

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

**KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISININ BİLGİSAYAR
SİMÜLASYONLARI**

ÖNDER EYECİOĞLU

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN
PROF. DR. GÜLAY DERELİ**

İSTANBUL, 2012

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISININ BİLGİSAYAR
SİMÜLASYONLARI

Önder EYECİOĞLU tarafından hazırlanan tez çalışması tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Prof. Dr. Gülay DERELİ
Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Gülay DERELİ
Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Fatma Z. TEPEHAN
İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Kubilay KUTLU
Yıldız Teknik Üniversitesi

Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü' nün **29-01-01-KAP01** numaralı kapsamlı araştırma projesi (KAP) ile desteklenmiştir.

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik anabilim dalında mekanik deformasyonların Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin (TDKNT) elektronik yapısına etkisini incelemek amacıyla doktora tezi olarak hazırlanmıştır. Tez çalışmam, 2003 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümünde Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarını kuran ve çalışmalarımızda kullandığımız simülasyon programını hazırlayan danışman hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ rehberliğinde hazırlanmıştır.

Doktora çalışmamda, bilgileriyle ve sağladığı imkânlarla bana rehber ve yardımcı olan Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarının kurucusu tez danışman hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ 'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Bana çalışma imkânı ve çalışma ortamı sağlayan Yıldız Teknik Üniversitesi Rektörlüğüne, Fen Edebiyat Fakültesi Dekanlığına ve Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Kubilay KUTLU hocamıza ayrıca teşekkür ederim.

Çalışmalarımda, bana yardımcı olan çalışma arkadaşlarım, Arş. Gr. Dr. Banu Süngü Mısırlıoğlu'na ve Necati Vardar'a teşekkür ederim. Ayrıca tezimin yazılması ve teslimi aşamasında bana yardım enden Arş. Gr. Mehmet KILIÇ, Arş. Gr. Altan BOZDOĞAN, Arş. Gr. Nimet Yılmaz CANLI ve Ümit ALKAN'a Teşekkür ederim.

Bu tezi, dedem Enver EYECİOĞLU, ninem Saniye EYECİOĞLU, babam Enver EYECİOĞLU, annem Havva EYECİOĞLU, kardeşlerim Yücel, Emine ve Adnan'a, her zaman yanımda olan eşim Emine EYECİOĞLU, çocukarım Zehra Nur ve Efe'ye atf ediyorum.

Temmuz, 2012

Önder EYECİOĞLU

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGE LİSTESİ.....	vii
KISALTMA LİSTESİ.....	ix
ŞEKİL LİSTESİ.....	x
ÇİZELGE LİSTESİ	xvi
ÖZET	xvii
ABSTRACT	xix
BÖLÜM 1.....	1
GİRİŞ	1
1.1 Literatür Özeti	1
1.2 Tezin Amacı.....	7
1.3 Hipotez	8
BÖLÜM 2.....	9
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER	9
2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması.....	9
2.2 Kiralite Vektörü	10
2.3 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı.....	11
BÖLÜM 3.....	19
YÖNTEM VE TEORİK BİLGİLER	19
3.1 Simülasyon Yöntemi.....	19
3.1.1 Moleküler Dinamik (MD).....	20
3.1.2 Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Formalizmi.....	23
3.1.3 N Mertebe Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi ($O(N)$ SBMD).....	28

3.1.4	Parallelleştirme Yöntemi ve Algoritmaları	29
3.2	TDKNT'lerin Özelliklerinin Hesaplanması	30
3.2.1	TDKNT'lerin Fiziksel Özelliklerin Hesaplanması	30
3.2.2	TDKNT'lerin Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması.....	31
3.3	Mekanik Deformasyonların Tanımlanması.....	32
3.3.1	Gerinim Deformasyonları	32
3.3.2	Boşluk Deformasyonları	34
3.3.3	Burulma Deformasyonları	35
BÖLÜM 4.....		36
SİMÜLASYON SONUÇLARI.....		36
4.1	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda TDKNT'lerin Elektronik ve Fiziksel Yapısı	38
4.1.1	(10,0) TDKNT	38
4.1.2	(15,0) TDKNT	44
4.1.3	Yorum	48
4.2	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerinim Etkisi	49
4.2.1	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerinimin TDKNT'lerin Elektronik Yapısına Etkisi	50
4.2.1.1	$n \equiv 0 \bmod 3$ Sınıfı TDKNT	50
4.2.1.2	$n \equiv 1 \bmod 3$ Sınıfı TDKNT'ler	55
4.2.1.3	$n \equiv 2 \bmod 3$ Sınıfı TDKNT'ler	62
4.2.2	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerinimin TDKNT'lerin Fiziksel Yapısına Etkisi	68
4.2.3	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda TDKNT'lerin Mekanik Yapısı.....	72
4.2.4	Yorum	75
4.3	Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Boşluk Kusurlarına Bağlı Olarak TDKNT'lerin Elektronik Yapısı.....	77
4.3.1	Yöntem Seçimi	77
4.3.1.1	Boşluk	77
4.3.1.2	Denge+Boşluk	82
4.3.1.3	Denge + Boşluk + Boşluk:	86
4.3.2	Zigzag TDKNT'lerin Enerji ve Elektronik Yapılarına, Nanotüp Eksenine Dik Oluşan Boşlukların Etkisi	90
4.3.2.1	(12,0) TDKNT.....	90
4.3.2.2	(13,0) TDKNT.....	96
4.3.2.3	(14,0) TDKNT.....	102
4.3.3	Yorum	108
4.4	Düşük /Yüksek Sıcaklıklarda Burulma Kusurlarına Bağlı Olarak TDKNT'lerin Elektronik Yapısı.....	111
4.4.1	(12,0) TDKNT	111
4.4.2	(13,0) TDKNT	117
4.4.3	Yorum	122
BÖLÜM 5.....		124
SONUÇ VE ÖNERİLER		124

KAYNAKLAR.....	130
ÖZGEÇMİŞ.....	134

SİMGE LİSTESİ

E_g	Enerji bant aralığı
$\vec{C}_h$	TDKNT Kiralite Vektörü
$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	2 Boyutlu atıgen örgü birim vektörleri
θ	Kiralite açısı
$\vec{b}_1, \vec{b}_2$	Altıgen örgü ters örgü vektörleri
$\mathcal{H}$	Transfer Matrisi
S	Örtüşme matrisi
$E_{g2D}^{\pm}(\vec{k})$	Grafenin enerji dispersiyon denklemi
$\vec{T}$	TDKNT öteleme vektörü
N	KNT Birim hücredeki hegzagon sayısı
$E_{\mu}^{\pm}(\vec{k})$	TDKNT enerji dispersiyon denklemi
$\vec{K}_1, \vec{K}_2$	TDKNT ters örgü vektörleri
r_c	Kesme mesafesi
β	Ölçeklendirme faktörü
k_B	Botlzman sabiti
$\vec{F}_{\alpha}$	Atomlar arası kuvvet
H_{top}	Valans elektronları ve iyonlardan oluşan sistemin toplam hamiltonyeni
T	Linetik Enerji
U	Potansiyel enerji
h	Tek parçacık hamiltonyeni
$ \Psi_n\rangle$	Sistemin n. durum öz fonksiyonu
ε_n	n. durum enerji öz değeri
$C_{l\alpha}^n$	α iyonunun n.durumdakil l yörüngesindeki doluluk katsayısı
$S_{ll'\alpha\beta}$	Örtüşme matrisi
$\phi_{l\alpha}$	Löwdin orbitalleri
$f_{ll'}(\vec{R}_{\alpha\beta})$	Ölçeklendirme fonksiyonu
E_{top}	Toplam enerji
E_{bs}	Bant yapısı enerjisi
U_{rep}	İtici potansiyel enerji
f_{FD}	Fermi Dirac dağılım fonksiyonu

$\phi(r_{ij})$	i-j atomları arasındaki çiftli potansiyel
μ	Elektron kimyasal potansiyeli
ρ_α	Alt sistemin elektron yoğunluğu

KISALTMA LİSTESİ

DOS	Elektronik Durum Yoğunluğu (Electronic Density of States)
KNT	Karbon Nanotüp
MD	Moleküler Dinamik
SB	Sıkı Bağ
SBMD	Sıkı Bağ Moleküler Dinamik
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
TB	Tek boşluk
ÇB	Çift boşluk
RDF	Radyal Dağılım Fonksiyonu
BUDF	Bağ Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu
BADF	Bağ Açısı Dağılım Fonksiyonu
AKS	Atomik koordinasyon sayısı
PSK	Periyodik Sınır Koşulları
GSP	Goodwin – Skinner – Pettifor modeli
DAC	Divide and Conquer
SIMD	Single Instruction Multiple Data
RD	Replicated Data
DD	Data Decomposition
YFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 2. 1	TDKNT'lerin sınıflandırılması. (a) Armchair TDKNT, (b) Zigzag TDKNT, (c) Chiral TDKNT10
Şekil 2. 2	İki boyutlu grafenin altıgen örgü birim vektörlerine bağlı olarak kiralite vektörünün tanımlanması.....10
Şekil 2. 3	(a) Grafenin gerçek uzay birim hücresi ve (b) ter örgü vektörleri ve Brillouin bölgesi.....12
Şekil 2. 4	Grafenin enerji dispersiyon bağıntısı[40]14
Şekil 2. 5	İki Boyutlu grafen ters örgüsü üzerinde WW' çizgileri ile tanımlı TDKNT'ün ters örgüsü[39]16
Şekil 2. 6	İki Boyutlu grafen ters örgüsü. Siyah çizgiler, birinci Brillouin içine katlanmış, K1 doğrultusundaki kesitleri göstermektedir[35].....17
Şekil 2. 7	(4,2) TDKNT'ün bir boyutlu enerji bantları. Her bant, grafenin birinci Brillouin bölgesi içerisine katlanmış N tane kesiti göstermektedir [35].18
Şekil 3. 1	Deney, teori ve bilgisayar simülasyonları arasındaki bağlantı.....19
Şekil 3. 2	MD akış şeması.21
Şekil 3. 3	C atomlarının sp ³ hibritleşmesi sonucu meydana gelen σ ve π bağları28
Şekil 3. 4	SIMD taksonomisi30
Şekil 3. 5	Radyal dağılım fonksiyonu (RDF) akış diyagramı31
Şekil 3. 6	Elektronik durum yoğunluğu (eDOS) akış diyagramı32
Şekil 3. 7	Normal gerinim33
Şekil 3. 8	Gerinim alt programı akış diyagramı.....33
Şekil 3. 9	Boşluk oluşturma alt programı akış diyagramı.34
Şekil 3. 10	Burulma35
Şekil 4. 1	(10,0) TDKNT'ün değişik sıcaklıklarda simülasyon görüntüleri.....39
Şekil 4. 2	(10,0) Zigzag TDKNT'ün farklı sıcaklıklarda, toplam enerjinin zamana göre değişimi.....39
Şekil 4. 3	(10,0) Zigzag TDKNT'ün ortalama toplam enerjisinin (E_{top}) sıcaklığa bağlı olarak değişimi.....40
Şekil 4. 4	(10,0) Zigzag TDKNT için, 3000fs simülasyon süresinde Fermi enerji seviyesinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi.40

