elde edilir.

$$0 < t_1 q - t_2 p \leq N \quad (1.25)$$

Denklem 3.12 nin ilk kısmı, denklem 3.14'ü de sağladığından dolayı, $\vec{R}$ 'nin aşağıda verilen tanımına denklem 3.14'ün katılmasına gerek yoktur.

KNT birim hücrelerinin tüm iR , ($i=1, \dots, N$) N yer vektörlerinin tanımlanması için,

$i(t_1 q - t_2 p) = i$ eşitliği tüm i değerleri için uygulanır ve $i(t_1 q - t_2 p)$ nin en yüksek değeri N olarak tutulur.

NR 'nin $\vec{C}_h$ bileşeninin her zaman $|\vec{C}_h| = L$ olduğu gerçeği kullanılarak, iR vektörleri, KNT birim hücrelerinde eşit olmayan N tane bölge tanımlar ve böylece $\vec{C}_h$ yönünde birbirinden farklı değerlerde izdüşümlere sahip olurlar. Bu nedenle iR , ($i=1, \dots, N$), KNT hücresi içerisinde, eşit büyüklükte olmayan N tane atom bölgesi meydana getirir.

Fiziksel bakımdan, $\vec{R}$ vektörü, KNT eksen etrafındaki Ψ derece dönme ile $\vec{T}$ yönündeki τ çevirmesinin birleşiminden meydana gelmektedir ve şekil 3.3 de gösterilen $R(\Psi|\tau)$ ile belirtilen operasyon, chiral KNT ün temel uzay grup simetri operasyonunu gösterir. $\vec{R}$ vektörünün fiziksel anlamı, $\vec{R}$ 'nin $\vec{C}_h$ üzerindeki izdüşümü L/dt ile ölçeklenmiş ($L/dt = \pi$) “ Ψ ” açısını verirken, T üzerindeki izdüşümünün de karbon KNT ün 1D uzay grubunun temel simetri operasyonunun τ dönmesini vermesidir. (p, q) tamsayıları simetri operasyonu $(\Psi|\tau)$ 'nin $(0, 0)$ 'daki atoma uygulandığı zaman ulaşılan koordinatları tanımlar, örneğin $(\Psi|\tau)(0, 0) = (p, q)$. Eğer $(\Psi|\tau)$, KNT için bir simetri operasyonu ise, bu durumda $(\Psi|\tau)^2, (\Psi|\tau)^3, \dots, (\Psi|\tau)^N$ 'in tamamı, C_N ile tanımlanan Abelian grubun bağımsız simetri operasyonlarıdır. Burada, $(\Psi|\tau)^N = E$ birim operasyondur.

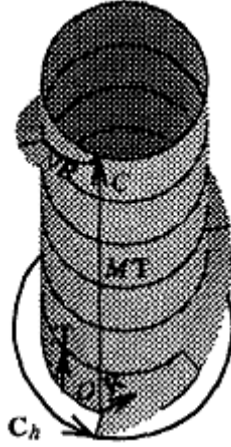
Gösterilen vektör çarpımları $\vec{R} \times \vec{C}_h$, $\vec{R} \times \vec{T}$ alınarak ve denklem (3.2), (3.8), (3.9), (3.12) ile verilen eşitlikler kullanılarak τ uzunluğu ve dönme açısı Ψ için aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$\tau = \frac{|\vec{R} \times \vec{C}_h|}{L} = \frac{(np - mq)|a_1 \times a_2|}{L} = \frac{(np - mq)T}{N} \quad (1.26)$$

$$\Psi = \frac{|\vec{T} \times \vec{R}|}{T} \frac{2\pi}{L} = \frac{d_R(t_1 q - t_2 p)}{\sqrt{3} L} \frac{\sqrt{3} a^2}{2} = \frac{2\pi}{N} \quad (1.27)$$

Ve bu tanımlamalar kullanılarak, dönme açısı, “ Ψ ”, $2\pi/N$ olur. Burada N, KNT ün 1D birim hücresindeki altıgen yapıların sayısıdır.

Şekil 1.10 ‘a göre, simetri operatörü , $(\Psi|\tau)^N$, şekil 3.4 de görüldüğü gibi kafes noktası 0 ‘ı, eşdeğer kafes noktası C’ye getirir.



Şekil 1.10 Simetri Operatörü(Saito vd., 1998)

$NR = (\Psi|\tau)^N$ vektörü, silindirik yüzeyde gösteriliyor. KNT etrafında 2π kadar döndürüldükten sonra NR, kafes noktası 0’a eşdeğer olan C noktasına ulaşır.

Burada,

$$NR = C_h + MT \quad (1.28)$$

ve

$$M \equiv (np - mq) \quad (1.29)$$

M, 0’dan NR noktasına ulaşmak için gerekli T vektörlerinin sayısını tanımlayan bir tamsayıdır.

1.1.2 Elektronik Özellikleri

Çalışmalar karbon nanotüplerin elektronik özelliklerinin geometrik yapılarına çok bağlı olduğunu ortaya çıkarmıştır. Karbon nanotüpler, burkulma derecelerine (chiralite) ve çaplarına bağlı olarak metal ya da yarı iletken olurlar. Karbon nanotüplerin elektronik

özelliklerinin geometrik özelliklere olan hassasiyeti (band-folding) canlandırması çerçevesinde anlaşılabilir. Bu hassasiyet grafin tabakasının kendine özgü bant yapısından (fermi seviyesini k-uzayında eşit olmayan yalnız iki noktada geçen enerji seviyelerine sahiptir.) ve elektron dalga vektörünün tüpün çevresi doğrultusundaki kuantizasyonundan kaynaklanmaktadır. Grafinin elektronik yapısı, grafin nanotüp haline getirilirken bant aralıklarının nasıl şekillendiğini ve dolayısıyla karbon nanotüplerin elektronik özelliklerini anlamak için önemlidir. İzole haldeki bir grafin tabakası fermi enerjisi civarındaki elektronik yapısı işgal edilmiş π bandı ve işgal edilmemiş π^* bandı tarafından belirlenir. Bu iki bant Fermi seviyesinde, Brillouin bölgesindeki K noktasında buluşur. Bir tüp oluşturulurken tüpün çevresi doğrultusunda uygulanan periodik sınır koşullarına bağlı olarak sadece bazı k-seviyelerine izin verilir. Tüpün metal mi yoksa yarı iletken mi olduğunu belirleyen bu izin verilen k-seviyelerinin K noktasını içerip içermediğidir. Eğer K noktasını içeriyorsa sistem durum yoğunluğu fermi seviyesinde sıfır olmayan metal, içermiyorsa yarı iletkendir.

Tek duvarlı karbon nanotüplerin metalliğini belirleyen genel kurallar; (n,n) nanotüpleri metal, (n,m) tüpleri $n-m=3j$, j sıfır olmayan bir tam sayı olmak üzere “küçük aralık” yarı iletken (aslında bu nanotüplerin metal olması gerekirken yarı iletken olması nanotüpün eğrilik etkilerinden dolayı j’nin sıfırdan farklı olmasından kaynaklanmaktadır. Fakat genelde deneysel gözlemlenebilen çap büyüklükleri dahilinde ve oda sıcaklığında eğrilik etkilerinin düşük olmasından kaynaklı olarak metalik olarak düşünülmektedirler.), diğer bütün nanotüpler “büyük aralık” yarı iletkenlerdir. Dolayısıyla karbon nanotüpler “büyük aralık, küçük aralık ve sıfır aralık” nanotüpler olmak üzere üç çeşittir.

1.1.3 Mekanik Özellikler

Karbon nanotüplerin en önemli mekanik özelliklerinden biri dayanıklılıklarının yanı sıra oldukça esnek olmalarıdır. Mikron ölçülerde bulunmayan bu özellik karbon nanotüplerin mekanik özelliklerini araştırmaya yöneltmiştir. Mekanik bozulmalar KNT lerin elektrik özelliklerini de etkilemektedir.

KNT lerin Young modülü ve gerilim kuvveti yüksektir. Hesaplar 1 nm uzunluğundaki TDKNT nin Young modülünün 0,6 - 0,7 TPa aralığında olduğunu göstermiştir. (Encyclopedia of Chemical Processing, 2006). Klasik mekanikten ℓ_0 uzunluğunda ve enine kesit alanı A_0 olan

ince bir çubuğun Young modülü, $E = \frac{\text{gerilim}}{\text{gerinim}} = \frac{F/A_0}{\delta l/l_0}$ olduğunu biliyoruz. Young modülü atomlar arasındaki kimyasal bağlarla ilişkilidir. Dolayısıyla KNT lerin Young modülü sp^2 bağ kuvvetine bağlıdır ve nanotüp C-C bağlarını önemli ölçüde bozacak kadar küçük değilse grafin tabakasının Young modülü ile aynı olmalıdır. Klasik yaklaşımda atomik yapı göz önüne alınmadığından grafin yaprağının katlanması ile Young modülünün değişimi beklenmez. Dolayısıyla klasik yaklaşım büyük çaplı nanotüpler için geçerlidir. Fakat küçük çaplara sahip tüpler için atomik yapı ve bağ dizilişleri dikkate alınmalıdır. Teori ve deneyler KNT lerin Young modüllerinin grafitin ki kadar hatta TDKNT lerinkinin daha da yüksek olabileceğini göstermiştir (Salvetat vd., 1999).

Bir maddenin dayanıklılığı Young modülünün yanı sıra maddenin geçmişine, basınca ve sıcaklığa da bağlıdır. Örneğin düşük sıcaklıklarda bütün kovalent maddeler gibi KNT ler çapına ve burkulma derecesine bağlı olmaksızın kırılırlar. Yine KNT lerin oda sıcaklığındaki esneklikleri yüksek dayanıklılıklarına ve hekzagonal ağ yapısına dayanmaktadır.

1.2 Moleküler Dinamik

MD simülasyonları yapı ve dinamiklerin moleküler seviyede görüntülenmelerini sağlar. En kullanışlı metotlardan biridir. Yapı ve özellik ilişkileri hakkında bilgi verir. Deneyimler genelde simülasyonlardan moleküler seviyede kullanışlı bilgi sağlamazlar. Böylelikle teorisyenler ve uygulamacılar materyal özelliklerine ait yeni fikirler edinmek için birlikte çalışabilirler. MD simülasyonları sentezlenmemiş yeni materyaller hakkında öngörülerde bulunmaya elverişlidir. Aynı zamanda özelliklerinin ölçümünün zor olduğu ya da anlaşılması zor olan mevcut materyaller hakkında da fikirler verir.

MD, hareketlerin klasik eşitliklerinin nümerik entegrasyonudur. Ayrıca MD, zaman içinde üretilmiş sistemlerin ardışık konfigürasyonlarıdır. MD simülasyonları atomun konum ve hızları zamana bağlı olarak değişen bir yörünge sağlar. MD simülasyonları teorisinde Newton hareket yasaları kullanılır ve yörüngeleri de Newton'un ikinci yasasının diferansiyel eşitliklerinin çözümüyle sağlanır.

$$F_i = m_i a_i \quad (1.30)$$

F_i , i. Parçacığı etki eden kuvvet

m_i ve a_i , i.ninci parçacığın kütle ve ivmesi

Bununla birlikte i.ninci parçacığa etki eden kuvvet, potansiyel enerji V'nin gradyenti olarak da gösterilebilir

$$F_i = -\nabla_r V \quad (1.31)$$

(1.30) ve (1.31) den

$$-\frac{dV}{dx_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (1.32)$$

i.'ninci parçacığın hareketinin yönü parçacığa etki eden bileşke kuvvetin yönünde olur.

Potansiyel enerjinin konuma göre değişimiyle, konumun zamana göre değişimi ilişkilendirilebilir.

Potansiyel, sistemdeki tüm atomların atomik konumlarının bir fonksiyonudur ve bu fonksiyonların karışık doğalarından dolayı hareket eşitliklerinin analitik bir çözümü yoktur. Bundan dolayı nümerik yöntemlerle çözülürler. Velocity verlet algoritması (1.32) eşitliğinin belirli bir zaman diliminde kullanılan atomların durumları ve önceki pozisyonlarına uyum sağlaması için kullanılır.

Bir MD simülasyonu faz uzayında zamanın bir fonksiyonu olan noktalar dizisi oluşturur. Bunlar belirli momentte ve sistemin farklı tatbikleriyle uyum içindedirler. Kullanılan temel küme tipleri:

- Mikrokanonik küme: (NVE): Termodinamik durum belirli sayıda atom N, belirli bir hacim V ve belirli bir enerji E ile karakterize edilir. Bu izole edilmiş sisteme karşılık gelir.
- Kanonik küme: (NVT): Termodinamik durumu belirli sayıdaki atom N, belirli bir hacim V ve belirli bir sıcaklık T ile karakterize edilmiş sistemlerin derlenmesidir.
- Isobarik küme: (NPT): Belirli sayıdaki atom N, belirli bir basınç P ve belirli bir sıcaklık T ile karakterize edilmiştir.
- Büyük kanonik küme (μVT): Termodinamik durum, belirli bir kimyasal potansiyel μ , belirli bir hacim V ve belirli bir sıcaklık T için karakterize edilmiştir.

1.2.1 Seküler Denklem

a_i , ($i = 1, 2, \dots$) örgü (lattice) vektörlerinin yönünde birim hücrelerinin öteleme simetrisi yüzünden örgünün herhangi bir Ψ dalga fonksiyonu Bloch'un teoremini sağlamalıdır;

$$T_{\vec{a}_1} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \Psi_i, (i = 1, 2, \dots) \quad (1.33)$$

Burada $T_{\vec{a}_1}$, $\vec{a}_1$ örgü vektörü boyunca öteleme operasyonu (işlemi) ve $\vec{k}$ 'de dalga vektörü. Ψ 'nin denklem (1.33)'ü sağlayan olası birçok fonksiyonel formu mevcuttur. En yaygın kullanılan ise Ψ 'nin düzlem dalgaların lineer bir kombinasyonu olduğu formdur. Düzlem dalgaların yaygın olarak kullanılma sebepleri ise;

Düzlem dalga fonksiyonunun integrasyonu kolaydır ve analitik olarak hesaplanabilir.

Nümerik doğruluk (kesinlik) yalnızca kullanılan düzlem dalganın sayısına bağlıdır.

Ancak düzlem dalga metodunun da getirdiği bazı sınırlamalar vardır;

Ölçüm sıklası geniştir.

Düzlem dalga fonksiyonunu katıdaki diğer atomik orbitallerle bağdaştırmak zordur.

Denklem (1.33)'ü sağlayan başka bir fonksiyonel form ise atom ya da birim hücredeki j . atomik orbitale dayanır. Bir sıkı bağ, $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$ Bloch fonksiyonu;

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}), (j=1, \dots, n) \quad (1.34)$$

ile verilir. Burada $\vec{R}$ atomun konumu, φ_j ise j durumundaki atomik dalga fonksiyonunu ifade eder. Birim hücredeki atomik dalga fonksiyonlarının sayısı n ile belirtilir ve verilen bir $\vec{k}$ dalga vektörü için katıda n tane Bloch fonksiyonuna sahibiz. Denklem (1.34) de $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$ 'yi oluşturmak için φ_j , $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ faz faktörü ile çarpılır ve sonrada tüm kristalin $\vec{R}$ örgü vektörleri üzerinden toplam alınır.

Bloch fonksiyonlarında atomik orbitaller kullanmanın faydaları şunlardır;

- Düzlem dalgaların sayısı ile karşılaştırıldığında baz fonksiyonlarının sayısı n , daha az olabilir.
- Bu metodun kullanımıyla formülü kolayca türetebiliriz.

Sıkı bağ metodunun getirdiği sınırlamalar ise şunlardır;

- Nümerik doğruluğu değerlendirmek için basit bir kural yoktur.
- Atomik orbitaller interatomik bölgeyi tanımlamazlar.