Şekil 4. 5	(10,0) TDKNT'ün (a) 20K, (b)300K, (c) 900K ve (d) 1500K sıcaklıklarda DOS grafikleri41
Şekil 4. 6	(10,0) Zigzag TDKNT için 3000fs simülasyon süresinde enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak değişimi42
Şekil 4. 7	(10,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF, (c) BADF ve (d) AKS grafikleri.....43
Şekil 4. 8	(15,0) TDKNT'ün değişik sıcaklıklarda simülasyon görüntüleri.....44
Şekil 4. 9	(15,0) TDKNT'ün, farklı sıcaklıklarda, toplam enerjinin zamana göre değişimi.....44
Şekil 4. 10	(15,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi. ...45
Şekil 4. 11	(15,0) TDKNT için, 3000 fs simülasyon süresinde Fermi enerji seviyesinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi.45
Şekil 4. 12	(15,0) TDKNT'ün (a) 0,1K, (b)240K, (c) 300K ve (d) 900K sıcaklıklarda DOS grafikleri46
Şekil 4. 13	(15,0) TDKNT için 3000fs simülasyon süresinde enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı sıcaklığa bağlı olarak değişimi.....47
Şekil 4. 14	(10,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF, (c) BADF ve (d) AKS grafikleri.....48
Şekil 4. 15	Gerinim etkisindeki (12,0) TDKNT'ün simülasyon görüntüleri50
Şekil 4. 16	T=300K sıcaklıkta (a) Germe (b) sıkıştırma ve T=1200K sıcaklıkta (c) Germe (d) sıkıştırma etkisinde (12,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....51
Şekil 4. 17	MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması51
Şekil 4. 18	(12,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi52
Şekil 4. 19	(12,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi53
Şekil 4. 20	(12,0) TDKNT'ün gerinim etkisinde DOS grafikleri.....54
Şekil 4. 21	(12,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (<i>E_g</i>) gerinime bağlı değişimi55
Şekil 4. 22	Gerinim etkisindeki (10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin simülasyon görüntüleri56
Şekil 4. 23	(10,0) TDKNT'ün (a) germe ve (b) sıkıştırma etkisinde, (13,0) TDKNT'ün (c) germe ve (d) sıkıştırma etkisinde atom başına toplam enerjisinin zamana bağlı değişimi56
Şekil 4. 24	MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması57
Şekil 4. 25	(10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin toplam enerji değerlerinin (<i>E_{top}</i>), gerinime bağlı olarak değişimi58
Şekil 4. 26	(a) (10,0) T=300K (b) (13,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....59
Şekil 4. 27	(10,0) ve (13,0) TDKNT'leri gerinim etkisinde DOS grafikleri60
Şekil 4. 28	(10,0) TDKNT'ün T=300K sıcaklıkta ve (13,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (<i>E_g</i>) gerinime bağlı değişimi61

Şekil 4. 29	(14,0) TDKNT'ün sıkıştırma denge ve gerinim altındaki simülasyon görüntüleri63
Şekil 4. 30	T=300K sıcaklıkta (a) Germe (b) sıkıştırma ve T=1200K sıcaklıkta (c) Germe (d) sıkıştırma etkisinde (14,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....63
Şekil 4. 31	MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması64
Şekil 4. 32	(14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi65
Şekil 4. 33	(14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi65
Şekil 4. 34	(14,0) TDKNT'ün gerinim etkisinde DOS grafikleri.....66
Şekil 4. 35	(14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (<i>E_g</i>) gerinime bağlı değişimi67
Şekil 4. 36	(10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün eksenel gerinime bağlı olarak RDF grafikleri.....68
Şekil 4. 37	(10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün eksenel gerinime bağlı olarak BUDF grafikleri70
Şekil 4. 38	(10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün eksenel gerinime bağlı olarak BADF grafikleri71
Şekil 4. 39	(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin gerilim – gerinim grafikleri73
Şekil 4. 40	(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin radyal gerinimin eksenel gerinime bağlı değişimi74
Şekil 4. 41	(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının gerinime bağlı değişimleri75
Şekil 4. 42	(a) $n \equiv 0 \text{ mod } 3$ metalik ve (b) $n \equiv 1 \text{ mod } 3, n \equiv 2 \text{ mod } 3$ yarı iletken zigzag TDKNT'lerin 1.Brillouin bölgeleri (c) Eksenel gerinime bağlı olarak Brillouin bölgelerindeki değişim.....76
Şekil 4. 43	3000MD adımı sonunda, kusursuz, TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT görüntüleri78
Şekil 4. 44	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi.....78
Şekil 4. 45	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin MD adımına bağlı değişimi79
Şekil 4. 46	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi.....79
Şekil 4. 47	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi80
Şekil 4. 48	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çigiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir...81
Şekil 4. 49	3000MD adımı denge sonrasında 3000 MD adımı TB ve ÇB kusurlu (13,0) TDKNT görüntüleri82
Şekil 4. 50	TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi83
Şekil 4. 51	TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin MD adımına bağlı değişimi.....83

Şekil 4. 52	TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi84
Şekil 4. 53	TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi.....84
Şekil 4. 54	Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir...85
Şekil 4. 55	TB kusuru üzerine uygulanan ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün simülasyon sonun da meydana gelen görüntüsü86
Şekil 4. 56	ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi87
Şekil 4. 57	ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjisinin MD adımına bağlı değişimi.....87
Şekil 4. 58	ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi88
Şekil 4. 59	ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi88
Şekil 4. 60	Kusursuz ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir .89
Şekil 4. 61	Kusursuz ve boşluk kusurlu (12,0) TDKNT görüntüleri.....90
Şekil 4. 62	(12,0) TDKNT'ün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (Etop), MD adımına bağlı olarak değişimi91
Şekil 4. 63	(12,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (Etot), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....92
Şekil 4. 64	(12,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerji seviyesinin(Ef), MD adımına bağlı olarak değişimi.....93
Şekil 4. 65	(12,0) TDKNT Fermi enerji seviyesinin (Ef) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....93
Şekil 4. 66	(12,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri.....94
Şekil 4. 67	(12,0) TDKNT enerji bant aralığının (Eg), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....95
Şekil 4. 68	(12,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının değişim grafikleri95
Şekil 4. 69	Kusursuz ve boşluk kusurlu (13,0) TDKNT görüntüleri.....96
Şekil 4. 70	(13,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (Etot), MD adımına bağlı olarak değişimi.....97
Şekil 4. 71	(13,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (Etot), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....98
Şekil 4. 72	(13,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerji seviyesinin(Ef), MD adımına bağlı olarak değişimi.....99
Şekil 4. 73	(13,0) TDKNT Fermi enerji seviyesinin (Ef) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....99
Şekil 4. 74	(13,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri.....100
Şekil 4. 75	(13,0) TDKNT enerji bant aralığının (Eg), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....101

Şekil 4. 76	(13,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının değişim grafikleri101
Şekil 4. 77	Kusursuz ve boşluk kusurlu (14,0) TDKNT görüntüleri.....102
Şekil 4. 78	(14,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (E _{tot}), MD adımına bağlı olarak değişimi.....103
Şekil 4. 79	(14,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (E _{tot}), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....104
Şekil 4. 80	(14,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerji seviyesinin(E _f), MD adımına bağlı olarak değişimi.....105
Şekil 4. 81	(14,0) TDKNT Fermi enerji seviyesinin (E _f) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....105
Şekil 4. 82	(14,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri.....106
Şekil 4. 83	(14,0) TDKNT enerji bant aralığının (E _g), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.....107
Şekil 4. 84	(12,0) (14,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BADF ve (c) BUDF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının grafikleri107
Şekil 4. 85	(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin KNT eksenine dik doğrultuda meydana getirilen boşluk kusurlarına bağlı olarak enerji bant aralıklarının değişimi110
Şekil 4. 86	Burulma etkisindeki (12,0) TDKNT simülasyon görüntüleri112
Şekil 4. 87	$\theta=30^\circ$ için burulma açısının testi.....112
Şekil 4. 88	(12,0) TDKNT'ün değişik burulma oranlarında (γ) atom başına toplam enerjisinin, MD adıma göre değişimi.113
Şekil 4. 89	(12,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji değerinin, burulma oranına bağlı olarak değişimi.....113
Şekil 4. 90	(12,0) TDKNT'ün bağ yapısı enerjisinin (E _{bs})ve itici potansiyel enerjinin (E _{rep}), burulma oranına bağlı olarak değişimi.....114
Şekil 4. 91	TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi114
Şekil 4. 92	(12,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunluğu (DOS)grafikleri115
Şekil 4. 93	(12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının (E _g) burulma oranına bağlı olarak değişimi116
Şekil 4. 94	(12,0) TDKNT'ün (a) RDF,(b) BUDF ve (c) BADF dağılım grafikleri116
Şekil 4. 95	Burulma etkisindeki (12,0) TDKNT simülasyon görüntüleri117
Şekil 4. 96	(13,0) TDKNT'ün değişik burulma oranlarında (γ) atom başına toplam enerjisinin, MD adıma göre değişimi.118
Şekil 4. 97	(13,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji değerinin, burulma oranına bağlı olarak değişimi.....118
Şekil 4. 98	(13,0) TDKNT'ün bağ yapısı enerjisinin (E _{bs}) ve itici potansiyel enerjinin (E _{rep}), burulma oranına bağlı olarak değişimi.....119
Şekil 4. 99	(13,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi119
Şekil 4. 100	(13,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunluğu (DOS)grafikleri120
Şekil 4. 101	(13,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının (E _g) burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi120

Şekil 4. 102	(13,0) TDKNT'ün (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF dağılım grafikleri ...	121
Şekil 4. 103	Burulma kusuruna bağlı olarak grafenin ve TKNT'ün birinci Brillouin bölgelerinin değişimi	122

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 4.1	TDKNT'lerin sınıflandırılması.....	36
Çizelge 4.2	TDKNT'lerin simülasyon sonucu elde edilen fiziksel parametreleri.....	37
Çizelge 4.3	TDKNT'lerin "Buffer Size" parametreleri.....	37
Çizelge 4.4	(12,0) TDKNT'ün TB ve ÇB kusurlarında toplam enerji ve enerji bant aralıkları.....	82
Çizelge 4.5	(12,0) TDKNT'ün TB ve ÇB kusurlarında toplam enerji ve enerji bant aralıkları.....	86
Çizelge 4.6	Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin ortalama atom başına toplam enerji değerleri.....	108
Çizelge 4.7	Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Fermi enerji seviyesi değerleri.....	109
Çizelge 4.8	Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Enerji bant aralığı değerleri.....	110
Çizelge 4.9	TDKNT'lerin fiziksel parametreleri.....	111

**KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISININ BİLGİSAYAR
SİMÜLASYONLARI**

Önder EYECİOĞLU

Fizik Bölümü Fizik Anabilim Dalı

Doktora Tezi

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Gülay DERELİ

Bu tez çalışmasında, mekanik kusurların zigzag tek duvarlı karbon nanotüplerin (TDKNT) elektronik ve fiziksel özellikleri üzerindeki etkisi N merteye paralel sıkı bağ moleküler dinamik (O(N) – SBMD) simülasyon yöntemi kullanılarak incelenmiştir.