Bundan sonra artık (1.34) denkleminin sıkı bağ fonksiyonlarını Bloch fonksiyonları olarak betimlenecek. Açık olarak görülmektedir ki (1.34) denklemi (1.33) denklemini sağlamaktadır. Çünkü;

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}-\vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}-\vec{a})} \varphi_j(\vec{r} - (\vec{R}-\vec{a})) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) \quad (1.35)$$

Burada $\vec{a}_i$ yönünde $M = N^{\frac{1}{3}}$ birim vektörleri için kullandığımız periyodik sınır koşulu;

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r} + M\vec{a}_i) = \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \quad (i=1, \dots, 3) \quad (1.36)$$

$T_{M\vec{a}_i} = 1$ öteleme vektörünün maruz kaldığı sınır koşulu ile tutarlı. Bu sınır koşulundan dekle (1.34) de ortaya çıkan faz faktörü $e^{ikM a_i} = 1$ olur.

k dalga sayısı da p tam sayısına bağlıdır;

$$k = \frac{2p\pi}{M a_i}, \quad (p=0, 1, \dots, M-1), \quad (i=1, \dots, 3) \quad (1.37)$$

Üç boyutta $\vec{k}$ dalga vektörü x, y, z yönlerinde k_x, k_y, k_z olarak tanımlanır. Bu yüzden

$M^{-3} = N$ dalga vektörleri ilk Brillouin bölgesinde mevcuttur. Burada k_i , kontinuum (uzay-zaman süreklisi) değişkenleri olarak düşünülebilir.

n, Bloch dalga fonksiyonlarının sayısı olmak üzere katıdaki $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ ($j = 1, \dots, n$) özfonksiyonları aşağıda gösterildiği gibi $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$ Bloch fonksiyonlarının lineer bir kombinasyonu olarak tarif edilir;

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j=1}^N C_{jj}(\vec{k}) \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) \quad (1.38)$$

Burada C_{jj} 'ler katsayılarıdır. $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ fonksiyonlarının Bloch'un teoremini sağlaması gerektiğine göre, (1.38) denklemindeki toplam yalnızca $\vec{k}$ 'nin aynı değerleri ile $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$

Bloch orbitalleri için alınır.

j. $E_j(\vec{k})$ ($j=1,\dots,n$) özdeğeri $\vec{k}$ 'nın bir fonksiyonu olarak şöyle tanımlanır;

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^* H \Psi_j dr}{\int \Psi_j^* \Psi_j dr} \quad (1.39)$$

Burada H katının Hamiltonyenidir. Denklem (1.38) 'yı denklem (1.39) de yerine yazar ve indislerde bir değişiklik yaparsak aşağıdaki denklemi elde ederiz;

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | H | \Phi_j \rangle}{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | \Phi_j \rangle} = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} \quad (1.40)$$

Burada Bloch orbitalleri üzerinden integraller, $H_{jj'}(\vec{k})$ ve $S_{jj'}(\vec{k})$ transfer integral matrisleri olarak adlandırılır ve örtüşme (overlap) integral matrisleri sırasıyla aşağıdaki gibi tanımlanır;

$$H_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | H | \Phi_j \rangle, S_{jj'}(\vec{k}) = \langle \Phi_j | \Phi_j \rangle \quad (j, j' = 1, \dots, n) \quad (1.41)$$

Verilen bir $\vec{k}$ değeri için Denklem (1.41) da $H_{jj'}(\vec{k})$ ve $S_{jj'}(\vec{k})$ $n \times n$ matrislerinin değerlerini sabitlersek, C_{ij}^* katsayısı $E_i(\vec{k})$ 'yı minimize etmek için en iyi şekilde kullanılmış olur. Burada şunu da belirtmeli ki C_{ij}^* katsayısı $\vec{k}$ 'nın da bir fonksiyonudur. Bu yüzden her $\vec{k}$ için C_{ij}^* tayin edilmelidir. Diğer $C_{ij'}$, $C_{ij'}^*$ ve C_{ij} katsayılarını sabitlerken C_{ij}^* 'nin kısmi türevini aldığımızda yerel minimum durum için aşağıda gösterildiği gibi sıfır elde ederiz;

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = \frac{\sum_{j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} - \frac{\sum_{j,j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{(\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'})^2} \sum_{j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = 0 \quad (1.42)$$

Çünkü C_{ij} genellikle serbestlik derecesi iki olan kompleks bir değişkendir, reel ve kompleks kısımları vardır, C_{ij} ve C_{ij}^* 'nin her ikisi de birbirinden bağımsız olarak değiştirebilir.

(1.42) denklemini her iki taraftan $\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}$ ile çarparsak ve (1.42) denkleminin ikinci teriminin içine (1.40) denklemindeki $E_i(\vec{k})$ ifadesini yazarsak;

$$\sum_{j,j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = E_i(\vec{k}) \sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} \quad (1.43)$$

Bir sütun vektör tanımlarsak;

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

(1.43) denklemini şöyle ifade ederiz;

$$HC_i = E_i(\vec{k})SC_i \quad (1.45)$$

(3.13) denkleminin sağ tarafının işaretini değiştirip sol tarafa alırsak $[H - E_i(\vec{k})S]C_i = 0$

elde ederiz. $[H - E_i(\vec{k})S]$ matrisinin tersi mevcutsa, $C_i = 0$ elde etmek için her iki tarafını $[H - E_i(\vec{k})S]^{-1}$ ile çarpalım. (Burada 0 null (sıfır) vektörü ifade eder.) Yani hiçbir dalga fonksiyonu elde edilmez. Böylece verilen özfonksiyonlar ters matris mevcut olmayınca verilen şu koşul ile tutarlı olur;

$$\det[H - ES] = 0 \quad (1.46)$$

(1.46) denlemi seküler denklem olarak adlandırılır ve n dereceli bir denklemdir ve verilen bir $\vec{k}$ için çözümü ($i=1, \dots, n$) olmak üzere $E_i(\vec{k})$ 'nin bütün n özdeğerlerini verir.

(1.39) ve (1.43) denklemlerinde $E_i(\vec{k})$ ifadesini kullanırsak C_i katsayıları $\vec{k}$ 'nin bir fonksiyonuymuş gibi tanımlanabilir. $E_i(\vec{k})$ enerji bandları ya da enerji dispersiyon bağıntılarını elde etmek için (1.46) seküler denklemini yüksek simetri $\vec{k}$ noktalarının bir sayısı için çözeriz (Dereli, 2003).

1.2.2 Sıkı Bağ Moleküler Dinamik

Sıkı bağ moleküler dinamik yöntemi (SBMD) kuantum mekaniği ile sistemlerin elektronik özelliklerini açıklayarak deneysel sonuçlarla bağdaştırmak içindir.

1.2.2.1 Sıkı-Bağ Formalizmi

Bir sistemin Hamiltonyenini çekirdek iyonları ve değerlik elektronlarından oluşturarak yazılırsa,

$$H_{top} = T_i + T_e + U_{ee} + U_{ie} + U_{ii} \quad (1.47)$$

Şeklindedir.

Burada; T , kinetik enerjiyi, U , Potansiyel enerjiyi, i , iyonları ve e , elektronları göstermektedir. Çekirdeğin hızının, elektronun hızıyla karşılaştırıldığında ihmal edilebilir. Yani çekirdek hareketsiz gibi kabul edilebilir. Bu yaklaşımla (1.47) denklemi tek elektronlu sisteme indirgenerek çözülebilir hale gelir. Hamiltoniyeni,

$$h = T_e + U_{ee} + U_{ie} \quad (1.48)$$

Şeklini alır. n . özfonksiyonuna karşılık gelen n . özdeğer fonksiyonu ε_n ise,

$$h|\Psi_n\rangle = \varepsilon_n |\Psi_n\rangle \quad (1.49)$$

olur. Yapıda, çekirdekler ile elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi sebebiyle kesikli enerji seviyeleri bulunan serbest atomlar bölgelere ayrılır. Sıkı bağ formalizmi, yapı içindeki elektronun dalga fonksiyonunu $|\Psi_n\rangle$, atomik yörüngelerin $|\Phi_{l\alpha}\rangle$ doğrusal kombinasyonu şeklinde göstermektedir:

α iyonunun n . durumdaki l yörüngesinin doluluk katsayısı $C_{l\alpha}^n$ dır. l yörünge sayısı, α iyon numarasıdır.

Periyodik potansiyele sahip N atomlu kristal için;

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} |\Phi_{l\alpha}\rangle \quad (1.50)$$

Bloch fonksiyonu şeklindedir. $\vec{R}$, atomun konumudur.

$|\Phi_{l\alpha}\rangle$, baz seti dik olmadığından

$$\langle \Phi_{l'\beta} | \Phi_{l\alpha} \rangle \neq 0 \quad (1.51)$$

dir. Genelleştirilmiş seküler denklem,

$$\sum_{l\alpha} \langle \Phi_{l'\beta} | h | \Phi_{l\alpha} \rangle C_{l\alpha}^n = \sum_{l\alpha} \varepsilon_n (\delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} + S_{ll',\alpha\beta}) C_{l\alpha}^n \quad (1.52)$$

Şeklinde yazılır. Seküler denklemin çözümü (I birim matris olmak üzere)

$$hC^n = \varepsilon_n (S + I)C^n \quad (1.53)$$

dir. Sıkı bağ moleküler dinamik simülasyonlarında yüksek mertebeli sistemler için dik olmayan baz setlerinin kullanılması elverişli değildir. Bilgisayar her adım için örtüşme matrisini hesaplayacağı için bilgisayarı meşgul edecektir. Bunun yerine dik atomik

yörüngelerden oluşan $\varphi_{l\alpha}$ “Löwdin” baz seti kullanılabilir.

$$\sum_{l\alpha} (\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle - \varepsilon_n \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta}) b_{l\alpha}^n = 0, \quad h b^n = \varepsilon_n b^n \quad (1.54)$$

Şeklinde yazılır. $b^n = b_{l\alpha}^n$ doğrusal kombinasyonun yeni baz setinin katsayıları olmak üzere,

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{l\alpha} b_{l\alpha}^n |\varphi_{l\alpha}\rangle \quad (1.55)$$

$$\langle \varphi_{l'\beta} | \varphi_{l\alpha} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} \quad (1.56)$$

İle verilir. Löwdin yörüngeleri dik olmayan yörüngelerin tüm simetri özelliklerine sahiptir. Dik sıkı bağ modelinde en önemli kısım tek-elektron hamiltonyeninin “hopping tümlevleri” denilen $\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle$ matris elemanlarının çözümüdür. Bu çözümde Slater ve Koster (1954) göre şu yaklaşımları yapmak gerekir:

- Minimal baz seti seçilir.
- Yalnız çiftli etkileşimler hesaba katılır.
- Hopping tümlevi atomlar arası mesafeye bağlıdır. Belirli mesafeye kadar olan etkileşimler alınır.

1.2.2.2 O(N) Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi

Klasik SB teorisi Schrödinger Denklemini hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle ters uzayda direk olarak çözülür ve atom sayısının kübü ile orantılı $O(N^3)$ kadar çözüm zamanı gereklidir.

Diğer taraftan $O(N)$ metodu enerji bandını reel uzayda çözer ve bant enerjisi her atomun bağlanmasına katkıda bulunur. Yük dağılımı, toplam enerji, her atom üzerindeki bütün kuvvetler gibi sistemin bütün özelliklerinin bilindiği $O(N)$ metodlarında bir elektronun etkin Hamiltonyenini tam hesaplayabilmek için bazı yaklaşımlar yapmak gerekir. Bu yaklaşımlar yerel çevreye bağlılık veya küçük bir komşulukla ilgili olma prensibi gibi fiziksel varsayımlara dayanır. simülasyon zamanı atom sayısı (N) ile doğru orantılı olarak değişir (Bowler vd., 2005) $O(N)$ metodu ile zamandan büyük ölçüde kazanç sağlanmış kazanılır.

Bütün $O(N)$ metodlarında tek-elektron hamilton denkleminin çözümlerine yaklaşım sağlanır. $O(N)$ yaklaşımı, bilgi aktarımı “Paralel Virtual Machine” (PVM) kütüphanelerinin kullanılmasıyla paralel olarak daha etkin kullanılabilir.

Kullanılan programda “Divide and Conquer” (DAC) yaklaşım metodu kullanılmaktadır

(Ordejon, 2001). Öncelikle sistem alt sistemlere bölünerek ele alınır. Alt sistemlerin elektron yoğunlukları hesaplanıp tüm sistem üzerinden toplam alınır. Alt sistemler atomik yörüngeler yerine baz fonksiyonları ile değerlendirilirler ve komşu atomların baz fonksiyonları yardımıyla daha hassas hale getirilirler. Komşu atomlara “buffer” denir. Bufferin Schrödinger denklemi (1.54) ile aynıdır. alt sistemlerin hamilton matrislerinin köşegenleştirilmesiyle özdeğer ve özvektörler bulunur.

O(N) paralel SBMD algoritmaları Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilmiştir (Dereli ve Özdoğan, 2002, 2003(a); 2003(b)).

KNT lerin simülasyonuna başarı ile uygulanmıştır (Dereli ve Söngü, 2007(a), 2007(b)).

2. METOD VE SONUÇLAR

Karbon nanotüp (KNT) ler chiral vektör ($\vec{C}_h(n, m)$) 'le tanımlanır, üç çeşit KNT vardır.

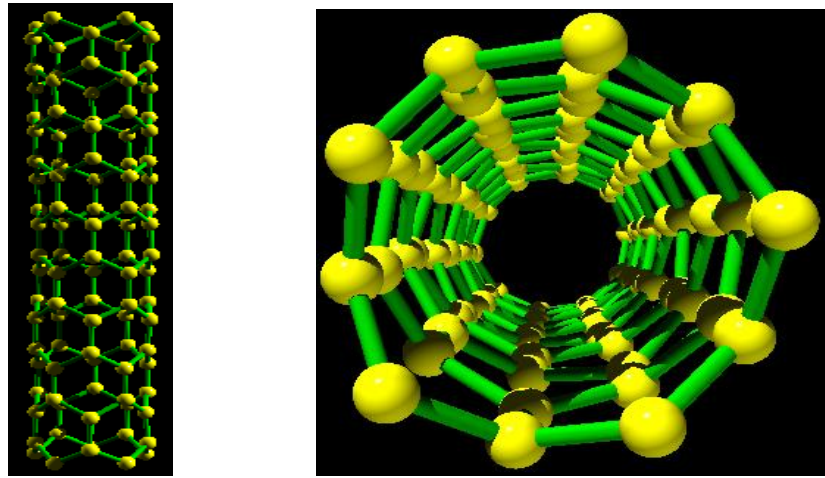
1. Armchair KNT ($n=m$)
2. Chiral KNT ($n \neq m$)
3. Zig-zag KNT ($n, 0$)

Bunlardan sıkıştırılıp germeye karşı elektronik yapısı duyarlı olan Zigzag yapılı KNT lerdir. KNT lerin çap uzunluklarının etkisinin de görülebilmesi için KNT ler farklı çap bölgelerinden seçildi. Ayrıca “n” parametresinin “mod3” deki kalanlarına göre sınıflandığında farklı elektronik özellikler göstermesi beklenmekte. $n-m \equiv 0 \pmod{3}$ için (15,0) ve (27,0) KNT leri, $n-m \equiv 2 \pmod{3}$ için (5,0) ve (26,0) KNT leri ile çalışıldı. Seçilen KNT lerin simülasyondan sonraki yarıçapları tablo 2.1 de verilmiştir.