Tezin birinci kısmında, sıcaklığa göre TDKNT'lerin enerjilerin, elektronik durum yoğunluklarının (eDOS), enerji bant aralıklarının (E_g), radyal dağılım fonksiyonlarının, bağ uzunluğu ve bağ açısı dağılım fonksiyonlarının değişimi incelenmiştir.

Tezin ikinci kısmında, düşük / yüksek sıcaklıklarda eksenel gerinim etkisindeki TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özellikleri incelenmiştir. Eksenel gerinime bağlı olarak TDKNT'lerin elektronik özelliklerinde metal – yarıiletken ve yarıiletken – metal geçişleri gözlemlenmiştir. Gerilim gerinim grafikleri kullanılarak zigzag TDKNT'lerin Young modülü ve Poisson oranları belirlenmiştir.

Tezin üçüncü ve dördüncü kısmında düşük / yüksek sıcaklıklarda boşluk ve burulma kusurlarının, TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özellikleri üzerindeki etkisi incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Tek duvarlı karbon nanot pler, N merteye, paralel algoritmalar, sıkı baę molek ler dinamik sim lasyon y ntemi, elektronik durum yoęunluęu, enerji bant aralıęı, Fermi enerji seviyesi, gerinim sim lasyonları, boşluk sim lasyonları, burulma sim lasyonları

**COMPUTER SIMULATIONS OF ELECTRONIC STRUCTURE OF CARBON
NANOTUBES**

Önder EYECİOĞLU

Department of Physics

Phd. Thesis

Advisor: Prof. Dr. Gülay DERELİ

In this thesis work, the effect of mechanical deformations on the electronic and physical properties of zigzag single wall carbon nanotubes (SWCNTs) have been studied by using order N tight binding molecular dynamics ($O(N)$ TBMD) simulation method.

In the first part of the thesis, the variation of the energetics, electronic density of states (eDOS), energy band gap, radial distribution function, bond length distribution function and bond angle distribution function with respect to temperature are investigated.

In the second part of the thesis, electronic and physical properties of zigzag SWCNT's under uniaxial strain at low/high temperature are investigated. Depending on the applied uniaxial strain, metal – semiconductor and semiconductor – metal transitions are observed. Using stress-strain figures, Young modulus and Poisson ratios of SWCNTs are defined.

In the third and fourth parts of the thesis, effect of the vacancy and torsion deformations on the electronic and physical properties of SWCNTs at low/high temperature are studied.

Keywords: Single wall carbon nanotubes, order N, parallel algorithms, tight binding molecular dynamic simulation method, electronic density of states, energy band gap, strain simulations, vacancy simulations, torsion simulations.

1.1 Literatür Özeti

Tek duvarlı karbon nanotüpler (TDKNT),sıfır enerji bant aralıklı yarı iletken olan grafen levhasının bir eksen doğrultusunda tüp şeklinde katlanması ile meydana gelmiş yapılar olarak düşünülebilirler. TDKNT'ler katlanma geometrisine ve yarıçaplarına bağlı olarak, elektronik olarak metal veya yarıiletken özellik gösterebilirler. Bu nedenle, geleceğin elektronik cihazları için dikkat çekici malzemelerdir. Deneysel ve teorik çalışmaların birçoğu, mükemmel TDKNT'leri incelemektedirler. Fakat KNT'lerin sentez aşamalarında ve uygulama alanlarında meydana gelebilecek olan, düşük ve yüksek sıcaklık etkileri, germe-sıkıştırma, boşluk ve burulma gibi yapısal etki ve kusurların, TDKNT lerin yapısal ve elektronik özelliklerine etkisini incelemeyi önemli hale getirir. Birçok teorik hesaplama, KNT'lerde meydana gelen yapısal bozuklukların elektronik yapılarını etkin bir şekilde değiştirdiği gösterilmiştir.

Literatürde, sıcaklıkla elektronik yapının değişimi Capaz vd. [1] tarafından yapılmıştır.Yarı iletken KNT'lerin enerji bant aralıklarına (E_g) sıcaklığın etkisini, ortogonal olmayan sıkı bağ (SB) metodu kullanılarak incelemişlerdir. İncelemede, enerji bant aralığının, sıcaklığa bağlı olarak belirgin bir şekilde azaldığı görülmüştür ve 300K den büyük sıcaklıklarda doğrusal olarak azalmasına karşın, düşük sıcaklıklarda doğrusal olmayan davranış gösterdiği tespit edilmiştir. Bu çalışmada, (10,0) ve (15,0) zigzag TDKNT'lerin toplam enerjilerinin (E_{top}), Fermi enerji seviyelerinin (E_f), elektronik durum yoğunluklarının ($eDOS$), enerji bant aralıklarının (E_g) ve fiziksel özelliklerinin (radyal dağılım fonksiyonları (RDF), atomik koordinasyon sayıları (AKS), bağ uzunluğu

(BUDF) ve bağı açısı dağılım fonksiyonları (BADF)) sıcaklığa bağlı değişimleri incelenmiştir.

Gerilim / gerinim altında TDKNT'ler ile ilgili çalışmalarda, Shan ve Bao [2], SB hesaplamalarını kullanarak gerinimin artışı ile zigzag TDKNT'lerin elektronik durum yoğunluğu (eDOS) ve enerji bant aralıkları üzerinde yarıiletken – metal geçişlerini göstermişlerdir. Ogata ve Shibutani [3] tarafından verilen SB ve YFT sonuçları, eksenel gerinim altındaki TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının değiştiğini ve elektronik özelliklerinin metalden yarıiletkene veya yarıiletkenden metale geçiş yaptığını göstermiştir. Ito vd. [4], eksenel gerinim altındaki (10,0) TDKNT'ün elektronik bant yapısını çalışmışlardır. Çalışmalarında düzlem dalga baz fonksiyonlarına dayanan “ultra soft pseudopotansiyel” ilk prensipler yöntemini kullanmışlardır ve eksenel gerinim uygulanması ile yarıiletken – metal geçişinin meydana geldiğini tespit etmişlerdir. Pullen vd. [5] tarafından YFT kullanılarak yaptıkları çalışmada (10,0) ve (8,4) TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının eksenel gerinim ile doğrusal olmayan davranış gösterdikleri ve (10,0) TDKNT'ün %6 sıkıştırma altında metalik olduğu belirlendi. Yüksek gerinim etkisi altındaki TDKNT'lerin elektronik özellikleri, SB yarı ampirik bant hesaplamaları kullanılarak incelenmiştir [6]. Çalışmada TDKNT'ler, kiralite vektörünün $(\vec{C}_h = (n, m))$ “n” ve “m” indislerine bağlı olarak $m - n = 3q$, $m - n = 3q + 1$ ve $m - n = 3q + 2$ (q sabit sayı) olmak üzere üç grupta toplanmıştır. $m - n = 3q$, sınıfı TDKNT'ler, gerinim altında metal – yarıiletken geçişleri gösterirken, $m - n = 3q + 1$ ve $m - n = 3q + 2$ TDKNT'ler yarıiletken – metal geçişleri göstermektedir. Benzer sınıflandırma Sreekala vd. [7] ve Zhang vd. [8] tarafından yapılan YFT çalışmalarında da kullanılmıştır. Çalışmalarda, zigzag TDKNT'ler kiralite vektörünün n indisine bağlı olarak $n = 3q$, $n = 3q + 1$ ve $n = 3q + 2$ (q sabit sayı) olmak üzere üç sınıfta toplanmıştır ve eksenel gerinime bağlı olarak elektronik yapılarının ve enerji bant aralıklarının değişimi incelenmiştir. Metalik özellik gösteren $n = 3q$ sınıfı TDKNT'ler enerji bant aralıkları sıkıştırma ve germe gerinimleri etkisi altında artar. Yarıiletken özellik gösteren $n = 3q + 1$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları, germe etkisi altında artarken, sıkıştırma gerinimi etkisinde azalmaktadır. Sıkıştırma etkisi altında, yarıiletken - metal geçişi meydana gelir. Yine yarıiletken özellik gösteren $n = 3q + 2$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları, germe gerinimi altında azalırken sıkıştırma gerinimi altında

artmaktadır ve germe etkisinde yarıiletken – metal geçişi meydana gelmektedir. Başka bir YFT çalışmasında Valavala vd. [9], (20,0) TDKNT'ün, %3,7 germe gerinimi etkisinde yarıiletken – metal geçişi gösterdiğini tespit etmişlerdir. Zhang ve Han [10], SB hesaplamaları kullanarak, TDKNT'ler üzerine germe ve burulma gerinimlerini uygulamışlardır. Hesaplamalarında, germe gerinimlerinin, zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıkları üzerinde büyük etkisi meydana gelirken, armchair TDKNT'lerin enerji bant aralıkları üzerinde etkinin olmadığını göstermişlerdir. Gerinime bağlı olarak, TDKNT'lerin elektronik özelliklerinde yarıiletken – metal ve metal – yarıiletken geçişlerinin meydana gelebileceği gösterilmiştir. Genel olarak literatürde gerinime bağlı olarak enerji bant aralığının değişiminin TDKNT'ün sınıflandırılmasına bağlı olarak farklılık gösterdiği ve gerinim ile TDKNT'lerde metal – yarıiletken, yarıiletken – metal geçişlerinin olduğu gösterilmiştir. Bu tez çalışmasında, zigzag TDKNT'ler, $n \equiv 0(mod 3)$, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ üç sınıfta toplanmışlardır. Bu üç sınıf için sırası ile (12,0), (10,0) ve (13,0) ve (14,0) TDKNT'ler seçilmiştir. Seçilen TDKNT'lerin gerinime bağlı olarak elektronik (E_f , $eDOS$ ve E_g), fiziksel (E_{top} , RDF , $BUDF$, $BADF$ ve AKS) ve mekanik özelliklerinin (Young modülü ve Poisson oranı) değişimi 300K ve 1200K sıcaklıkları altında incelenmiştir.

Boşluk deformasyonları ile ilgili çalışmalarda, Leonor vd. [11], SB ve Green fonksiyonu yöntemi kullanarak metalik tek boşluk (TB) kusurlu TDKNT'lerin iletkenliklerinin, boşluk kusurlarına bağlı olarak incelemişlerdir. TB kusuruna bağlı olarak, dar yarıçaplı TDKNT'lerin iletkenliğinin geniş yarıçaplı TDKNT'lerin iletkenliğine göre daha fazla değiştiğini tespit etmişlerdir. Lu ve Pan [12], SB yöntemi kullanarak, $n = 6 - 15$ ($n, 0$) ve $n = 3 - 12$ (n, n) TDKNT'lerin boşluk formasyon enerjilerinin n indisinin artışına bağlı olarak arttığını göstermişlerdir. Kusurlu (8,8) ve (14,0) TDKNT'lerin durum yoğunluğu grafiklerinde, Fermi enerjisi civarında kusura bağlı olarak yeni piklerin ve yerleşmiş durumların ortaya çıktığını göstermişlerdir. Tien vd.[13], Ab-initio hesaplamaları kullanarak, 79 ve 119 atomlu (10,0) TDKNT'ün TB kusuruna bağlı olarak enerji bant aralığı değişimini, enine uygulanan elektrik alan altında incelemişlerdir. Enine elektrik alan uygulanmadığı durumda, kusursuz (10,0) TDKNT'ün bant aralığını 0,67 eV olarak tespit etmişler buna karşın 79 atomlu (10,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının 0,19 eV değerine, 119 atomlu (10,0) TDKNT'ün bant aralığını 0,30 eV

değerine düştüğünü göstermişlerdir. Orellana ve Fuentealba [14], spin – yoğunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları kullanarak, (6,6), (8,8), (10,0) ve (14,0) TDKNT’lerde, elektronik yapının farklı TB ve çift boşluk (ÇB) konsantrasyonlarında değişimini incelemişlerdir. TB içeren (6,6) ve (10,0) TDKNT’lerde, kusur civarındaki atomlar tekrar organize olarak beşgen örgü oluştururlar. (6,6) TDKNT, farklı TB konsantrasyonlarında metalik özelliğini korumaktadır. (10,0) TDKNT ün enerji bant aralığı 0,8 eV değerinden, düşük TB konsantrasyonlarında 0,2eV değerine ve yüksek TB konsantrasyonlarında 0,1eV değerine azalmaktadır ve yarıiletken özelliğini korur. (6,6), (10,0) (8,8) ve (14,0) TDKNT’ler, ÇB konsantrasyonlarında enerji bant aralıkları 0,15 eV olan küçük bant aralıklı yarıiletken olurlar. Jhi [15], Ab-initio pseudo potansiyel YFT kullanarak, çoklu boşlukların $n = 3q + 1$ ve $n = 3q - 1$ yarıiletken zigzag TDKNT’lerin elektronik yapısına etkisini incelemişlerdir. Özellikle ÇB, bant aralığını değiştirmede etkili olduğunu göstermişlerdir. ÇB deformasyonları, tüp eksenine paralel ve eğimli bir yön seçilerek uygulanmıştır. (10,0) TDKNT ün bant aralığını 0,7 eV olarak tespit etmişlerdir. Paralel ÇB etkisinde, enerji bant aralığının azaldığını, eğik ÇB kusurlarında bant aralığının değişmediğini göstermişlerdir. TB kusurlarında, enerji bant aralığında kusurlardan kaynaklanan enerji durumları yaratıldığını göstermişlerdir. Okada [16], YFT kullanarak ek atom ve boşluk deformasyonları içeren karbon nanotüplerin elektronik yapılarını ve enerjetik özelliklerini incelemiştir. Ek atom ve boşluk kusurlarının (9,0) TDKNT’de metal-yarıiletken geçişlerine yol açtığı ve kusurlu (10,0) ve (11,0) yarıiletken TDKNT’lerin enerji aralıklarının, kusursuz TDKNTlerin enerji aralıklarından daha dar olduğu ifade edilmiştir. Ishii vd. [17], (5,5) metalik ve (5,0) yarıiletken TDKNT lerin elektronik geçiş özelliklerine boşluk deformasyonlarının etkisini, Sıkı bağ yaklaşımı Kubo-Greenwood formülüne dayalı zaman bağımlı dalga paketi yaklaşımını kullanarak incelemişlerdir. (5,5) metalik TDKNT’de TB deformasyonlarında, elektronik durum yoğunlukları grafiklerinde Fermi enerjisi civarında keskin bir pikin oluştuğu ve durum yoğunluğunun yapısını değiştirdiği görülmüştür. (5,0) yarıiletken TDKNT’de ise elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde enerji bant aralığı bölgesinde daha güçlü yerleşmiş durumların oluştuğu gözlemlenmiştir. Rocha vd. [18], düzlem dalga ve yerel baz setleri ile YFT kullanarak (5,5) TDKNT’ün TB kusurlarında elektronik yapısını incelemiştir. Durum yoğunluğu grafiklerinde Fermi enerjisi civarında mini bant aralıkları

ve dalgalanmalar tespit etmişlerdir. Berber ve Oshiyama [19], YFT kullanarak (6,6) metalik TDKNT' durum yoğunluğu grafiklerinde ÇB bağlı olarak Fermi enerjisi civarında yeni bant oluştuğunu ve böylece boşluk deformasyonun elektronik yapıyı etkilediğini göstermişlerdir. Faizabadi ve Bagheri [20], koherent potansiyel yaklaşımı ve Green fonksiyonu yöntemi kullanarak zigzag TDKNT'lerin bant aralıklarında boşluk konsantrasyonunun etkisini incelemişlerdir. Metalik ve yarıiletken zigzag TDKNT'lerin bant aralıklarının, boşluk konsantrasyonunun artışına bağlı olarak arttığını ve metalik TDKNT lerde metal–yarıiletken geçişlerinin meydana geldiğini göstermişlerdir. Çalışmamızda ise, (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ler üzerinde KNT ekvator düzlemi üzerinde sırası ile bir, iki, üç, dört ve beş atomun çıkarılması ile boşluk deformasyonları meydana getirilmiş ve bu deformasyonların TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özelliklerine etkisi incelenmiştir.

Burulmuş KTN'ler ile ilgili çalışmalarda; Clauss vd. [21], atomik çözünürlüklü taramalı tünelleme mikroskobu (STM) kullanarak kristalize nanotüp sicimleri içerisine gömülü TDKNT'lerin görüntülerini incelemişlerdir. Görüntülerin 1,4 nm çaplı ve 4 derece burkulmuş (10,10) veya (11,11) armchair TDKNT oldukları ifade edilmiştir. Eğer deformasyonsuz tüp metalik ise burulmuş TDKNT'ün Fermi enerjisi civarında bant aralığına sahip olacağını belirtmişlerdir. (10,10) metalik TDKNT'ün 4 derece burulması ile 0,6eV değerinde bant aralığına sahip olacağını bulmuşlardır. Treister ve Pozrikidis [22], beş geometrik parametre (burulma radyal genleşme, eksenel uzama ve dahili yer değiştirmelerin iki bileşeni) etkisindeki TDKNT'lerin enerjetik ve bant aralıklarını teorik yöntemler ve nümerik simülasyon yöntemleri kullanarak incelemişlerdir. Çalışmada, (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0), (11,0) ve (12,0) TDKNT'lerin burulmaya bağlı olarak bant aralıklarının değişimleri gösterilmiştir. (9,0) ve (12,0) metalik ve (7,0) ve (10,0) yarıiletken TDKNT'lerin bant aralıklarının belirli bir burulma değerinden sonra arttığı; (8,0) ve (11,0) yarıiletken TDKNT'lerin bant aralıklarının azaldığı grafikler ile gösterilmiştir. Zang vd. [23] MD ve yoğunluk fonksiyoneline dayalı sıkı bağ modelini kullanarak yaptıkları çalışmada bant aralığının, burulma oranı ile periyodik olarak modüle olduğunu göstermişlerdir. (12,0) TDKNT'ün bant aralığının $5^\circ/\text{nm}$ burulma oranı değerine kadar doğrusal olarak arttığını ve bu noktada 0,6eV değerine ulaştığını bulmuşlardır. Wang vd. [24], silindirler üzerinde sıkı bağ modeli kullanarak, eksenel

gerinim ve burulma uygulanan TDKNT'lerde bant deęişikliklerini incelemişlerdir. Çalışmada, (3,3), (5,5), (8,8) ve (10,10) Armchair ve (9,0), (12,0), (15,0) ve (18,0) zig-zag TDKNT'ler kullanılmıştır. Armchair ve zigzag TDKNT'lerde, bant aralıklarının aksenal burulmaya baęlı olarak arttığı gösterilmiştir. Literatürde verilen bu deneysel ve teorik çalışmalar, burulma deformasyonlarına baęlı olarak TDKNT'lerin enerji ve elektronik özelliklerinin etkin bir şekilde deęiştiğini göstermektedir. Bu tez çalışmasında, burulma deformasyonları uygulanarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özellikleri üzerindeki deęişimler incelenmiştir. Burulma deformasyonları, burulma açısının tüp boyu ile ölçeklendirilmesi ile TDKNT'lere uygulanmıştır.

1.2 Tezin Amacı

Günümüzün ve geleceğin teknolojisi olan nanoteknolojinin en önemli malzemesi olarak ortaya çıkan KNT'lerin, özellikle transistör, elektronik devre ara bağlantıları gibi birçok elektronik uygulamalarında potansiyel kullanım alanları mevcuttur. Bu bakımdan, KNT'lerin üretim ve kullanım aşamalarında maruz kalacakları deformasyonların, elektronik özelliklerine etkisi önemli bir inceleme alanıdır.

Bu tez çalışmasında, Y.T.Ü. Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarı kurucusu Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından TDKNT simülasyonu için geliştirilmiş olan paralel N merteye sıkı bağ moleküler dinamik (O(N) SBMD) simülasyon yöntemi kullanılmıştır [25-28]. Mekanik deformasyonların TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özelliklerine etkisi incelenmiştir. Mekanik deformasyonlar, düşük / yüksek sıcaklık, germe / sıkıştırma, burulma ve boşluk şeklinde uygulanmıştır. Kullanılan yöntem, daha önceki çalışmalarda KNT simülasyonlarına başarı ile uygulanmıştır [28-33]. Atomik boyutlarda kuantum etkiler baskındır. Kullanılan O(N) SBMD yöntemi kuantum mekanik etkileri hesap içerisine kattığından nanoteknoloji hesaplamalarında uygun bir yöntemdir. Program sıcaklık etkisini içerecek şekilde yazılmıştır. TDKNT'lerin elektronik özellikleri, elektronik durum yoğunluğu fonksiyonları (DOS) ve DOS grafiklerini kullanarak hesapladığımız enerji bant aralıkları (E_g) kullanılarak incelenmiştir.

Tez çalışmaları, (10,0), (12,0), (13,0), (14,0) ve (15,0) TDKNT'ler kullanılarak yapılmıştır. Tez çalışmasında G. Dereli tarafından geliştirilmiş N - merteye Sıkı- Bağ Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçek uzayda;

- i.) Düşük/ yüksek sıcaklıklarda TDKNT'lerin elektronik yapıları incelenmiştir. Bulk yarıiletkenlerde enerji bant aralığı sıcaklık artışı ile doğrusal olarak azalmaktadır. Bu davranış, TDKNT'lerin elektronik yapıları incelendiğinden de gözlemlenmektedir. Fakat düşük sıcaklıklarda nano yapıdan kaynaklanan farklı davranış gözlenmektedir.
- ii.) 300K/ 1200K sıcaklıklarda germe / sıkıştırma etkisi altında TDKNT'lerin fiziksel, mekanik ve elektronik yapısı ve yarıiletken- metal, metal yarıiletken geçişleri incelenmiştir.