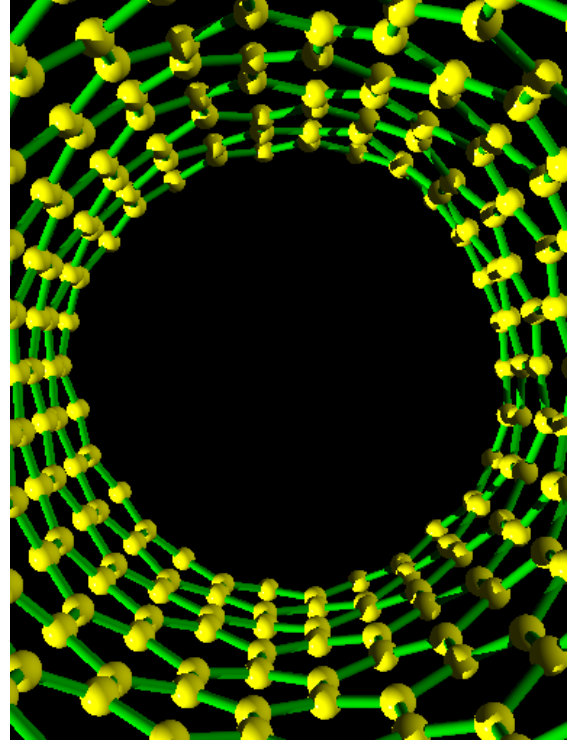
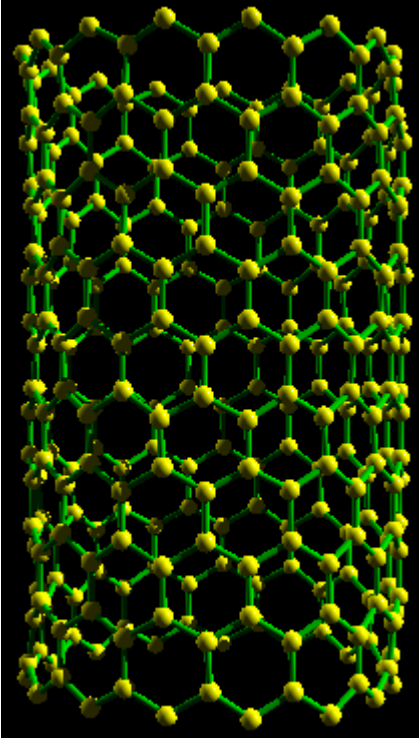
Tablo 2.1 çalışılan KNT lerin yarıçapları

$\vec{C}_h(n, m)$	Yarıçap (Å) (simülasyon)
(5,0)	1,988
(15,0)	5,882
(26,0)	10,184
(27,0)	10,575

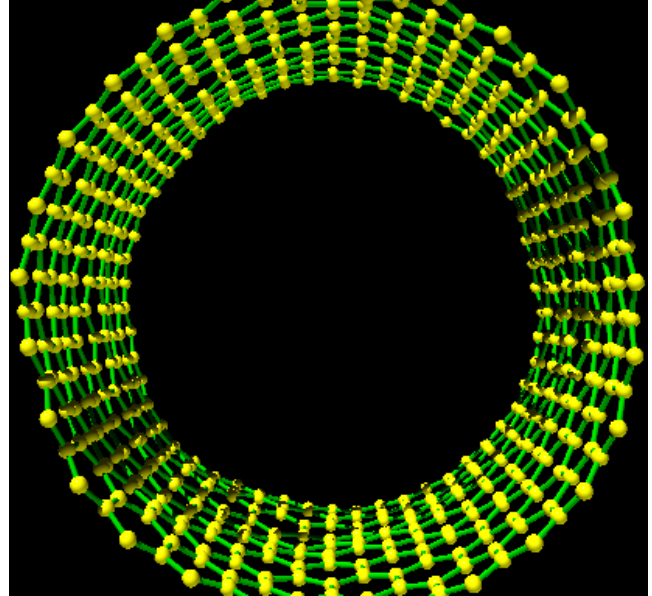
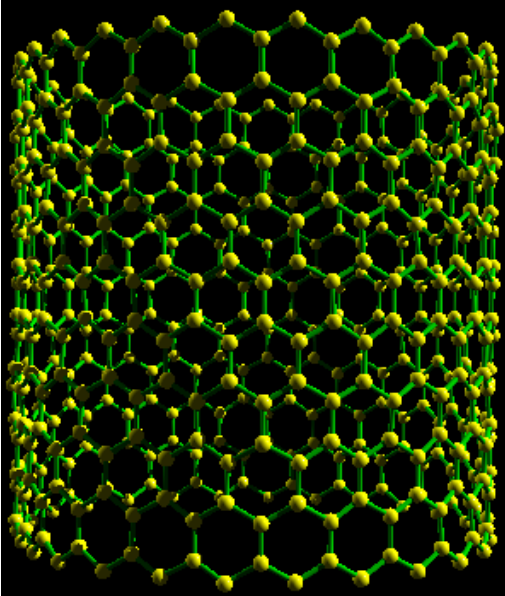
KNT lerin şekilleri aşağıda gösterilmiştir.



Şekil 2.1 (5,0) KNT ünün yan ve dik görünüşü



Şekil 2.2 (15,0) KNT ünün dik ve yan görünüşü



Şekil 2.3 (26,0) KNT ünün dik ve (27,0) KNT ünün yan görünüşü

KNT lerdeki alt sistem büyüklüğünün (Buffer skin size) seçimi $O(N)$ ve $O(N^3)$ algoritmalarının uyumu için önemlidir. Birim hücre büyüklüğü olması gerekenden büyük seçilirse simülasyon zamanı artmaktadır bunun yanı sıra küçük seçilirse yanlış sonuçlar vermektedir. Bunun için $O(N^3)$ - $O(N)$ farkının (hata) minimum seçilmesi gerekmektedir. Daha önceden bu hesaplar Prof. Dr. Gülay DERELİ danışmanlığında “01-01-2004-04” numaralı YTÜ-BAPK projesi ile kurulan Karbon Nanotüp simülasyon Laboratuvarı’nda Necati VARDAR tarafından “Farklı Simetrik Yapılardaki Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunluklarının simülasyonu” isimli yüksek lisans tezinde hesaplanmış ve “Çizelge 4.2 Zig-Zag KNT ler için Buffer Skin Size (Å) Değerleri” de gösterilmiştir.

Tablo 2.2 çalışılan KNT lerin Alt sistem büyüklükleri (Buffer Skin Size), (Vardar, 2006)

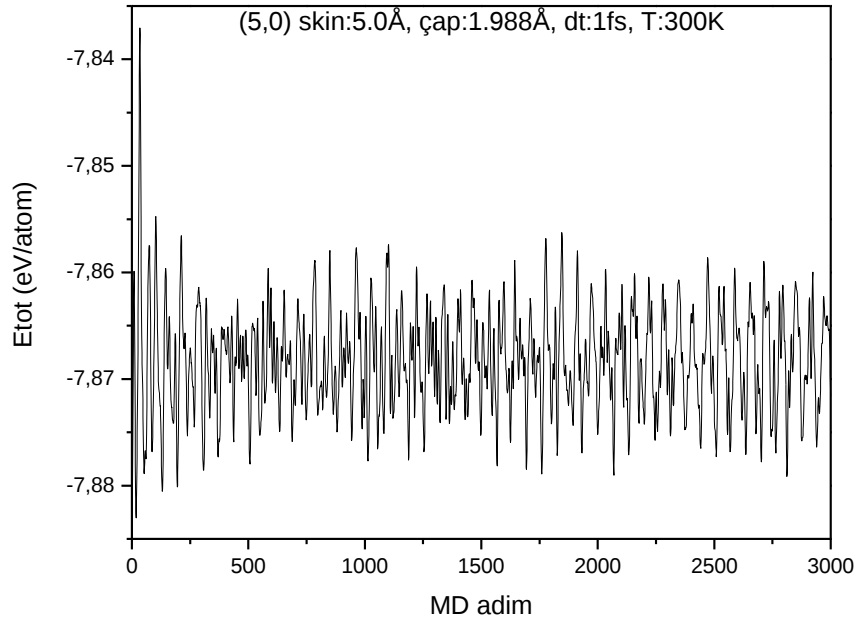
$\vec{C}_h(n, m)$	Alt Sistem Büyüklüğü (Å)
(5,0)	5,0
(15,0)	4,8
(26,0)	4,7
(27,0)	4,7

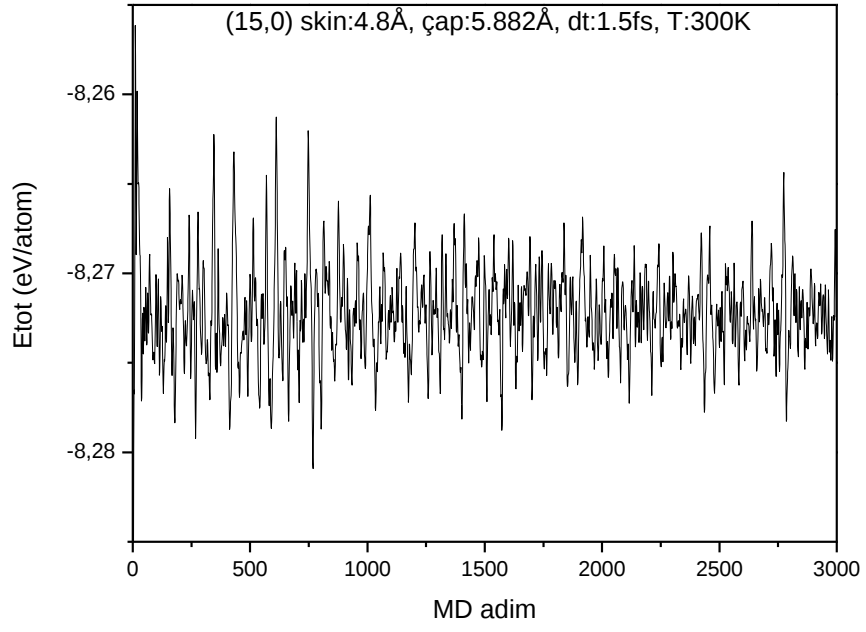
Simülasyonda KNT lerin boyunu belirleyen nlayer parametresi 20 olarak seçildi.

Oluşturulan KNT ler 300K ve 0,025eV elektronik sıcaklıkta sabit tutuldu. Moleküler Dinamik (MD) adım 1fs zamanında 2000 adım uygulandı. (26,0) ve (27,0) KNT leri dengeye ulaştı fakat (5,0) ve (15,0) KNT lerinde denge durumu gözlenmedi. KNT lerin dengeye gelmesi için (5,0) 1fs zamanında 3000 MD adım çalıştırılırken, (15,0) KNT ü 1,5fs zamanında 3000 MD adım çalıştırıldı.

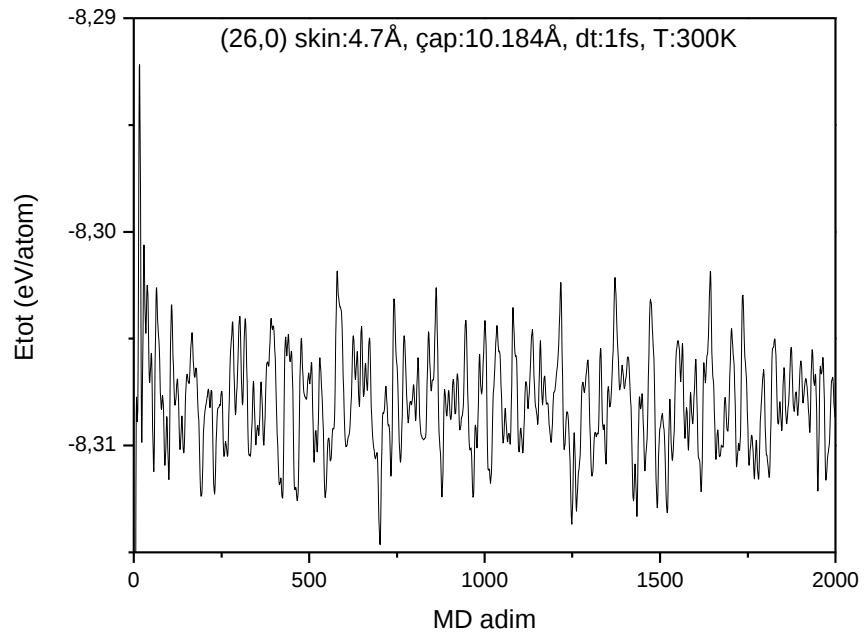
Tablo 2.3 KNT ler gerilmeden önce ortalama dengelenme enerjileri

$\vec{C}_h(n, m)$	E_{tot} (eV/atom) (simülasyon)
(5,0)	-7,86830
(15,0)	-8,27224
(26,0)	-8,30806
(27,0)	-8,30923

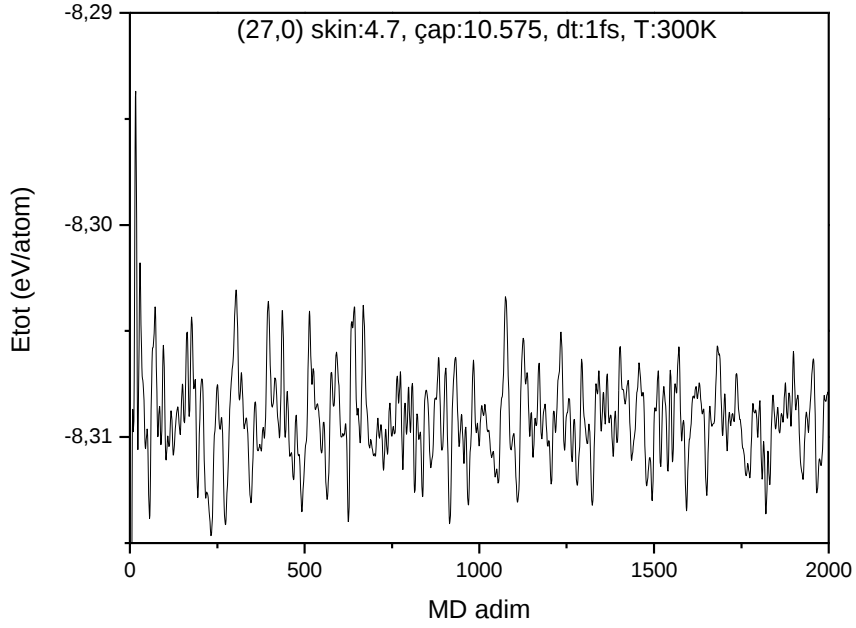
Şekil 2.4 (5,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği



Şekil 2.5 (15,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği



Şekil 2.6 (26,0) KNT ünün E_{tot} - MD adım grafiği



Şekil 2.7 (27,0) KNT ünün E_{tot} -MD adım grafiğı

KNT lere gerinim uygulanmadan önceki simulasyonlarda elde edilen fermi enerji seviyeleri ve fermi enerjisi civarındaki bant aralığı genişlikleri aşağıdaki gibidir.

Tablo 2.4 Gerinim uygulanmadan önceki Fermi enerji seviyeleri ve Bant aralıkları

$\vec{C}_h(n, m)$	E_{fermi} (eV)	Bant aralığı genişliği (eV)
(5,0)	3,336	0,93
(15,0)	3,711	0,01
(26,0)	3,715	0,20
(27,0)	3,717	0,01

Bant aralıkları incelendiğinde 0,01eV değeriyle (15,0) ve (27,0) KNT lerinin metal özelliğı, 0,2eV ve daha yüksek değeriyle (5,0) ve (26,0) KNT leri yarıiletken özelliğı göstermektedir.