- iii.) 0,1K/ 300K/ 1200K sıcaklıklarda tek boşluk çok boşluk deformasyonların TDKNT'lerin fiziksel ve elektronik yapılarına etkisi incelenmiştir.
- iv.) 0,1/ 300K / 1200K sıcaklıklarda burulma deformasyonlarının TDKNT'lerin fiziksel ve elektronik yapılarına etkisi incelenmiştir.

Tezin 2. Bölümünde, TDKNT'lerin sınıflandırılması ve elektronik özellikleri, 3. bölümünde kullanılan yöntem ve hesaplanan fiziksel ve elektronik özellikler hakkında teorik bilgiler, 4. Bölümünde, elde edilen simülasyon sonuçları ve 5. Bölümünde ise elde edilen sonuçlarla ilgili olarak yorumlar verilmiştir.

1.3 Hipotez

TDKNT'lerin elektronik yapısı hiçbir katkı yapılmaksızın, sadece geometrik yapısına bağlı olarak değişebilmekte ve metalik veya yarıiletken özellik gösterebilmektedir. Bu elektronik cihaz tasarımları için eşsiz bir özelliktir. Fakat TDKNT'lerin bu eşsiz elektronik özelliklerinin mekanik deformasyonlardan nasıl etkileneceği önemli bir sorudur. Çalışmada mekanik deformasyonların, TDKNT'lerin elektronik özelliklerini önemli şekilde etkileyeceği ve metal – yarıiletken veya yarıiletken – metal geçişlerinin meydana gelebileceği öngörülmektedir.

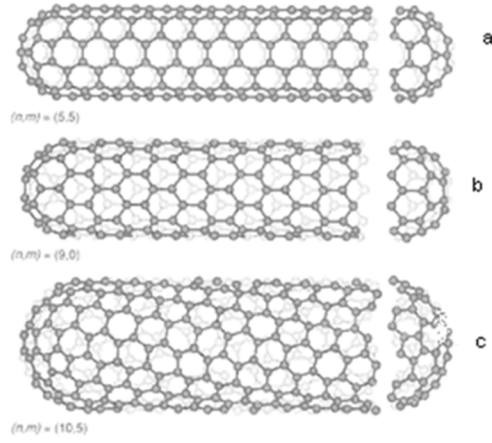
BÖLÜM 2

TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER

Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler (TDKNT) ilk kez 1993 yılında S. Iijima tarafından NEC laboratuvarlarında keşif edilmiştir. TDKNT'ler, çapı 1nm, boyu birkaç mikrometre olabilen içi boş silindir şeklindeki yapılardır. Bu yapı, grafitin tek bir katmanının yani grafen levhasının bir silindir çevresinde sarılmış hali olarak düşünülebilir. (Uzunluk/çap) oranı 10^5 mertebesinde olduğundan bu silindirik yapı tek boyutlu yapı olarak kabul edilir.

2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması

Grafen levhayı oluşturan altı karbonlu balpeteği örgüsünün, tüp eksenini etrafındaki yönelimi, TDKNT'ün yapısını ve fiziksel özelliklerini belirlemektedir. Bu yönelime bağlı olarak TDKNT 'ler, achiral TDKNT'ler ve chiral TDKNT'ler olmak üzere iki ana sınıfa ayrılırlar (Şekil 2. 1). Achiral TDKNT'ler simetrik yapıya sahiptir ve ayna görüntüsünün yapısı orijinal yapı ile aynıdır. Achiral TDKNT'ler ise altıgen örgünün TDKNT eksenini doğrultusundaki görüntüsüne göre; armchair TDKNT ve zigzag TDKNT'ler olmak üzere ikiye ayrılırlar. Chiral TDKNT'ler spiral simetriye sahiptirler ve ayna simetrisi korunmaz.

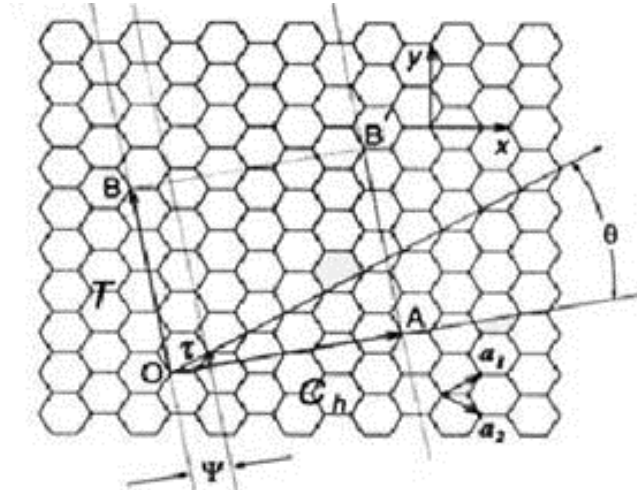


Şekil 2. 1 TDKNT'lerin sınıflandırılması. (a) Armchair TDKNT, (b) Zigzag TDKNT, (c) Chiral TDKNT

2.2 Kiralite Vektörü

TDKNT'lerin yapısal özellikleri, iki boyutlu grafenin altıgen örgü birim vektörlerinin ($\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$) lineer birleşimi olarak ve TDKNT'ün ekvator düzlemi üzerinde tanımlanan kiralite vektörü ($\vec{C}_h$) ile belirlenir.

$$\vec{C}_h = (n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2) \quad (2.1)$$



Şekil 2. 2 İki boyutlu grafenin altıgen örgü birim vektörlerine bağlı olarak kiralite vektörünün tanımlanması.

$\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim vektörleri, ortogonal olmayan, aralarında 60 derece açı bulunan altıgen gerçek uzay birim vektörleridir ve iki boyutlu kartezyen koordinat sisteminde

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

olarak tanımlanırlar. Kiralite vektörü kısaca $\vec{C}_h = (n, m)$ şeklinde tariflenir. Burada n ve m , sırası ile $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim vektörleri doğrultusundaki sabit tam sayılardır. Kiralite vektörü, TDKNT'lerin eksenleri etrafındaki yönelimleri, dolayısı ile sınıflandırılmalarını belirler. $\vec{C}_h = (n, m)$ olması durumunda ($n \neq m$), chiral TDKNT iken, $\vec{C}_h = (n, n)$ olması durumunda ($n = m$) armchair TDKNT ve $\vec{C}_h = (n, 0)$ durumunda ($m = 0$) ise zigzag TDKNT olur (Şekil 2.2) [34]. TDKNT ekvator düzleminin çevre uzunluğu (L), kiralite vektörünün uzunluğuna eşittir.

$$L = |\vec{C}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.3)$$

Buradan TDKNT'ün yarıçapı (r_t),

$$r_t = \frac{L}{2\pi} = \frac{a}{2\pi}\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.4)$$

formülü ile hesaplanabilir. Kiralite vektörünün yönelimi, $\vec{a}_1$ ve $\vec{C}_h$ vektörlerinin arasındaki açı olarak tanımlanan kiralite açısı (θ) ile tanımlanır. Kiralite açısı

$$\cos \theta = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{C}_h}{|\vec{a}_1| \cdot |\vec{C}_h|} \quad (2.5)$$

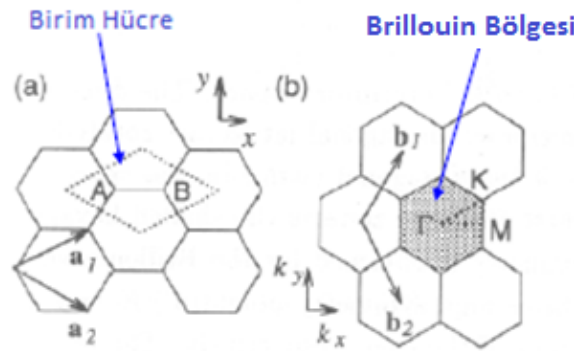
ifadesi ile hesaplanır. Kiralite açısı 0° ile 30° arasında değerler alabilir. $\theta = 0^\circ$ olması durumunda zigzag TDKNT, $\theta = 30^\circ$ olması durumunda ise armchair TDKNT'leri ifade eder. Bu değerlerin arasındaki diğer bütün açı değerlerinde chiral TDKNT'leri ifade eder.

Kiralite vektörü ve kiral açı ile yapılan bu sınıflandırmaya bağlı olarak TDKNT'ler farklı fiziksel ve elektronik özellikler gösterirler. Örneğin, tüm armchair TDKNT'ler metalik özellik gösterirler. Buna karşın zigzag TDKNT'lerin bir kısmı yarıiletken özellik gösterirler.

2.3 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı

TDKNT'ler, kiralite vektörlerine ve kiralite açılarının bağlı olarak metal veya yarıiletken özellik gösterebilirler. Teorik olarak TDKNT'lerin 1/3'ünün metalik, 2/3'ünün ise

yariletken özellik göstereceği tahmin edilmektedir. Bir KNT'ün elektronik yapısının, herhangi bir katkı yapılmaksızın, yalnızca geometrik yapısına bağlı olarak değişmesi birçok elektronik uygulama için eşsiz bir özelliktir. KNT'lerin elektronik yapısı ve özellikleri grafenin sarılma geometrisi ile belirlenir. Grafen, grafitin tek bir katmanıdır ve 2 boyutlu bir yapıdır. Grafen üzerindeki C atomları, sp^2 hibritleşmesi gösterirler.