Eksenel gerinim parametresi (ϵ): l_0 tüpün gerinim uygulanmadan önceki boyu olmak üzere,

tüpün boyunu istenilen miktarda sıkıştırıp çekilerek oluşturulan yeni boyu l olsun. Tüpün boyundaki değişimin tüpün boyuna oranı tüpün eksenel gerinim parametresi epsilon (ϵ) değeridir ve

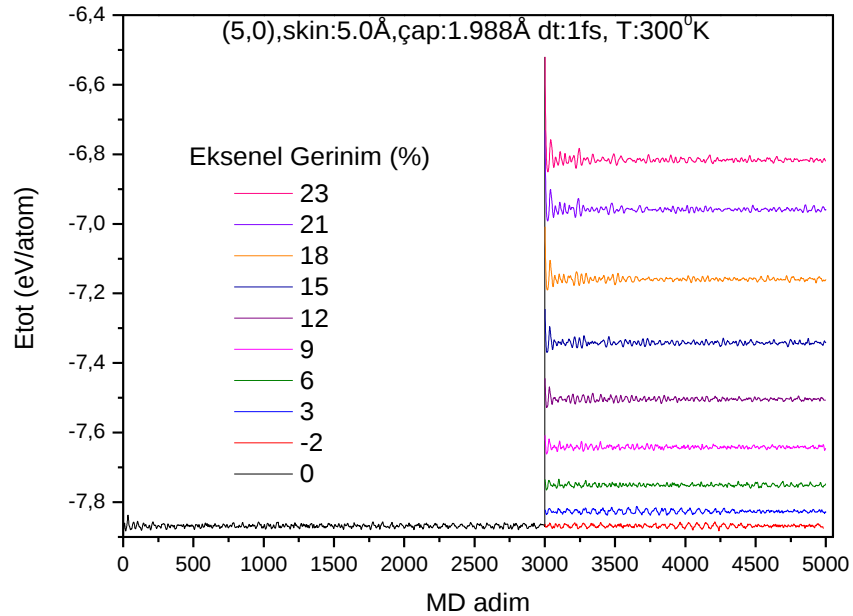
$$\% \epsilon = \frac{l-l_0}{l_0} \cdot 100 \quad (2.1)$$

ile hesaplanır. Kullanılan programda istenilen “ ϵ ” değeri için girilen parametre ile değiştirilebilir. ϵ ‘un pozitif değerleri KNT ün gerilme miktarını gösterirken, negatif değerleri ise KNT ün sıkıştırılma miktarını gösterir.

Denge durumu sağlanmış KNT lere %3, 6, 9, 12, 15, 18, 21 ve 23 oranında germe ve %-1, -2, -3, -4, -5, -6, -7, -8 ve -9 oranında sıkıştırma 2000 MD adım uygulandı.

(5,0) KNT ü için uygulanan gerinimlerde anlaşılamayan sebeplerden dolayı %-2 sıkıştırma değerinin haricindeki sıkıştırmalarda program sonlanamadı. Bu sebeple (5,0) KNT ü %3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 23 ve -2 gerinim değerleri için incelendi.

(5,0) KNT:

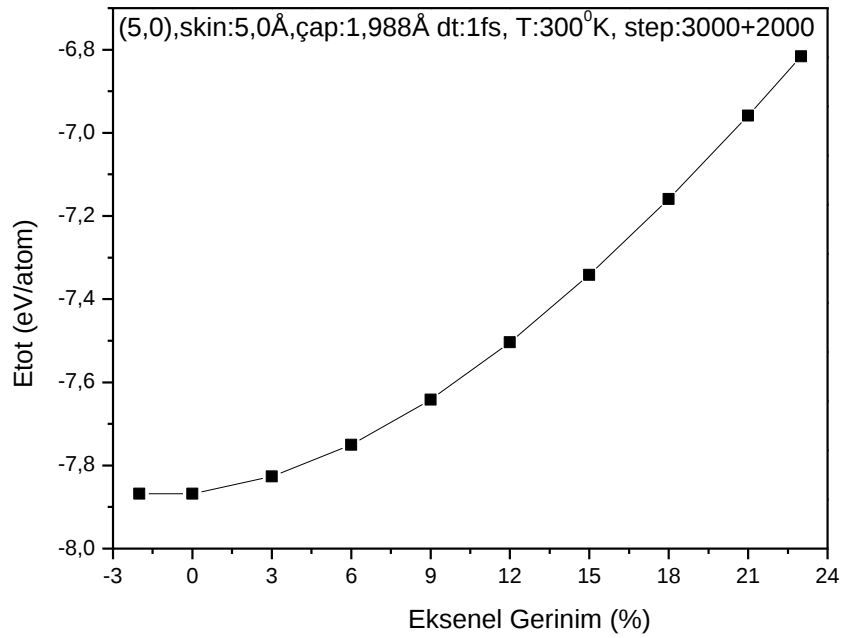


Şekil 2.8 (5,0) KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği

Tablo 2.5 (5,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu

ϵ (%)	E_{tot} (eV/atom)
23	-6,81614
21	-6,95862
18	-7,15901
15	-7,34183
12	-7,50382
9	-7,64152
6	-7,75067
3	-7,82644
0	-7,86830
-2	-7,86810

KNT e sıkıştırma ve germe uygulandıktan sonra atom başına ortalama enerji değeri sayısal olarak azaldı. Küçük gerinim değerlerinde dengeleme enerjisi çok küçük değişiklik gösterdi. Gerinim değerleri büyüdükçe enerji değerlerindeki değişim arttı.

Şekil 2.9 (5,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği

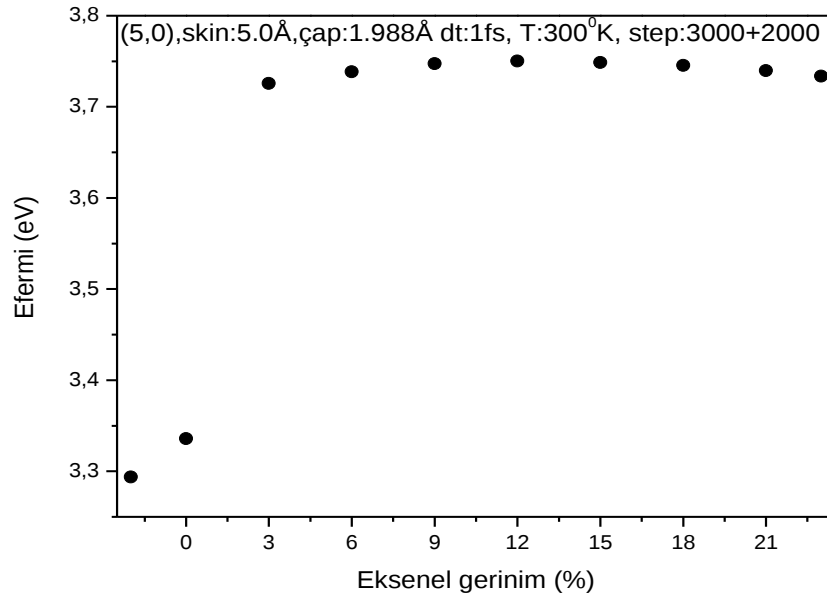
Germe değerleri ile atom başına ortalama toplam enerji grafiği eksponansiyel olarak değişti.

Fermi enerji seviyesi;

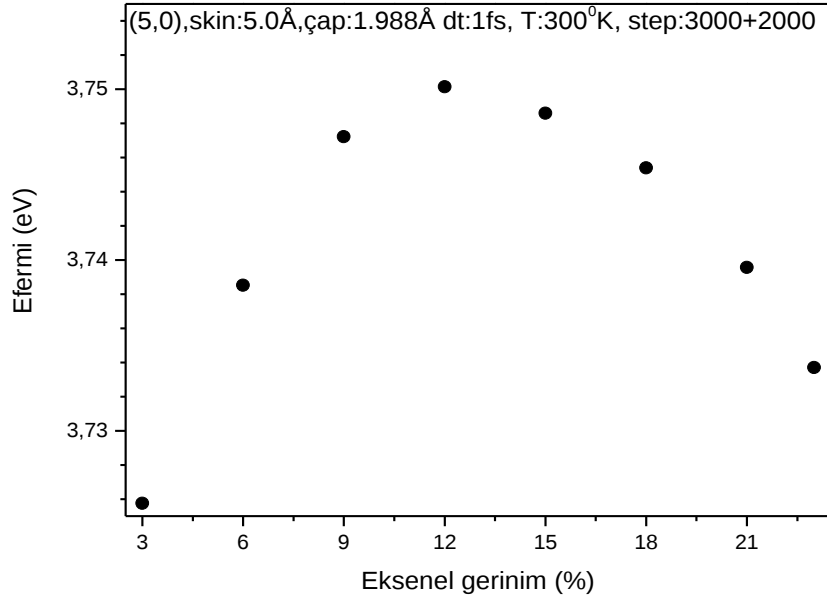
Tablo 2.6 (5,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu

ϵ (%)	E_{fermi} (eV)
23	3,73370
21	3,73956
18	3,74540
15	3,74860
12	3,75014
9	3,74723
6	3,73852
3	3,72574
0	3,33569
-2	3,29363

KNT e %3 germe uygulanınca fermi enerji seviyesinde yaklaşık olarak 0,4eV luk ani yükselme gözlemlendi. Germe devam edince küçük değişimler oldu. Sıkıştırma uygulanınca fermi enerji değeri azaldı.



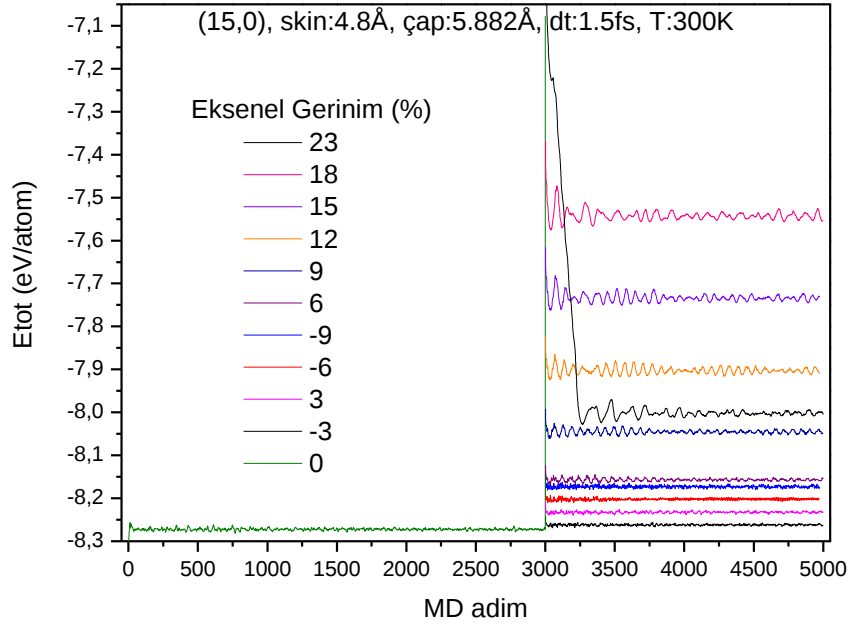
Şekil 2.10 (5,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği



Şekil 2.11 (5,0) KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği

Fermi enerji seviyesi %3 ile %12 germe değerlerinde $\sim 0,21$ eV arttı, %12 ile %23 germe değerleri arasında $\sim 0,17$ eV azaldı.

(15,0) KNT :



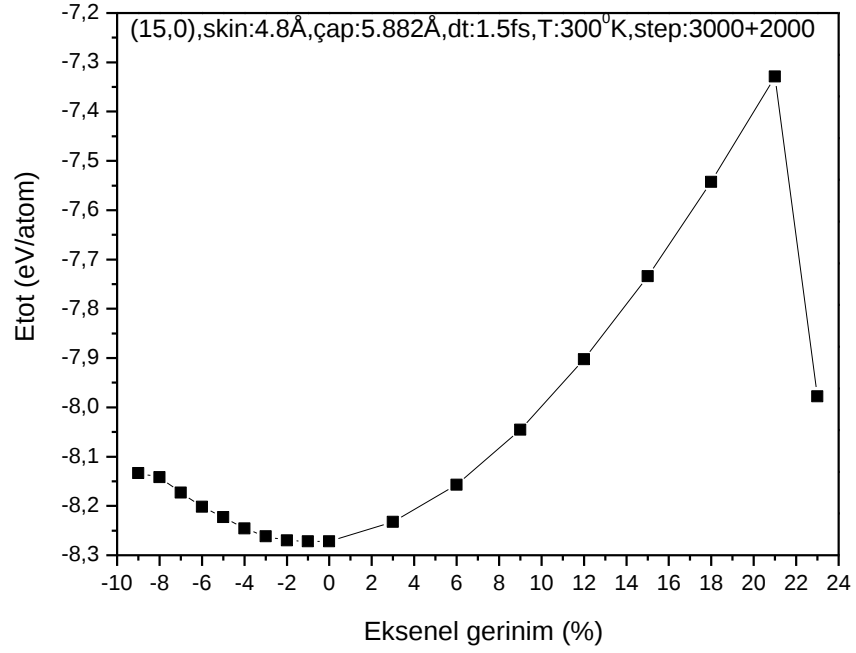
Şekil 2.12 (15,0) KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği

Tablo 2.7 (15,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu

ϵ (%)	E_{tot} (ev/atom)	ϵ (%)	E_{tot} (ev/atom)
23	-7,97766	-9	-8,13357
21	-7,32900	-8	-8,14177
18	-7,54255	-7	-8,17307
15	-7,73403	-6	-8,20202
12	-7,90248	-5	-8,22282
9	-8,04520	-4	-8,24560
6	-8,15686	-3	-8,26190
3	-8,23257	-2	-8,26981
0	-8,27224	-1	-8,27216

KNT e sıkıştırma ve germe uygulandıktan sonra atom başına ortalama enerji değeri sayısal olarak azalmaya başladı. %-1 sıkıştırması için E_{tot} daki değişim 0,00008 eV değerindeyken. %-2 sıkıştırma değeri için E_{tot} daki değişim 0,00243 eV değerine ulaştı. %-3 sıkıştırma

değerinde E_{tot} değişimi $\sim 0,01$ eV değerine kadar arttı. E_{tot} %3 germe değerinde $\sim 0,04$ eV artarken, %-3 sıkıştırma değerinde $\sim 0,01$ eV arttı. %6 germe değerinde $\sim 0,12$ eV artarken %-6 sıkıştırma değerinde $\sim 0,07$ eV arttı. Germe değerlerinde sıkıştırma değerlerine göre daha büyük değişim gözlemlendi.



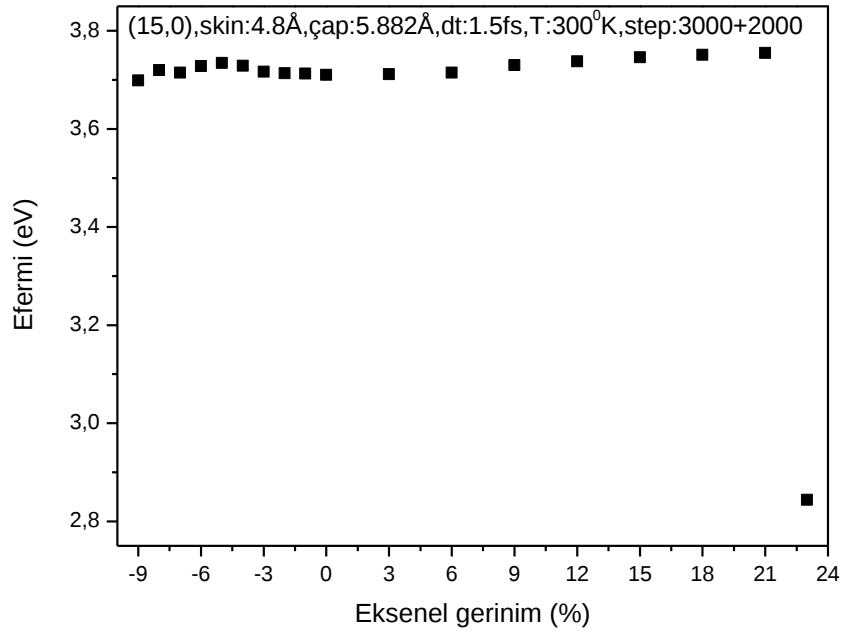
Şekil 2.13 (15,0) KNT için E_{tot} grafiği

E_{tot} değerleri artarak devam ederken %23 germe değerinde ani olarak $\sim 0,65$ eV azaldı. %-8 ve %-9 değerleri arasında grafiğin eğimi azaldı.

Fermi enerji seviyesi;

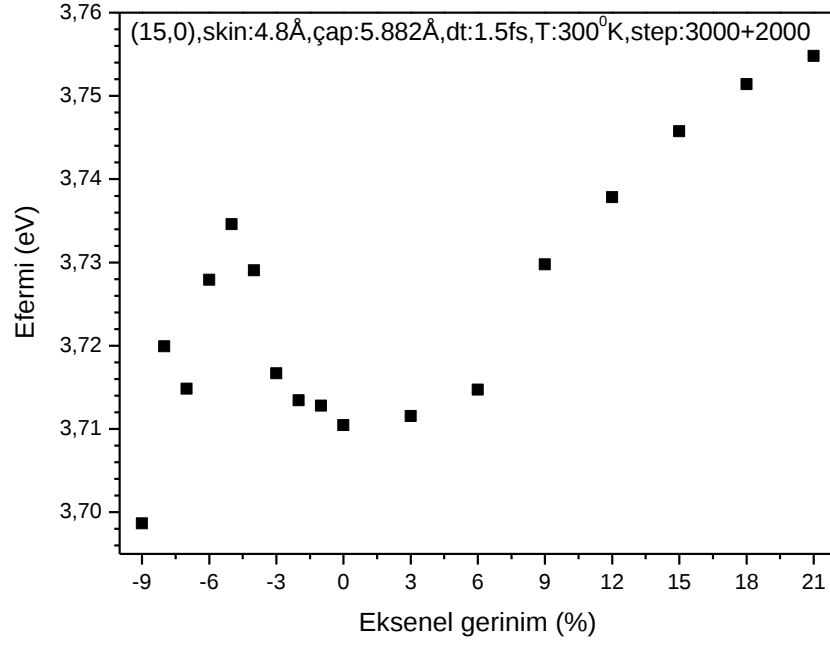
Tablo 2.8 (15,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu

ϵ (%)	E_{fermi} (eV)	ϵ (%)	E_{fermi} (eV)
23	2,84364	-9	3,69866
21	3,75480	-8	3,71994
18	3,75140	-7	3,71482
15	3,74576	-6	3,72791
12	3,73783	-5	3,73459
9	3,72975	-4	3,72905
6	3,71472	-3	3,71668
3	3,71156	-2	3,71344
0	3,71047	-1	3,71280



Şekil 2.14 (15,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği

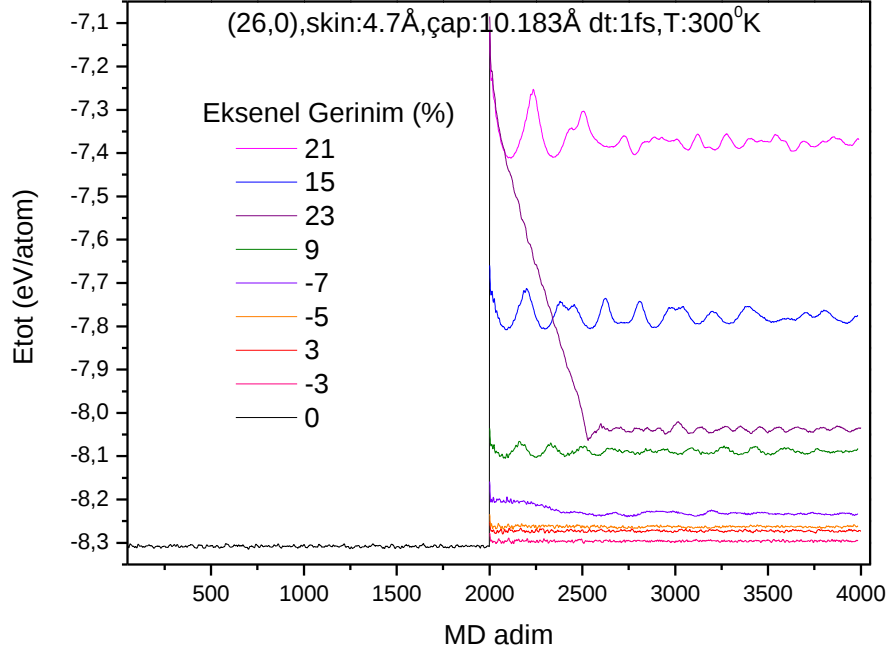
Fermi enerji değeri %21 germe değerinden sonra yaklaşık ~0,9 eV azaldı. %-9 ile %21 gerinim değerleri daha açık incelenirse;



Şekil 2.15 (15,0) KNT KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği

(15,0) KNT ü gerildiğinde fermi enerji seviyesi arttı ve sıkıştırıldığında da %-6 değerine kadar artıp %-7 sıkıştırma değerinden sonra azalmaya başladı ve %0 gerinim değerindeki fermi enerji seviyesinden daha düşük değere kadar azaldı.

(26,0) KNT:



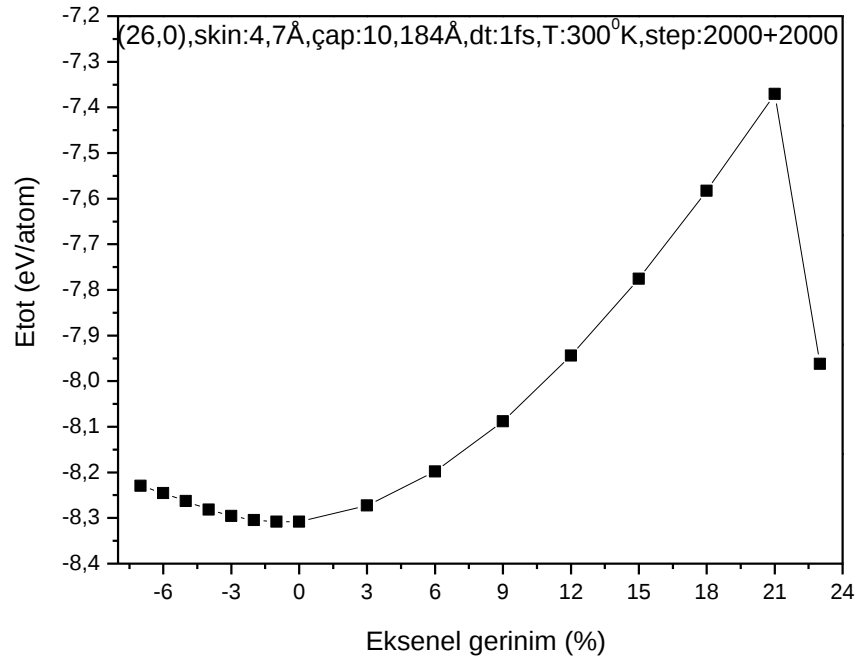
Şekil 2.16 (26,0) KNT KNT ünün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği

Tüp yarıçapları büyüdükçe KNT ün dengeye gelmesi zorlaştı. %21 ve %15 denge durumları incelendiğinde daha küçük yarıçaplı KNT ler olan (5,0) ve (15,0) 'a göre daha geniş dalga genliğinde dengeye geldiği gözlemlendi. Artarak devam eden E_{tot} değerleri %23 germe değerinde ani şekilde azaldı.

Tablo 2.9 (26,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu

ϵ (%)	E_{tot} (eV/atom)	ϵ (%)	E_{tot} (eV/atom)
23	-7,96237		
21	-7,37039		
18	-7,58300	-7	-8,22915
15	-7,77540	-6	-8,24558
12	-7,94406	-5	-8,26279
9	-8,08833	-4	-8,28189
6	-8,19825	-3	-8,29586
3	-8,27252	-2	-8,30467
0	-8,30806	-1	-8,30806

Yukarıdaki tabloda, %-1 sıkıştırma değeri ile %0 gerilmemiş durum aynı enerji değerinde dengeye geldi. %3 germe ve sıkıştırma değerleri arasındaki fark $\sim 0,02300$ eV oldu. Sıkıştırma değerlerinde %-6 ile %-7 arasında grafiğin eğimi azaldı.

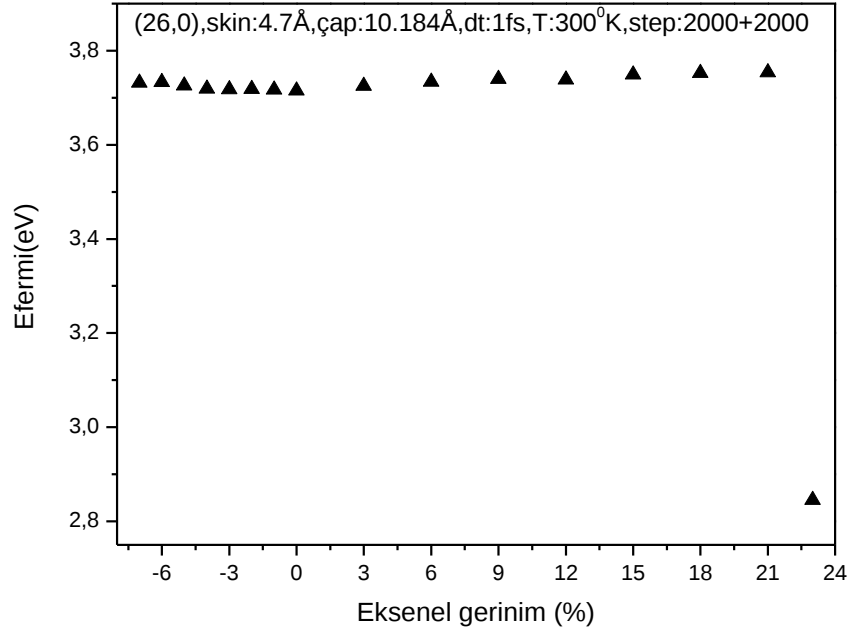
Şekil 2.17 (26,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği

%21 germe değerinden sonra 0,6 ev azalma gözlemlendi.

Fermi enerji seviyesi;

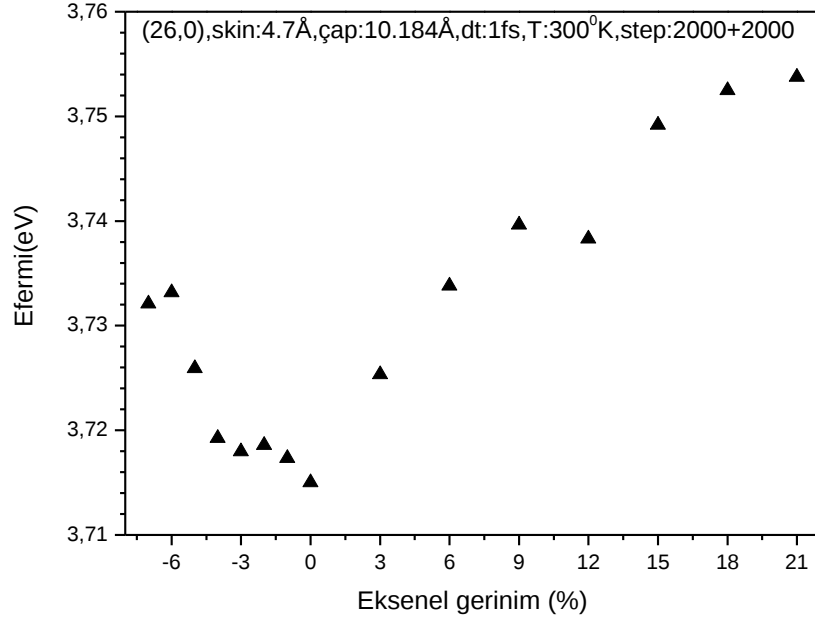
Tablo 2.10 (26,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu

ϵ (%)	E_{fermi} (eV)	ϵ (%)	E_{fermi} (eV)
23	2,84527		
21	3,75377		
18	3,75248	-7	3,73211
15	3,74918	-6	3,73318
12	3,73832	-5	3,72593
9	3,73964	-4	3,71925
6	3,73382	-3	3,71799
3	3,72535	-2	3,71858
0	3,71503	-1	3,71735



Şekil 2.18 (26,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} grafiği

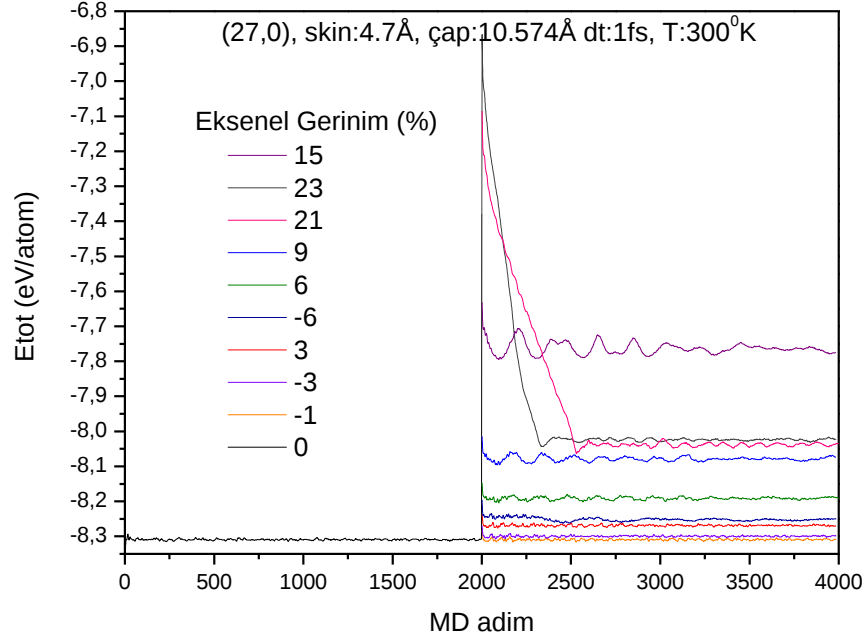
(26,0) KNT ünde %21 gerinimden sonra Fermi enerji seviyesi $\sim 0,9$ eV azaldı.



Şekil 2.19 (26,0) KNT ünün ayrıntılı ϵ - E_{fermi} grafiği

%21 Germe değerine kadar Fermi enerji seviyesi arttı. Ayrıca sıkıştırma değerlerinde %-6 değerine kadar da artıp -7 seviyesinde azalmaya başladı.

(27,0) KNT:

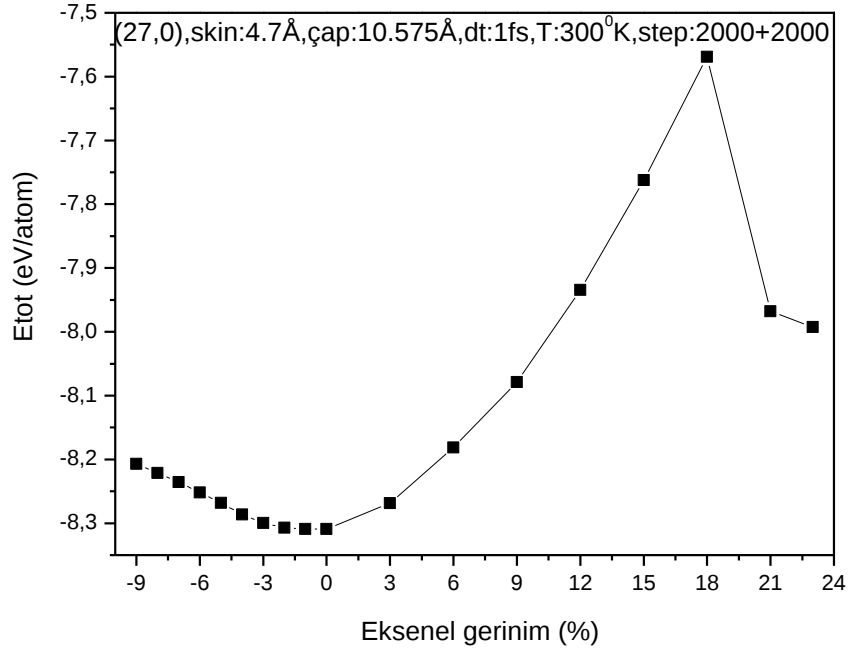


Şekil 2.20 (27,0) KNT ün farklı gerinimlerdeki MD adım- E_{tot} grafiği

KNT ün yarıçapı büyüdükçe dengeye gelmesinin zorlaşması (27,0) KNT ü için de %15 germe değerinde gözüktü. %21 germe değerinde E_{tot} hızlıca azaldı, %23 germe değeri de aynı şekilde azalırken %21 germe değerinden daha büyük enerji değerinde dengelendi.