Şekil 2. 3 (a) Grafenin gerçek uzay birim hücresi ve (b) ter örgü vektörleri ve Brillouin bölgesi

Şekil 2. 3 de, grafenin gerçek uzay birim hücresi ve Brillouin bölgesi gösterilmiştir. Ters örgü birim vektörleri, gerçek uzay birim vektörlerine bağlı olarak

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.6)$$

ile hesaplanırlar ve kartezyen koordinat sisteminde

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{2\pi}{a} \hat{j} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \hat{i} - \frac{2\pi}{a} \hat{j} \quad (2.7)$$

ifadeleri ile tanımlanırlar. 2 boyutlu grafenin birinci Brillouin bölgesi üzerinde 3 yüksek simetri noktası tanımlanır. Bu 3 yüksek simetri noktası sırası ile birinci Brillouin bölgesinin merkezi (Γ), köşeleri (K) ve kenar orta noktaları (M) dir. Enerji dispersiyon bağıntısı, Γ , K ve M simetri noktalarının oluşturduğu üçgen (Şekil 2. 3) için, SB enerji hesaplamaları kullanılarak hesaplanır. Grafen sp^2 hibritleşmesine bağlı olarak 3 tane

σ bağı ($2s, 2px$ ve $2py$ orbitalleri) ve grafen yüzeyine dik olan $2pz$ orbitallerinin meydana getirdiği bir tane kovalent π bağı yapar. Grafenin altıgen örgüsündeki C atomları arasındaki bağlanmadan σ bağları sorumludur. Fakat grafenin elektronik özellikleri π bağlarına bağlıdır. Grafen birim hücrendeki A ve B noktalarında bulunan C atomları için, Seküler denklemin ($\det(\mathcal{H} - ES) = 0$) transfer ($\mathcal{H}$) ve örtüşme matrisleri (S);

$$\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{AA} \end{bmatrix}, S(k) = \begin{bmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{AA} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

dir. Burada, grafen birim hücrendeki A ve B atomlarındaki etkileşimler, “en yakın komşu” yaklaşımı kullanılarak;

$$\begin{aligned} H_{AA} &= \langle \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) | H | \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_{A'}} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_{A'})) \langle \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_{A'}) \rangle \cong t_o = \epsilon_{2p} \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} H_{AB} &= \langle \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) | H | \Phi^B(\vec{k}, \vec{r}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_B} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_B)) \langle \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi^B(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \cong t_1 f(k) \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} S_{AA} &= \langle \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) | \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_{A'}} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_{A'})) \langle \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_A) | \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_{A'}) \rangle \cong s_o = 1 \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} S_{AB} &= \langle \Phi^A(\vec{k}, \vec{r}) | \Phi^B(\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_B} \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_B)) \langle \varphi^A(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_A) | \varphi^B(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \cong s_1 = s \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & t f(k) \\ t f^*(k) & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} S = \begin{pmatrix} 1 & s f(k) \\ s f^*(k) & 1 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

olarak bulunur. Burada $f(k)$ kompleks fonksiyondur ve

$$f(k) = e^{\frac{ik_x a}{\sqrt{3}}} + 2e^{-\frac{ik_x a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \quad (2.14)$$

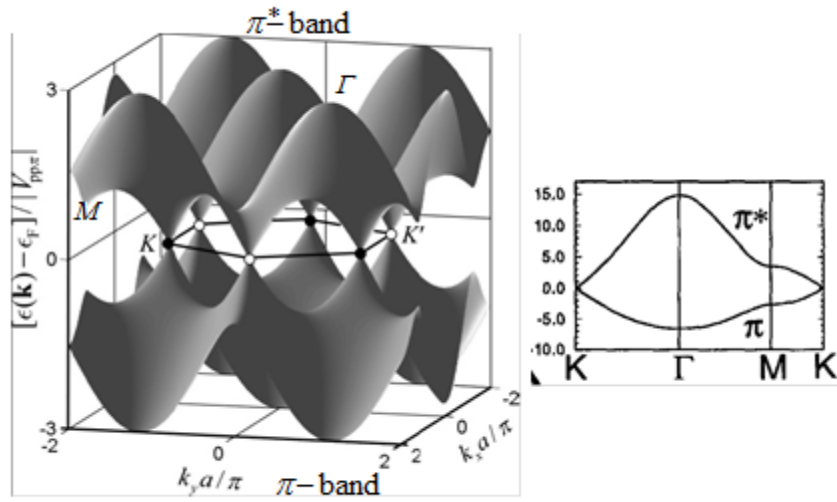
ile tanımlanır [34]. Seküler denklemin ($\det(\mathcal{H} - ES) = 0$) çözülmesi ile enerji özdeğerleri

$$E_{g2D}^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\epsilon_{2p} \pm t \sqrt{|f(k)|}}{1 \pm s \sqrt{|f(k)|}} \quad (2.15)$$

olarak hesaplanır. Örtüşme integrali (s) sıfır olduğunda, π^* - anti-bağlanma enerji bantı ve π - bağlanma enerji bantı, $E = \epsilon_{2p}$ civarında simetrik olurlar. $s = 0$ için enerji dispersiyon bağıntısı (Slater-Koster çözümü)

$$E_{g2D}^{\pm}(k_x, k_y) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (2.16)$$

olarak bulunur. Burada t transfer integrali ve a iki boyutlu grafenin örgü sabitidir ($a = 2,46 \text{ Å}$) [34].



Şekil 2. 4 Grafenin enerji dispersiyon bağıntısı[40]

Enerji dispersiyon grafiğinin üst kısmı, π^* - anti-bağlanma enerji bantını ve alt kısmı ise π - bağlanma enerji bantını temsil eder (Şekil 2. 4). $T = 0K$ sıcaklıkta, bütün elektronlar π bantını doldururlar ve π^* boştur. π ve π^* bantları birinci Brillouin bölgesinin köşeleri olan K simetri noktasında dejeneredirler. Grafen birim hücresinde iki C atomu ve ilk bantta dört izinli enerji durumu bulunur. Her atom iki π enerji bandına elektron sağladığından (sp^2 hibritleşmesine göre) $T = 0K$ sıcaklıkta, birinci enerji bantı tamamen dolu, ikinci enerji bantı ise tamamen boş olur. Böylece grafen sıfır enerji bant aralıklı bir yarıiletkenidir. Grafenin verilen 2 boyutlu enerji dispersiyon bağıntısına bağlı olarak, KNT'ün 1 boyutlu enerji dispersiyon bağıntısı türetilir.

Şekil 2. 2 de gösterilen $\vec{T}$ vektörü, bir boyutlu KNT'ün birim vektörüdür ve nanotüp eksenine paralel, kiralite vektörüne ($\vec{C}_h$) diktir (Şekil 2. 2) ve TDKNT'ün öteleme vektörü olarak ifade edilir. $\vec{T}$ vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim vektörlerinin lineer kombinasyonu olarak tanımlanır.

$$\vec{T} = (t_1\vec{a}_1 + t_2\vec{a}_2) \quad (2.17)$$

$\vec{T}$ ile $\vec{C}_h$ arasındaki diklik bağıntısını ($\vec{T} \cdot \vec{C}_h = 0$) kullanarak; t_1 ve t_2 nin n ve m cinsinden ifadesi,

$$t_1 = \frac{(2m+n)}{d}, t_2 = -\frac{(2n+m)}{d} \quad (2.18)$$

dir. $\vec{T}$ vektörü, bir boyutlu TDKNT'ün eksen doğrultusundaki birim vektörü olduğundan, d , $(2m+n)$ ile $(2n+m)$ arasındaki en büyük ortak bölenidir (OBEB). Bir boyutlu TDKNT'ün birim hücresi $\vec{T}$ ile $\vec{C}_h$ arasında bulunan dikdörtgen bölgedir (Şekil 2. 2; OBB'A dikdörtgeni). Böylece KNT birim hücresi içerisinde bulunan hegzaonların sayısı (N);

$$N = \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r} = \frac{2L^2}{a^2 d_r} \quad (2.19)$$

bağıntısı ile bulunur. Her bir hegzagonda 2 tane karbon atomu olduğuna göre KNT birim hücresindeki toplam karbon atomu sayısı $2N$ dir.

$\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$, KNT'ün ters örgü vektörleri olmak üzere, $\vec{K}_2$ eksen doğrultusundaki ve ekvator düzlemi doğrultusundaki $\vec{K}_1$ ters örgü vektörleri $\vec{R}_i \cdot \vec{K}_j = 2\pi\delta_{ij}$ bağıntısı ile bulunur. KNT bir boyutlu bir yapı olduğundan yalnız $\vec{K}_2$ ters örgü vektörüdür. $\vec{K}_1$, $\vec{C}_h$ doğrultusunda ayırık k dalga sayılarını verir. Periyodik sınır koşullarını kullanarak;

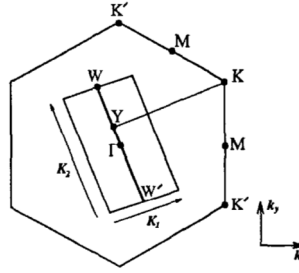
$$\begin{aligned} \vec{C}_h \cdot \vec{K}_1 &= 2\pi, \vec{T} \cdot \vec{K}_1 = 0 \\ \vec{C}_h \cdot \vec{K}_2 &= 0, \vec{T} \cdot \vec{K}_2 = 2\pi \end{aligned} \quad (2.20)$$

$\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$ vektörleri, 2 boyutlu grafenin ters örgü birim vektörlerine bağlı olarak

$$\begin{aligned}\vec{K}_1 &= \frac{1}{N}(-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2), \\ \vec{K}_2 &= \frac{1}{N}(m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2)\end{aligned}\quad (2.21)$$

olarak bulunur.

$N\vec{K}_1 = (-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2)$, iki boyutlu grafen için bir ters örgü vektörüne karşılık geldiğinden $N\vec{K}_1$ ile ayrılan iki dalga vektörü eşdeğerlidir. t_1 ve t_2 1 den başka ortak bölene sahip olmadıklarından, $N-1$ vektörün ($\mu\vec{K}_1$ ($\mu=1,2,3,\dots,N-1$)) hiçbirisi ters örgü vektörü değildir. Yani N dalga vektörü ($\mu\vec{K}_1$ ($\mu=0,1,2,3,\dots,N-1$)) N tane ayrık k dalga vektörü verir. Bu dalga vektörlerinin boyu, birinci Brillouin bölgesinin uzunluğu olan $\frac{2\pi}{T}$ dir. Bu N tane k dalga vektörü değeri, N tane bir boyutlu enerji bantı meydana getirir. $\vec{T}$ Vektörünün geçiş simetrisinden dolayı sonsuz uzunluklu bir KNT için $\vec{K}_2$ vektörü yönünde bir sürekli dalga vektörü elde edilir.



Şekil 2. 5 İki Boyutlu grafen ters örgüsü üzerinde WW' çizgileri ile tanımlı TDKNT'ün ters örgüsü [39]

Bir boyutlu KNT'ün Brillouin bölgesi, 2 boyutlu grafenin Brillouin bölgesinde tanımlı, $\vec{K}_2$ vektörüne paralel olan WW' çizgileri ile tanımlanır (Şekil 2. 5) ve sadece $\vec{K}_2$ vektörü bir boyutlu TDKNT'ün ters örgü vektörüdür. $\mu\vec{K}_1$ ($\mu=0,1,2,3,\dots,N-1$) quantize dalga vektörleri ile WW' çizgilerinden ayrılan çizgi segmentlerindeki iki boyutlu grafenin enerji dispersiyon bağıntıları, birinci Brillouin bölgesi içerisine katlandığında, N parça bir boyutlu dispersiyon bağıntıları elde edilir. Bu dispersiyon bağıntıları, bir boyutlu TDKNT'ün enerji dispersiyon bağıntılarına ($E_\mu(k)$) karşılık gelir. KNT çevresel eksen doğrultusunda bir birinden ayrık olan TDKNT'ün $\vec{k}$ dalga vektörleri, $\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$ dalga vektörlerinin lineer kombinasyonudur.

$$\vec{k} = c_1 \vec{K}_1 + c_2 \vec{K}_2 \quad (2.22)$$

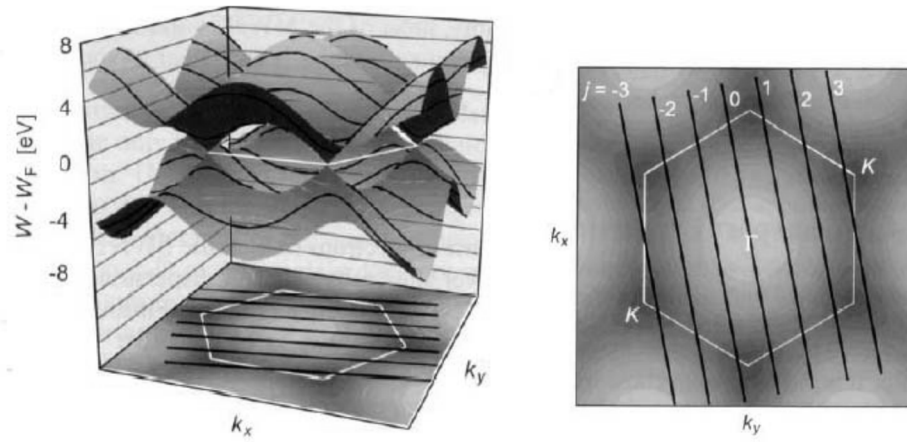
Burada $c_1 = \mu$ ye karşılık gelir böylece

$$\vec{k} = \mu \vec{K}_1 + \vec{K}_2 / |\vec{K}_2| k \quad \left(-\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T} \right) \quad (2.23)$$

olur. Bu durumda iki boyutlu grafenin enerji dispersiyon bağıntısına bağlı olarak, bir boyutlu TDKNT'ün enerji dispersiyon bağıntısı

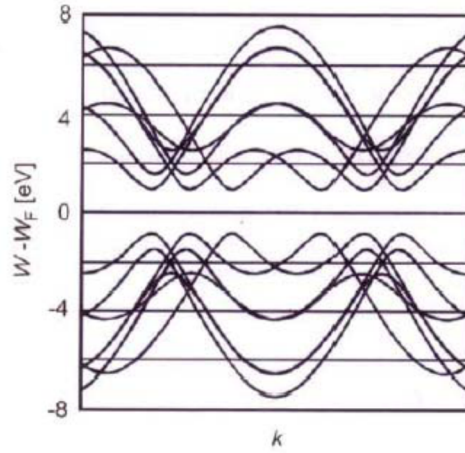
$$E_\mu(k) = E_{g2D}^\pm \left(\mu \vec{K}_1 + \frac{\vec{K}_2}{|\vec{K}_2|} k \right) \quad \left(-\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T} \right) \quad (2.24)$$

olarak bulunur [34].



Şekil 2. 6 İki Boyutlu grafen ters örgüsü. Siyah çizgiler, birinci Brillouin içine katlanmış, $\vec{K}_1$ doğrultusundaki kesitleri göstermektedir [35]

Denklem 2.24 da verilen N parça enerji dispersiyon bağıntısı, Şekil 2. 6 da gösterilen grafenin iki boyutlu dispersiyon yüzeyi üzerinde $\mu \vec{K}_1 + \vec{K}_2 / |\vec{K}_2| k$ den geçen çizgilere yerleşmiş olan kesitlere karşılık gelir. Eğer belirli bir (n, m) TDKNT için, WW' çizgileri ile ifade edilen KNT enerji dispersiyon eğrileri, grafenin π ve π^* bantlarının simetrik ve dejenere olduğu K simetri noktası üzerinden geçerlerse, durum yoğunluğu Fermi seviyesinde belirli bir değere sahip olur ve sıfır enerji bant aralığına sahip olurlar. Bu durumda KNT metalik özellik gösterir. Eğer kesikli çizgiler, K simetri noktasının üzerinden geçmezlerse, bu KNT'ler belirli bir enerji bant aralığına sahip yarı iletken özellik gösterirler (Şekil 2. 7).



Şekil 2. 7 (4,2) TDKNT'ün bir boyutlu enerji bantları. Her bant, grafenin birinci Brillouin bölgesi içerisine katlanmış N tane kesiti göstermektedir [35].

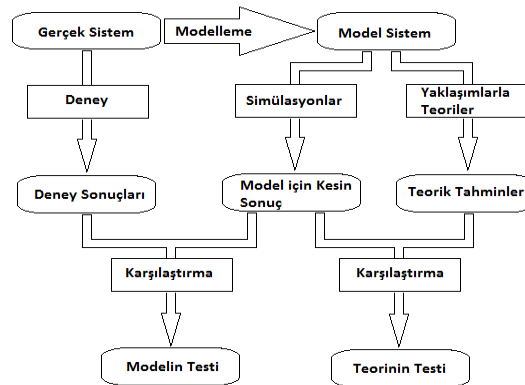
Eğer, Şekil 2. 5 de gösterilen Γ ile K simetri noktaları arasındaki mesafe olan $\overrightarrow{YK}$ vektörünün boyu ile $\overrightarrow{K_1}$ vektörünün boyları arasındaki oran sabit ise bu durumda TDKNT metalik özellik gösterecektir. $\overrightarrow{YK}$ Vektörünün boyu;

$$|\overrightarrow{YK}| = \frac{2n+m}{3} \overrightarrow{K_1} \quad (2.25)$$

olarak verilir. Bu durumda $2n + m$ değeri 3'ün katı olan TDKNT'ler metalik özellik göstereceklerdir. Armchair (n, n) TDKNT'ler için $2n + m$ değeri her zaman 3'ün katı olacağından armchair TDKNT'ler metalik özellik gösterirler. Zigzag $(n, 0)$ TDKNT'lerde ise n sayısı 3'ün katı olması durumunda $2n + m$ değerinin 3'ün katı olması şartı sağlanacaktır ve metalik özellik göstereceklerdir. n sayısı 3'ün katı olamayan zigzag TDKNT'ler yarı iletken göstereceklerdir.

YÖNTEM VE TEORİK BİLGİLER**3.1 Simülasyon Yöntemi**

Bir bilimsel çalışma, gözlem araçlarından ve kontrollü deneylerden elde edilen gözlemlere ve bu gözlemlerden matematiksel araçlar kullanılarak elde edilen hipotez ve teorilere dayanır. Teoriler, matematiksel kısıtlardan ötürü, analitik ve nümerik yaklaşımlar içerirler. Bu yaklaşımlar, teori ile gerçek dünya arasına mesafe koyar. Bir teorinin testi için kullanılan gerçek deneyler, teorinin içermediği kontrol edilmesi olanaksız olabilecek parametreler barındırırlar. Simülasyonlar teorik temeller üstüne otururlar fakat teorinin kullanıldığı yaklaşımlar yerine daha ayrıntılı hesaplamalara dayanan yaklaşımlar kullanır. Simülasyonlar, sanal deneylerdir ve gerçek bir durumu temsil için kurulan modelle teori ve modelle deney arasında bir köprüdür (Şekil 3. 1) [36]. Simülasyonlar, bir sistemin mikroskobik özelliklerinden, makroskobik özelliklerine geçişi sağlar.



Şekil 3. 1Deney, teori ve bilgisayar simülasyonları arasındaki bağlantı.

3.1.1 Moleküler Dinamik (MD)

Moleküler dinamik (MD) simülasyonları, çok parçacık sistemlerinin denge ve geçiş özelliklerini klasik mekanik yasalarına uygun olarak hesaplamakta kullanılan bir yöntemidir. Sistemin mikroskobik özelliklerinden başlayarak, Hamiltonien, Lagrangian veya doğrudan Newton hareket denklemlerinin ya da kuantum mekanik sistemlerde, Schrödinger denkleminin kullanılması ile iyi belirlenmesidir.

$$m_i \ddot{r}_i = f_i = \sum_j^N f_{ij} = -\nabla_i U_{ij} \quad (3.1)$$

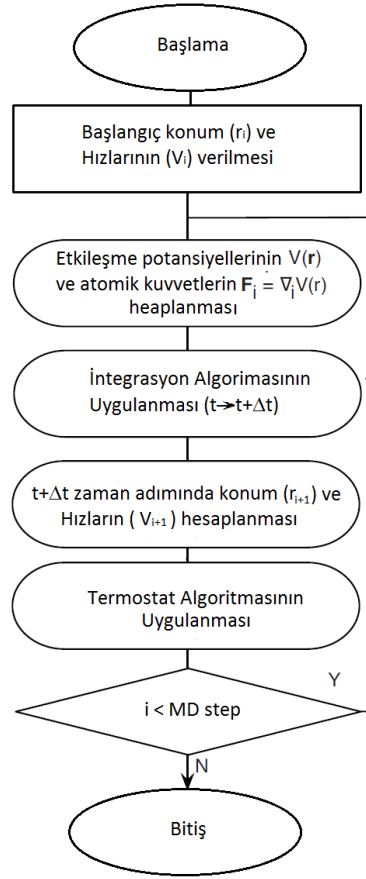
Bir MD simülasyonunda, gerçek deneylere benzer şekilde öncelikler bir örnek hazırlanır. Bu N parçacık sistemini tarifleyen bir model seçilir ve sistemin özellikleri (Örn. Toplam enerji) zamana bağlı olarak değişim göstermeyene kadar Newton hareket denklemleri çözülür (dengeleme). Dengeleme işleminden sonra sistem üzerine asıl uygulanmak istenilen etkiler uygulanır ve bu etkilerin meydana getirdiği değişimler gözlemlenir. Bir etkinin ve değişimin gözlenebilmesi için bu değişkenin, atomik konumların ve momentumun bir fonksiyonu olarak ifade edilebilmesi gereklidir [37].

MD simülasyonları, bir N parçacık sisteminin mikroskobik özelliklerinden başlayarak makroskobik özelliklerini incelemeyi hedeflemektedir. Simülasyonlarda, gerçek bir sistem ($N \sim 10^{23}$) incelemek yerine gerçek sistem ile benzer sonuçları verebilecek olan daha küçük sistemlerle ($N \sim 10^3$) çalışılır. Fakat küçük sistemlerde yüzey etkileri baskın hale gelmektedir. Yüzey etkileri problemi, “periyodik sınır koşulları (PSK)” kullanılması ile ortadan kaldırılabilir.

Bir MD simülasyonun öncelikle sistemin başlangıç konum ve hızları verilir. Başlangıç konum ve hızları Maxwell- Boltzmann dağılımlarını uyar (Denklem 3.3).

$$D(v)dv \propto v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right) dv \quad (3.2)$$

Daha sonra etkileşim potansiyelleri ve bu potansiyeller kullanılarak parçacıklara etkiyen kuvvetler hesaplanır. Newton hareket yasalarına uygun olarak parçacıkların ivmeleri hesaplanır. Uygun bir integrasyon algoritmaları kullanılarak parçacıkların $t + \Delta t$ adımıdaki konum ve hızları hesaplanır (Şekil 3. 2).



Şekil 3. 2 MD akış şeması.

MD de en çok kullanılan zaman birleştirme (integrasyon) algoritması, verlet algoritmasıdır. Algoritma, zamana bağlı olarak ileri ve geri yönlü konumları üçüncü derece Taylor serisine açmakla başlar.