Tablo 2.11 (27,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} tablosu

ϵ (%)	E_{tot} (eV/atom)	ϵ (%)	E_{tot} (eV/atom)
23	-7,99269	-9	-8,20721
21	-7,96789	-8	-8,22140
18	-7,56897	-7	-8,23550
15	-7,76225	-6	-8,25180
12	-7,93445	-5	-8,26814
9	-8,07864	-4	-8,28653
6	-8,18139	-3	-8,29950
3	-8,26871	-2	-8,30704
0	-8,30923	-1	-8,30929



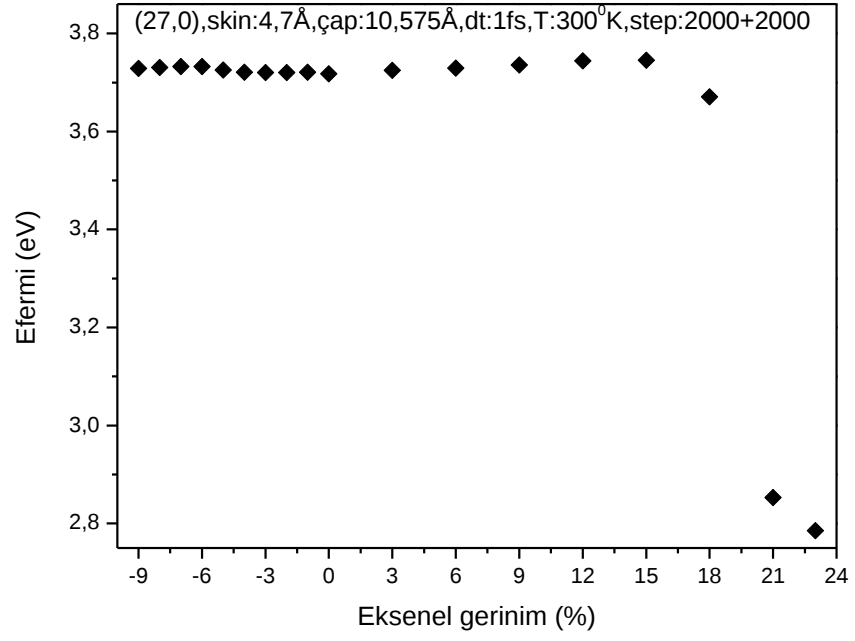
Şekil 2.21 (27,0) KNT ünün ϵ - E_{tot} grafiği

(27,0) KNT ünde %18 germeden sonra E_{tot} değerinde ~0,40 eV 'luk azalma gözlemlendi. %3 ve %-3 germe ve sıkıştırma değerleri arasında 0,3 eV 'luk fark oluştu.

Fermi enerji seviyesi;

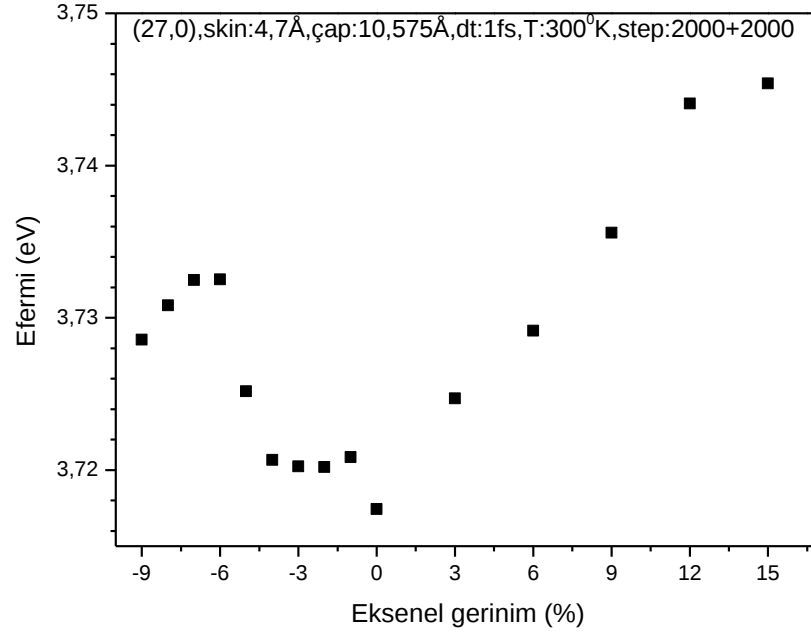
Tablo 2.12 (27,0) KNT ünün ϵ - E_{fermi} tablosu

ϵ (%)	E_{fermi} (eV)	ϵ (%)	E_{fermi} (eV)
23	2,78561	-9	3,72856
21	2,85321	-8	3,73081
18	3,67065	-7	3,73248
15	3,74539	-6	3,73252
12	3,74408	-5	3,72518
9	3,73559	-4	3,72066
6	3,72915	-3	3,72023
3	3,72470	-2	3,72020
0	3,71743	-1	3,72084



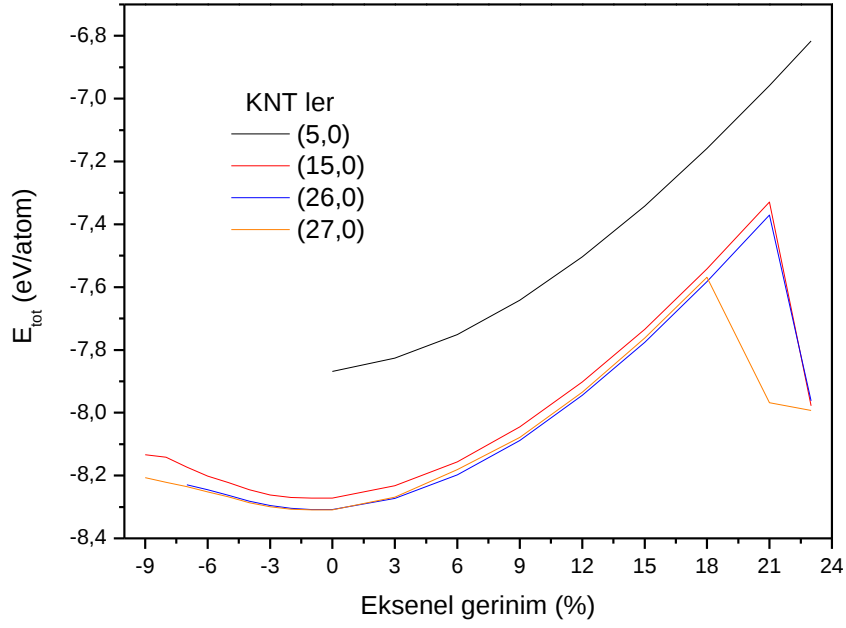
Şekil 2.22 (27,0) KNT için ϵ - E_{fermi} grafiği

Üstteki grafik incelendiğinde, %15 germe değerinden sonra 0,07 eV 'luk azalma ve sonrasında ~0,8 eV 'luk azalma oldu.



Şekil 2.23 (27,0) KNT ünün ayrıntılı $\mathcal{E}$ - E_{fermi} grafiği

Grafiğin %15 ile %-10 arasındaki değerlerinde fermi enerji seviyesi %0 ‘dan %15 ‘e kadar arttı. Ayrıca %0 ‘dan %-6 ‘ya kadar artıp %-6 ‘dan %-9 ‘a kadar azaldı.



Şekil 2.24 Farklı KNT lerin ϵ – E_{tot} grafiği

KNT lerin E_{tot} - ϵ değişimleri aynı grafikte çizilince tüplerin germe değerlerinin eğimleri ile sıkıştırma değerlerinin eğimleri birbirlerine çok yakın çıktılar. Fakat aynı tüp için germe değerlerinin eğimi sıkıştırma değerlerinin eğiminden daha büyük çıktı.

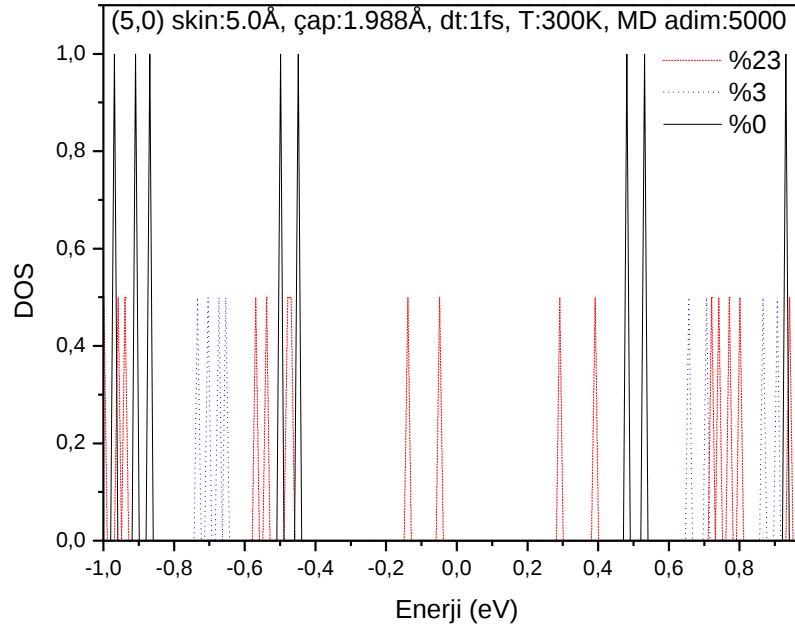
Simülasyon sonunda oluşan “ff0electdos.out” dosyası elektronların yerleşebilecekleri seviyelerin olasılığı (DOS, Density of states) ‘nı gösterir. Ayrıca bu dosya fermi enerji seviyesini, enerji sütununda sıfır değerine denk gelecek şekilde ayarlıdır. Fermi enerjisi ile elektronların yerleşebildikleri üst enerji seviyesi arasındaki fark yasak bant aralığının genişliğini gösterir. Yani sıfır enerji değeri etrafında elektronların yerleşemedikleri bölge yasak bant aralığıdır. Elektronların yerleşebilecekleri durumlar arasındaki enerji farkı ölçülerek veya hesaplanarak bant aralığı bilinebilir. Hassaslığı arttırmak için hesaplama yöntemi kullanarak farklı gerinimdeki KNT lerin yasak bant aralıkları bulundu.

(5,0) KNT:

Tablo 2.13 (5,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu

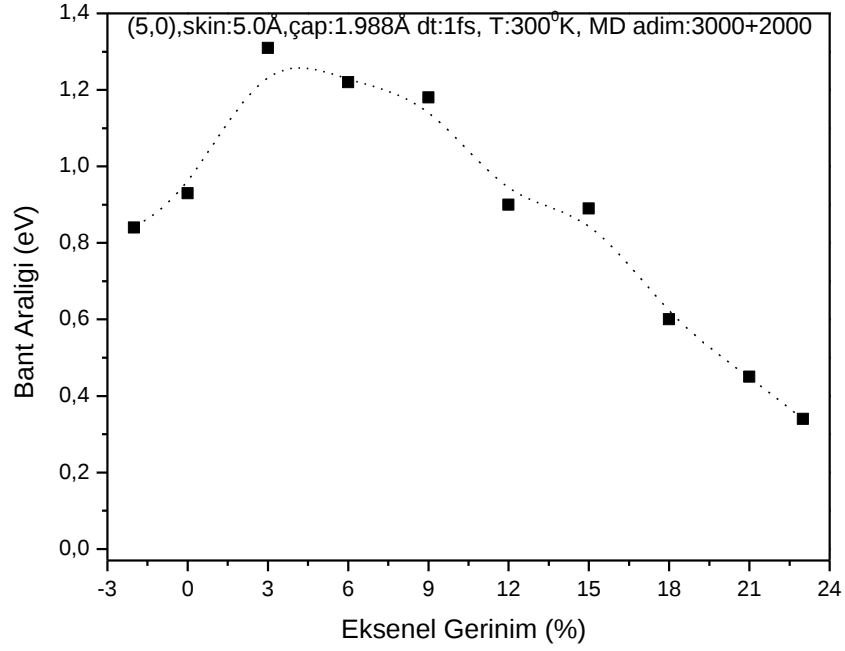
ϵ (%)	E_{fermi} (eV)	Bant aralığı (eV)
23	3,7337	0,34
21	3,7396	0,45
18	3,7454	0,60
15	3,7486	0,89
12	3,7501	0,90
9	3,7472	1,18
6	3,7385	1,22
3	3,7257	1,31
0	3,3356	0,93
-2	3,2936	0,84

(5,0) KNT üne gerinim uygulanmamış durumda bant aralığı genişliği 0,93 eV ile yarıiletken özelliği gösterdi. %3 germeye kadar bant aralığı genişleyip azalmaya başladı. Bant aralığı %23 germe değerinde 0,34 eV ‘luk genişliğe kadar azaldı.



Şekil 2.25 (5,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği

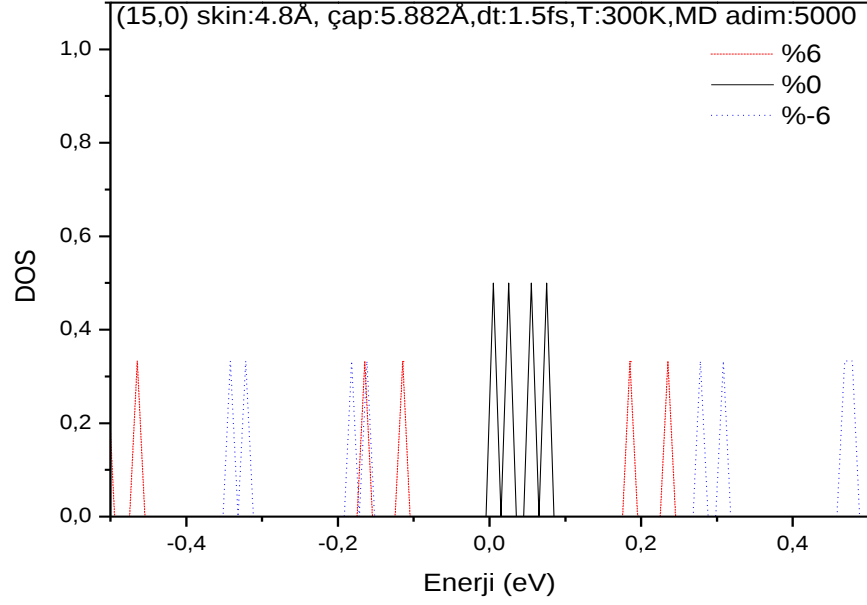
Üstteki grafikte sürekli siyah çizgili durumlar gerinim uygulanmamış KNT de elektronların yerleşebilecekleri seviyeleri gösterdi. Germe artınca bant aralığı kesikli mavi çizgilere kadar genişledi. Sonrasında en içteki kesikli kırmızı çizgelere kadar daralmaya devam etti.



Şekil 2.26 (5,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği

Bant aralığının daralması %6 ile %9 arasında ve %12 ile %15 arasında yavaşladı. Kesikli çizgi bant aralığının ortalama değerini gösterir.

(15,0) KNT:



Şekil 2.27 (15,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği

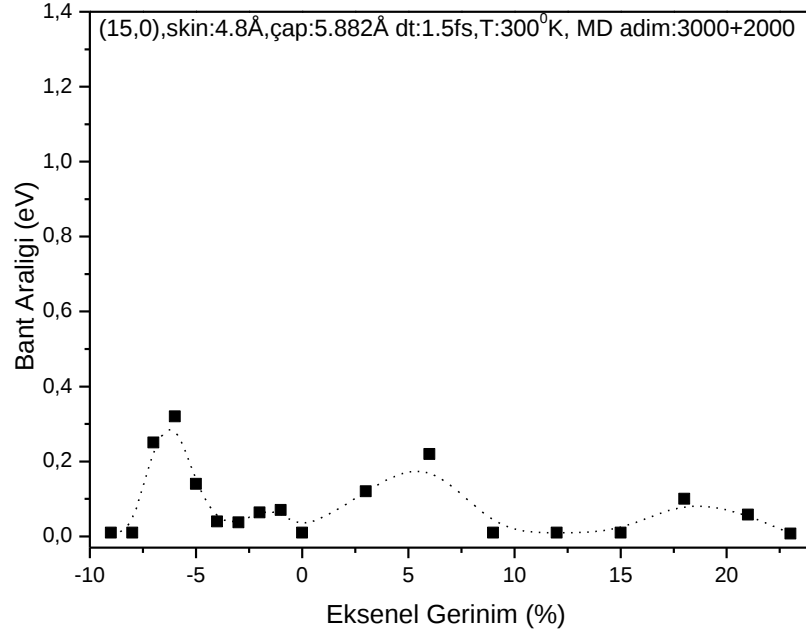
(15,0) KNT ü gerilmemiş durumunda 0,01 eV luk bant aralığı genişliğiyle metalik özellik gösterdi. KNT e %6 germe ve %-6 sıkıştırma uygulandığında da bant aralığı genişledi.

Tablo 2.14 (15,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu

ϵ (%)	E_{fermi} (eV)	Bant aralığı (eV)
23	2,8436	0,007
21	3,7548	0,058
18	3,7514	0,100
15	3,7457	0,010
12	3,7378	0,010
9	3,7297	0,010
6	3,7147	0,220
3	3,7115	0,120
0	3,7104	0,010
-1	3,7128	0,070
-2	3,7134	0,064
-3	3,7166	0,037
-4	3,7290	0,040
-5	3,7345	0,140
-6	3,7279	0,320
-7	3,7148	0,250
-8	3,7199	0,010
-9	3,6986	0,010

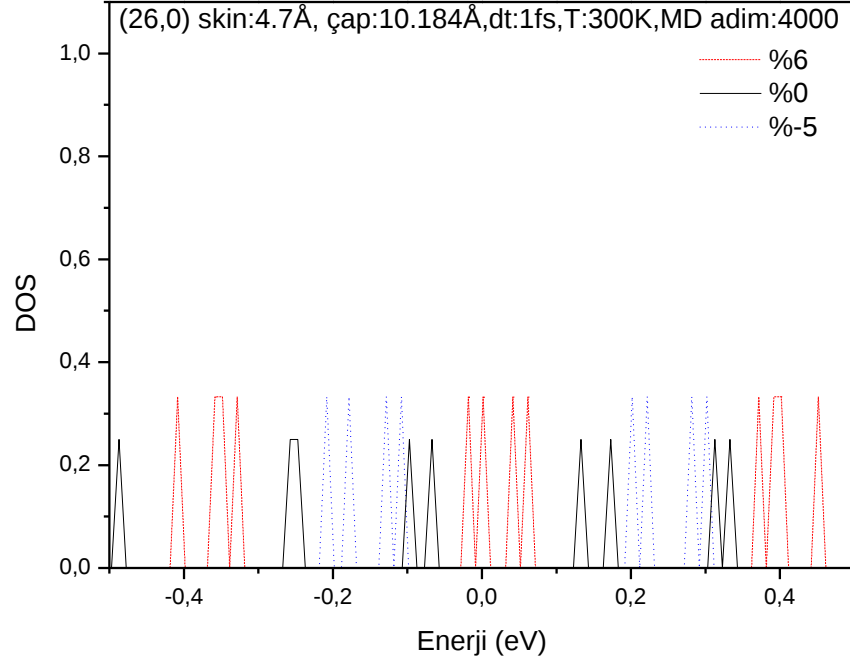
Gerinim uygulanmamış durumdaki (15,0) KNT üne gerinim uygulanınca, %6 germe değerinde bant aralığı 0,22 eV ‘a kadar genişleyip %15 germe değerine kadar daraldı, %18 germe değerinde genişleyip %23 germe değerine kadar yeniden daraldı. KNT Sıkıştırıldığında %-1 sıkıştırma değerine kadar 0,06 eV genişleyip, %-5 sıkıştırma değerine kadar daraldı. %-6 sıkıştırma değerinde genişleyip tekrar daraldı.

Aşağıdaki grafikten de görüldüğü gibi bant aralığının genişleyip daralması sırayla devam etti.



Şekil 2.28 (15,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği

(26,0) KNT:



Şekil 2.29 (26,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği

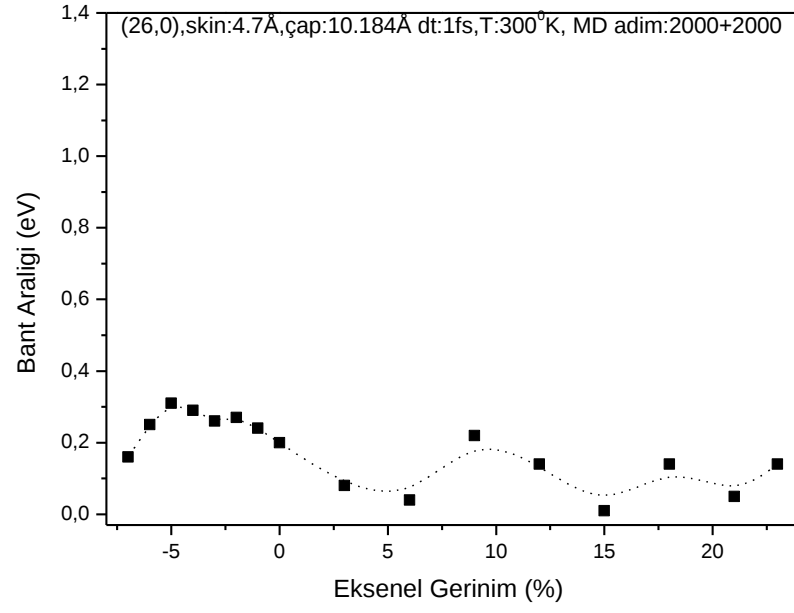
(26,0) KNT ü gerilmemiş durumda (sürekli siyah çizgi) 0,2 eV bant aralığı değeriyle yarıiletken özellik gösterdi. KNT e germe uygulandığında bant aralığı daraldı. %0 germe durumundaki KNT sıkıştırıldığında bant aralığı genişledi.

Tablo 2.15 (26,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} –Bant aralığı tablosu

ϵ (%)	E_{Fermi} (eV)	Bant aralığı (eV)
23	2,8453	0,14
21	3,7538	0,05
18	3,7525	0,14
15	3,7492	0,01
12	3,7383	0,14
9	3,7396	0,22
6	3,7338	0,04
3	3,7254	0,08
0	3,7150	0,20
-1	3,7174	0,24
-2	3,7186	0,27
-3	3,7180	0,26
-4	3,7193	0,29
-5	3,7259	0,31
-6	3,7332	0,25
-7	3,7321	0,16

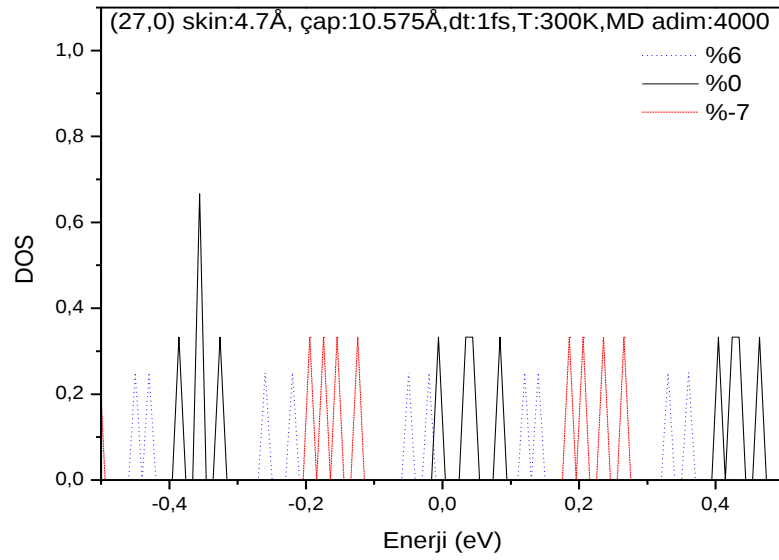
Gerinim uygulanmamış (26,0) KNT ünün bant aralığı %3 germede hemen daraldı ve sonradan %9 germe değerine kadar yeniden genişledi. %18 germe değerine kadar daralıp tekrar genişledi. Sıkıştırma uygulandığında %-5 sıkıştırma değerine kadar genişledi sonra azalmaya başladı.

Aşağıdaki grafikten de görüleceği gibi %0 germesiz durumunda yarıiletken özellik göstererek sonrasında metal özelliği gösterdi.



Şekil 2.30 (26,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği

(27,0) KNT:



Şekil 2.31 (27,0) KNT ü için bazı gerinim değerlerinin DOS grafiği

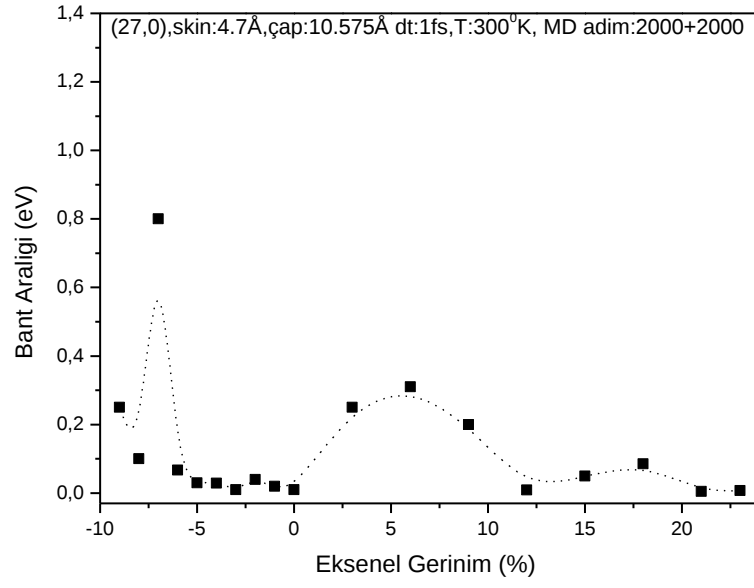
(27,0) KNT ü %0 germesiz durumda 0,01 eV bant aralığı ile metal özeliği gösterdi. Gerinim uygulandığında bant aralığı %6 germe değerine kadar ~0,3 eV genişledi, KNT %-7 sıkıştırıldığında bant aralığı 0,79 eV genişledi.

Tablo 2.16 (27,0) KNT ü için ϵ - E_{fermi} - Bant aralığı tablosu

ϵ (%)	E_{Fermi} (eV)	Bant aralığı (eV)
23	2,7856	0,007
21	2,8532	0,005
18	3,6707	0,085
15	3,7454	0,050
12	3,7441	0,009
9	3,7356	0,200
6	3,7292	0,310
3	3,7247	0,250
0	3,7174	0,010
-1	3,7208	0,020
-2	3,7202	0,040
-3	3,7202	0,010
-4	3,7207	0,029
-5	3,7252	0,030
-6	3,7325	0,067
-7	3,7325	0,800
-8	3,7308	0,100
-9	3,7286	0,250

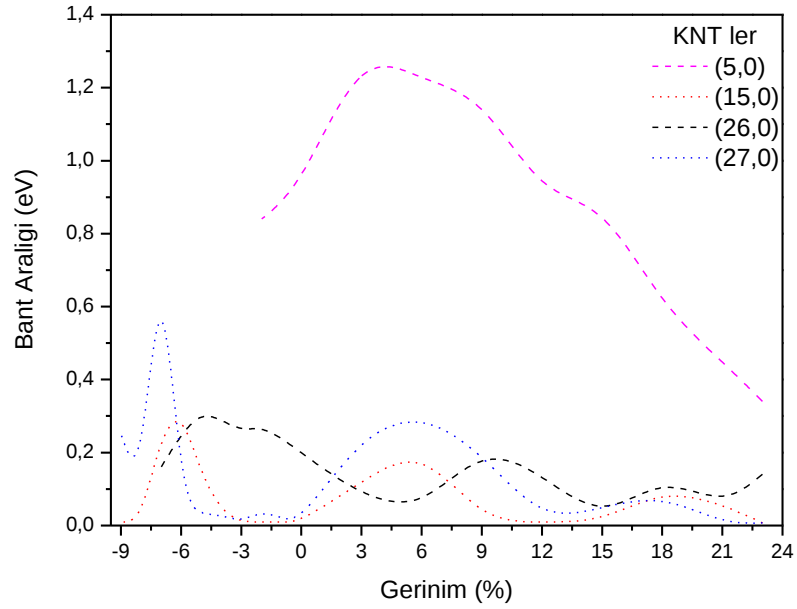
(27,0) KNT üne germe uygulandığında %6 'ya kadar bant aralığı genişledi sonrasında %23 germe değerine kadar azaldı. Sıkıştırma uygulandığında %-3 de bant aralığı azalma göstererek %-7 sıkıştırma değerine kadar genişledi. Sonrasında tekrar daraldı.

Aşağıdaki grafikte gerinimsiz durumda metalik özellik göstererek sonrasında yarıiletken özellik gösterdiği ve tekrar metalik özellik gösterdiği gözüküyor.



Şekil 2.32 (27,0) KNT ü için ϵ - Bant aralığı grafiği

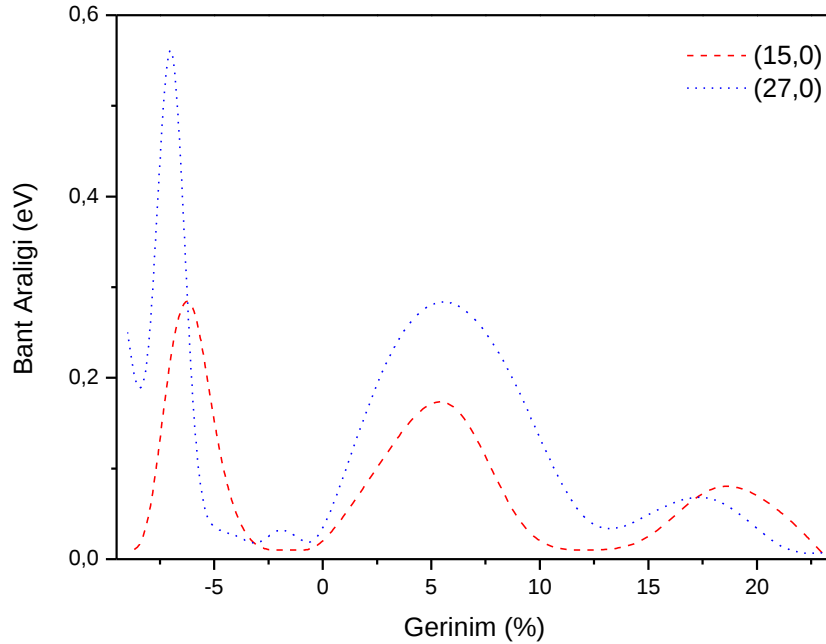
KNT lerin gerinim değerlerine karşılık bant aralığı değişimi tek grafikte toplanabilir.



Şekil 2.33 Farklı KNT ler için ϵ - Bant aralığı grafiği

KNT ler gerinimsiz durumda (15,0) ve (27,0) metalik özelliği gösterdi, (5,0) ve (26,0) ise yarıiletken özelliği gösterdi. KNT lere germe uygulandığında, (15,0) ve (27,0) KNT lerinin bant aralıkları %6 germeye kadar genişledi, (26,0) 'ın bant aralığı %6 'ya kadar daraldı ve (5,0) KNT ünün bant aralığı %3'e kadar genişleyip sonrasında daraldı. (15,0) KNT ü %9, %12 ve %23 germe değerlerinde tekrardan metalik özellik gösterdi. (27,0) KNT ü %12, %21 ve %23 germelerde metalik özellik gösterdi. (26,0) KNT ü %6, %15 değerlerinde metalik özellik gösterdi. (5,0) KNT ünün metalik özellik göstermesi için %23 germe yetersiz geldi. KNT lere sıkıştırma uygulandığında, (15,0) ve (27,0) KNT leri %-3 sıkıştırmaya kadar metalik özellik gösterdiler. (15,0) KNT ü %-3 ile %-6 sıkıştırma değerleri arasında bant aralığı genişledi, %-6 ile %-9 sıkıştırma değerlerinde bant aralığı daraldı. (27,0) KNT ü %-3 ile %-7 sıkıştırma değerlerinde bant aralığı genişledi, %-7 ile %-9 arasında daraldı. (26,0) KNT ü %-5 sıkıştırma değerine kadar bant aralığı genişledi sonra daralmaya başladı. (5,0) KNT ü sıkıştırma değerlerinde incelenemedi.

(15,0) ve (27,0) KNT lerinin Gerinim-Bant aralığı değişimleri aynı grafikte çizilirse:



Şekil 2.34 (15,0) ve (27,0) KNT leri için ϵ - Bant aralığı grafiği

Bant aralıklarının artma ve azalmasının birbirlerine paralellik gösterdiği dikkat çekti. Aynı gerinim değerlerinde aynı elektronik özellikleri gösterdiler. Ayrıca metal özelliğinden başlayarak sonrasında yarıiletken özelliği gösterip tekrar metal özelliği gösterdiler.

3. YORUM

i. KNT ün çapı (R_{KNT}) ile atom başına ortalama toplam enerji (E_{tot}) değerinin değişimi:

KNT ün yarıçapı büyüdükçe, atom başına dengelenme enerjisi azaldı fakat enerjinin mutlak değeri arttı (tablo 2.3). Yani KNT genişledikçe atomlar daha zor dengeye gelirler.

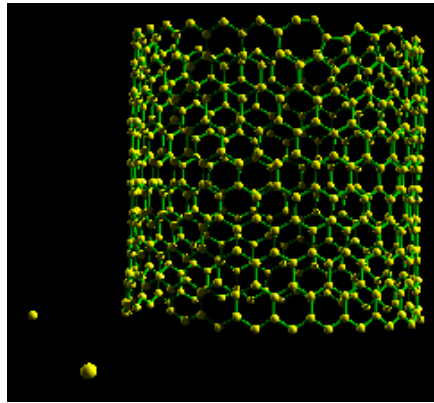
ii. $\epsilon - E_{tot}$ grafiği:

KNT e germe veya sıkıştırma uygulandığında E_{tot} değeri arttı. Epsilonun mutlak değeri, E_{tot} ile kuadratik olarak değişir (şekil 2.24) $|\epsilon|^2 \propto E_{tot}$.

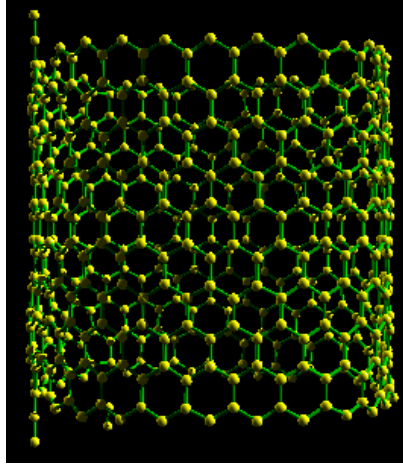
Ito vd., (2002), zigzag yapılı tek duvarlı karbon nanotüplerde toplam enerji, germinin karesiyle orantılı artarak elastik davranış gösterir.

iii. Germe ve sıkıştırma değerleri karşılaştırıldığında E_{tot} , germe değerlerinde sıkıştırma değerlerine göre daha hızlı arttı. Yani $\epsilon - E_{tot}$ grafiğinin germe ve sıkıştırma değerlerindeki kuadratik değişim aynı değildir. Yani bu farklı değişim iki yarım parabolün aynı noktadan birleşmesi gibi düşünülebilir.

iv. $\epsilon - E_{tot}$ grafiğindeki kuadratik değişim, (15,0) KNT ünde %23 germe değerinde, (26,0) KNT ünde %23 germe değerinde ve (27,0) KNT ünde %21 ve %23 germe değerlerinde ani lineer azalma gösterdi (şekil 2.24). Farklılık gösteren germe değerleri şekil 2.12, şekil 2.16 ve şekil 2.20 'lerdeki enerji dengelenme grafiklerinde incelendiğinde ani azalmanın nedeni KNT den atom kopmasıdır. Bu gerinim değerlerinin bazıları simüle edilirse aşağıdaki şekillerde görsellik kazanır.



Şekil 3.1 (26,0) KNT ünde %23 germe değerinde atom kopması resmi



Şekil 3.2 (27,0) KNT ünde %23 germe değerinde atom kopması resmi

Yani KNT de dengelenme enerjisindeki ani düşüşler atom kopmasını gösterir.

v. $\epsilon - E_{\text{fermi}}$ grafiği:

KNT e germe ve sıkıştırma uygulandığı zaman fermi enerjisi artar ve belirli değerlerden sonra azalır.

KNT lerdeki atom kopmaları fermi enerjilerinin ani azalmasına da neden olur (tablo 2.8, tablo 2.10 ve tablo 2.12).

vi. ϵ - Bant Aralığı grafiği:

Gerinim uygulanmadan önce KNT ün tipine göre farklı elektronik özellik gösterdi.

$\epsilon=0$, $n-m=15 \equiv 0 \pmod{3}$, $n-m=27 \equiv 0 \pmod{3}$ yani üçün tam katlarında metal özelliği gösterdi (tablo 2.14 ve tablo 2.16).

$\epsilon=0$, $n-m=5 \equiv 2 \pmod{3}$, $n-m=26 \equiv 2 \pmod{3}$ üçün 2 kalanlı modlarında yarıiletken özelliği gösterdi (tablo 2.13 ve tablo 2.15).

Umeno vd. (2004), yaptıkları hesaplamalarda üçün tam katı olan (8,8) armchair KNT ü için gerinim uygulanmadan önce bant aralığını sıfır ve üçün 2 kalan modunda bulunan (14,0) Zigzag KNT ü için sıfırdan olmadığını buldular. Sonuçlarımızla uyum içinde.

Ayrıca Sreekela vd. (2008), yaptıkları çalışmada gerinim uygulanmadan önceki bant aralığı

için (9,0) KNT ü için sıfır bant aralığı, (11,0) KNT ü için 0,922 eV ve %6 germede bant aralığının kapanarak metal özelliği gösterdiğini gözlemişlerdir. Aynı sonuçlarla uyum içinde.

vii. Şekil 2.28, şekil 2.30 ve şekil 2.32 lerden görülebileceği gibi (15,0), (26,0) ve (27,0) KNT lerine germe ve sıkıştırma uygulandığında bant aralığı metal →yarıiletken →metal özelliği gösterecek kadar azalıp sonra artmaktadır.

(15,0) KNT ü metal → yarıiletken → metal

(26,0) KNT ü yarıiletken → metal → yarıiletken

(27,0) KNT ü metal → yarıiletken → metal özelliği değişimleri gözlenir.

Bu geçişler Umeno vd. (2004) sonuçları ile uyum içerisindedir.

Şekil 2.34 de görüldüğü gibi (15,0) ve (27,0) KNT lerine germe ve sıkıştırma uygulandığında bant aralıklarının değişimi paralellik gösteriyor.

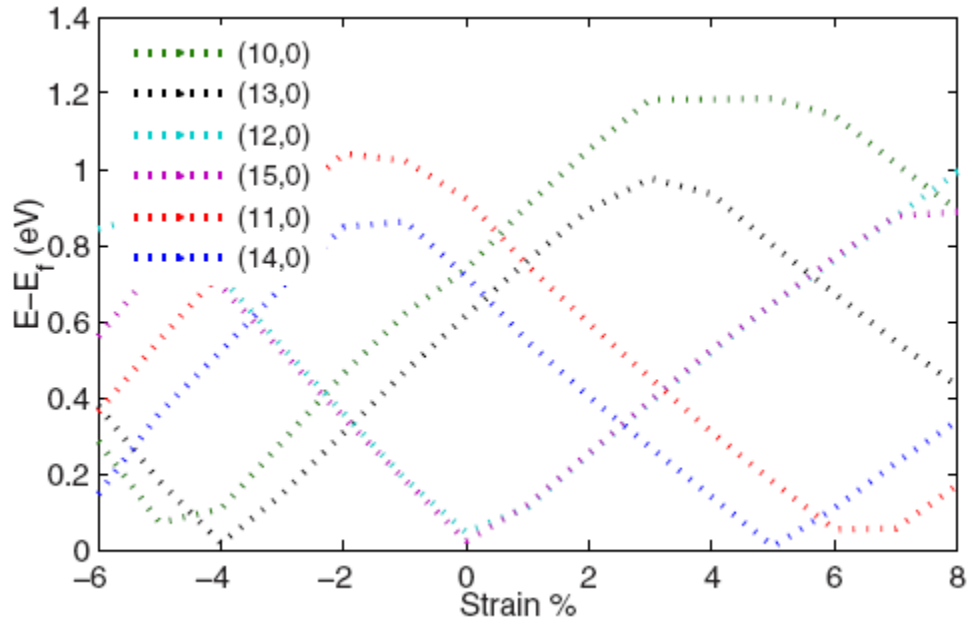
Umeno vd. (2004) ve Sreekela vd. (2008) çalışmaları ile uyum içindedir.

2 kalan modlarında bulunan (5,0) ve (26,0) KNT lerinin bant aralığı değişimlerinin paralellik göstermesini bekledik fakat gözleyemedik. Bunun nedeni, (15,0) ve (27,0) KNT lerinin yarıçaplarının, (5,0) ve (26,0) KNT lerinin yarıçaplarına göre daha yakın olmasıdır.

Enerji bant aralığı KNT ün çapına bağlı olarak değişir Umeno vd. (2004). (5,0) KNT ünün çapının 1,988Å ve (26,0) KNT ünün çapı 10,184Å ‘dur.

viii. Şekil 2.33 incelendiğinde yarıiletken özellik gösteren (26,0) ile metal özellik gösteren (15,0) ve (27,0) KNT leri bant aralığı değerlerinin artma ve azalma değerlerinde ters olarak değiştiği görülmektedir.

Aynı kalan modunda bulunan KNT lerin gerinim uygulanmadan önceki elektronik yapıları, aynı modda bulunan KNT lerin bant aralıklarının paralellik göstermesi, farklı modlarda bulunan KNT lerin bant yapılarının birbirlerine göre değişiminde elde ettiğimiz sonuçlar Sreekela vd. (2008) çalışmalarıyla uyum sağlamaktadır.



Şekil 3.3 Gerinim ile bant aralığı değişimi, Sreekela vd. (2008)

KAYNAKLAR

- Bernholc, J., Brenner, D., M. Buongiorno Nardelli. V. Meunier. ve C. Roland. "Mechanical And Electrical Properties Of Nanotubes". Annual Reviews. 32:347–75, (2002)
- D. R. Bowler, R. Choudhury, M. J. Gillan ve T. Miyazaki, "Recent progress with large-scale *ab initio* calculations: the CONQUEST code" 10.1002/pssb.200541386, (2005)
- Dereli, G. ve C. Özdoğan. "The Structural Stability and Energetics of Single-Walled Carbon Nanotubes under Uniaxial Strain". Physical Review B67, 0354416, (2003 a)
- Dereli, G. ve C. Özdoğan "O(N) algorithms in TBMD simulations of the electronic structure of carbon nanotubes". Physical Review B 67, 0354415, (2003 b)
- Dereli, G. "Yeni Teknoloji ve Nanobilimde Karbon Nanotüp" ders notlarıYTÜ (yayınlanmamış), (2003)
- Dereli, G. ve B.Süngü "Temperature Dependence of the Tensile Properties of Single Walled Carbon Nanotubes: O(N) Tight-Binding Molecular-Dynamics Simulations". Physical Review B 75. 184104 (2007a).
- Dereli, G., B.Süngü. C. Özdoğan. "Thermal Stability of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes: an O(N) Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation Study". Nanotechnology 18, 245704 (2007b).
- Ito, T., Kazume Nishidate, Mamoru Baba ve Masayuki Hasegawa. "First principles calculations for electronic band structure of single-walled carbon nanotube under uniaxial strain" Surface Science 514 222-226 (2002)
- Katsnelson, I.M. "Graphene: carbon in two dimensions" doi:10.1016/S1369-7021(06)71788-6 cilt 10, (2007)
- Lee, S. "Encyclopedia of Chemical Processing" Cilt 1. (2006)
- Ordejon, P., E. Artacho, R. Cachau, J.D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, J. Kohanoff, M. Machado, D. Sanchez-Portal, J.M. Soler and R. Weht, "Linear scaling DFT calculations with numerical atomic orbitals", *Mat Res Soc Symp Proc.* 677, (2001)
- Özdoğan, C., G. Dereli ve T. Çağın. "O(N) parallel tight binding molecular dynamics simulation of carbon nanotubes". Computer Physics Communications. 148, 188-205, (2002)
- Salvetat, J.P., G. Andrew, D. Briggs, Jean-Marc Bonard, Revathi R. Bacsá, Andrzej J. Kulik, Thomas Stöckli, Nancy A. Burnham ve László Forró, "Elastic and Shear Moduli of Single-Walled Carbon Nanotube Ropes" *Phys. Rev. Lett.* 82, 944 - 947 (1999)
- Saito, R., G. Dresselhaus ve M. S. Dresselhaus. "Physical Properties of carbon nanotubes". Imperial College Press. ISBN 1-86094-093-5, (1998)
- Sreekela, S., X.-H. Peng, P.M. Ajayan ve S. K. Nayak. "Effect of strain on the band gap and effective mass of zigzag single-wall carbon nanotubes: First-principles density-functional calculations" *Physical Review B* 77. 155434 (2008)
- Süngü, B., "Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Yöntemiyle Karbon Nanotüplerin Bilgisayar simülasyonu". Doktora Tezi. YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü (yayınlanmamış), (2006)
- Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura ve Akihiro Kushima. "Metallic-semiconducting transition of single-walled carbon nanotubes under high axial strain" *Computational Materials Science* 31 33-41 (2004)
- Vardar, N., "Farklı Simetrik Yapılardaki Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunluklarının simülasyonu". Yüksek Lisans Tezi. YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü (yayınlanmamış). (2006)

İNTERNET KAYNAKLARI

<http://www.benbest.com/cryonics/graphite.gif> ,2008

http://www.ks.uiuc.edu/Research/nanotube/lattice_combine.jpg ,2008

http://www.ks.uiuc.edu/Research/nanotube/lattice_combine.jpg ,2008

<http://www2.phys.chemie.uni-muenchen.de/hartschuh/typo3temp/pics/8dac4d2b16.jpg> ,2008

http://www.ks.uiuc.edu/Research/nanotube/lattice_combine.jpg ,2008

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi 09.09.1982

Doğum yeri İstanbul

Lise 1995-1998

Hacı Sabancı Beylerbeyi Lisesi

Lisans 1999-2001

Samsun Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

Lisans 2001-2005

İstanbul Üniversitesi

Fen Fakültesi Fizik Bölümü

Çalıştığı Kurumlar

2002-

Türkiye Satranç Federasyonu -Satranç Hakemi

2002-2003

Özel Tarhan Koleji -Satranç Öğretmeni

2003-2004

Özel Açı Koleji –Satranç Öğretmeni

2003-2005

Enka Spor Yaz Okulları –Satranç Öğretmeni

2004-

Özel Efdal Eğitim Kurumları –Satranç Öğretmeni

2004-

Berna Abla Çocuk Yuvası –Satranç Öğretmeni