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + \dots \quad (3.3)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + \dots \quad (3.4)$$

İki eşitliğin toplanması ile

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.5)$$

bulunur. Bu eşitlik, 'Verlet algoritmasının' temel formudur. Konumlar kullanılarak hızlar da türetilir.

$$v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.6)$$

Fakat burada hata Δt^2 mertebesinde. Bu problemi aşmak için 'velocity verlet' algoritması kullanılırsa $(t + \Delta t)$ zamanı için konumlar ve hızlar;

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) + \dots \quad (3.7)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)] \quad (3.8)$$

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}_{tot,i}(t)}{m} \quad (3.9)$$

İvme yardımıyla yeni konumlar bulunur. Bu yeni ivmeleri bulmak için, yeni konumlara uyan atomlara etkiyen kuvvetler tekrar hesaplanır. En son olarak yeni hızlar hesaplanır.

$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = \frac{\vec{F}_{tot,i}(t + \Delta t)}{m} \quad (3.10)$$

Bu işlemler her bir MD adımı için gerçekleştirilir. Böylece her bir MD adımın ifade ettiği zaman dilimi için sistem ötelenmiş edilmiş olur.

Burada, kesikli bir t_i zamanındaki konumlar $r_i(t_i)$ ve hızların $(v_i(t_i))$ dizilimi, sürekli zaman yörüngesi yerine geçer. Konumlara ve hızlara bağlı bir gözlemlenebilirin $(A(r(t), p(t)))$ zaman ortalaması küme ortalamasına eşit olur.

$$\overline{A_{\Delta t}} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} A(t) dt = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} A(r(t), p(t)) dt \cong \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M A(t_m) \quad (3.11)$$

Bu zaman ortalaması ergodik teoriye uygun olarak istatistik mekanik ile bağlantı kurar. MD simülasyonlarında incelenen N parçacıklı sistemler, istatistiksel küme oluştururlar. Çalışmamızda "kanonik küme" kullanılmıştır. Burada, parçacık sayısı (N), hacim (V) ve sıcaklık (T) sabit tutulur ve toplam lineer momentum sıfırdır. Sıcaklığı sabit tutulması gereklidir ve bunun için kullanılacak yöntem, enerji korunumu olmadığından sistemin enerji dalgalanmalarına izin verecek şekilde tasarlanmalıdır. Toplam enerji korunmaz fakat ortalama kinetik enerji, yalnız sıcaklığa bağlı olduğundan (Denklem 3.12) bir hareket sabitidir ve sabit kalır (izokinetik MD).

$$\overline{E_k} = \frac{3}{2} k_b T \quad (3.12)$$

Sabit sıcaklık için enerji dalgalanmalarını sağlamanın bir yolu hareket denklemlerine bir kısıtlama denklemi eklemektir. Doğal olarak kısıt için kinetik enerji simülasyon seyri

boyunca, verilen bir değerde sabitlenir. Bu izokinetik yaklaşımda sadece ortalama sıcaklık sabittir ve;

$$\Lambda = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2 = \text{sabit} \quad (3.13)$$

olarak ifade edilir. Hızların ölçeklendirilmesi için uygun bir 'ölçeklendirme faktörü' belirlenmelidir. Sistem 3N serbestlik derecesine sahiptir ve toplam lineer momentum sıfırdır. Sabit kinetik enerji kısıtlaması birçok serbestlik derecesini taşır. Sonuç olarak ölçeklendirme faktörü;

$$\beta = \left[(3N - 4) k_B T_{ref} / \sum_i m v_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.14)$$

şeklinde verilir. Bu ölçeklendirme faktörünün kullanılması ($v_i^{n+1} \leftarrow v_i^{n+1} \beta$) ile ortalama kinetik enerji korunacak ve böylece sıcaklık sabit tutulacaktır.

3.1.2 Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Formalizmi

Bir MD çalışması esnasında, atomları hareket ettiren atomlar arası kuvvetlerin ($\vec{F}_\alpha$) hesaplanması gerekmektedir. Bu kuvvetler SBMD hamiltoniyenden bulunurlar. SBMD kovalent sistemlerin dinamik yapısal ve elektronik özelliklerini incelemek için kullanılır. Sonlu sıcaklıklı yarı ampirik SB yaklaşımli MD simülasyonlarında kullanılır. Sıcaklık basınç gibi değişik koşullardaki (uç termodinamik koşullarda dâhil) simülasyonunda kullanılabilir. Atomlar arası etkileşimler hesaba katılır. Klasik SBMD, Schrödinger denklemini direkt matris diyagonalizasyonu ile çözer ve atom sayısının (N) küpü ile orantılı simülasyon zamanı kullanır ($O(N^3)$).

Valans elektronları ve iyonlardan oluşan sistemin toplam hamiltoniyeni

$$H_{top} = T_i + T_e + U_{ii} + U_{ee} + U_{ie} \quad (3.15)$$

şeklinde [39-41]. Burada T_i iyonların kinetik enerjisi, T_e elektronların kinetik enerjisi, U_{ii}, U_{ee}, U_{ie} iyon-iyon, elektron-elektron ve iyon-elektron etkileşmelerinin potansiyel terimleridir.

Bu çok parçacık hamiltonyeninin kesin çözümünü bulmak oldukça zordur. Bu hamiltonyen terimini başka elektronların ve iyonların oluşturduğu ortalama bir potansiyel alanında hareket eden tek parçacık problemine indirgeyerek çözebiliriz.

$$h|\Psi_n\rangle = \varepsilon_n|\Psi_n\rangle \quad (3.16)$$

$$h = T + U_{ee} + U_{ie} \quad (3.17)$$

h ; tek parçacık homiltonyeni

$|\Psi_n\rangle$; sistemin n. durum öz fonksiyonu

ε_n ; n. durum enerji öz değeri

bu tek parçacık hamiltonyen denkleminin tam çözümünü bulmak için yaklaşıklıklar yapmak gerekir. Bu yaklaşıklık, $|\Psi_n\rangle$ dalga fonksiyonunun atomik orbitallerin lineer kombinasyonu formunda olmasıdır.

İki serbest atom birbirlerine bir kristalin örgü sabiti mertebesinde yaklaşırlarsa atom çekirdekleriyle elektronlar arasındaki Cloumb etkileşmesi nedeniyle enerji düzeyleri ayrışır ve enerji bantları oluşur. Belirli kuantum sayılı enerji düzeyleri kristalde ayrı bir enerji bantı oluşturur. Atomların dalga fonksiyonları orbitallerin dalga fonksiyonları olur. SBMD'de dalga fonksiyonları için LCAO yaklaşımı yapılır;

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{l\alpha} C_{l\alpha}^n |\Phi_{l\alpha}\rangle \quad (3.18)$$

olur. Ayrıca periyodik potansiyeller için (3.19) fonksiyonu;

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) |\Phi_{l\alpha}\rangle \quad (3.19)$$

Block fonksiyonu formundadır.

$C_{l\alpha}^n$; α iyonunun n. durumdaki l orbitalinin katsayısı

$\Phi_{l\alpha}$; birbirine dik olmayan atomların orbitalleri olduğundan dik değildir.

$$\langle \Phi_{l'\beta} | \Phi_{l\alpha} \rangle \neq \delta_{l'l} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.20)$$

Bu durumda genelleştirilmiş seküler denklem;

$$\sum_{l'\beta} \langle \Phi_{l'\beta} | h | \Phi_{l\alpha} \rangle C_{l\alpha}^n = \sum_{l'\beta} \varepsilon_n (\delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} + S_{ll'\alpha\beta}) C_{l\alpha}^n \quad (3.21)$$

olur. Burada $S_{ll'\alpha\beta}$ overlap matrisidir.

$$S_{ll'\alpha\beta} = \langle \Phi_{l'\beta} | \Phi_{l\alpha} \rangle - \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.22)$$

Seküler denklemden;

$$hC^n = \varepsilon_n (S + I)C^n \quad (I : \text{birim matris}) \quad (3.23)$$

çözümü bulunur. S , simülasyon esnasında her MD adımda hesaplanmalıdır. Bu da iş yükünü arttırır. Bundan kurtulmak için ortogonal baz seti kullanılmalıdır. Bu baz seti löwdin orbitalleri olarak adlandırılırlar. Löwdin orbitalleri, ortogonal olmayan baz setinin tüm simetri özelliklerini taşırlar.

$$\langle \varphi_{l'\beta} | \varphi_{l\alpha} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} \quad (\varphi_{l\alpha} : \text{löwdin orbitalleri}) \quad (3.24)$$

löwdin orbitallerinin kullanılmasıyla seküler denklem;

$$\begin{aligned} \sum_{l'\beta} \langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle C_{l\alpha}^n &= \sum_{l'\beta} \varepsilon_n \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta} C_{l\alpha}^n \\ \sum_{l'\beta} (\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle - \varepsilon_n \delta_{ll'} \delta_{\alpha\beta}) C_{l\alpha}^n &= 0 \end{aligned} \quad (3.25)$$

haline dönüşür. Buradan elde edilecek çözüm;

$$hb_n = \varepsilon_n b_n \quad (3.26)$$

formundadır. Seküler denklemde çözülmesi gereken önemli kısım hopping integeralleri olarak adlandırılan $\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle$ matris elemanlarıdır. Bunun için bazı yaklaşımlar yapılması gereklidir. Bu yaklaşımlar şunlardır.

Minimal baz seti seçilir. Hopping integralı $\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle$ atomlar arası mesafeye bağlıdır. Burada belirli bir mesafeye kadar olan etkileşimler alınır. Yani kısa mesafe etkileşimleri alınır. Yalnız çiftli etkileşimler hesaba katılır. Denge durumunda hopping integralleri

$$\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle = h_{l'l}^0 \quad (3.27)$$

alırsak, bu integral eşitliği;

$$h_{l'l}(\vec{R}_{\alpha\beta}) = h_{l'l}^0 f_{l'l}(\vec{R}_{\alpha\beta}) \quad (3.28)$$

biçiminde genelleştirilebilir. Burada $f_{l'l}(\vec{R}_{\alpha\beta})$, $\vec{R}_\alpha$ ve $\vec{R}_\beta$ konumlarında bulunan atomlardaki l ve l' orbitalleri arasındaki çift merkez SB matris elemanlarının ölçeklendirme “scalling” fonksiyonu olarak bilinirler [44-46]. $\vec{R}^{(0)}$ atomların denge durumundaki konumları olmak üzere $f_{l'l}(\vec{R}^{(0)}) = 1$ dir. Bu durumda ölçeklendirme fonksiyonu;

$$f_{l'l}(\vec{R}_{\alpha\beta}) = \left(\frac{\vec{R}^{(0)}}{\vec{R}_{\alpha\beta}} \right)^2 \quad (3.29)$$

olarak bulunur. Seküler denklemin, çözülmesiyle tek parçacık enerjisi bulunmuş olur. Böylece iyonlardan ve valans elektronlarından oluşan toplam sistemin potansiyel enerjisi;

$$E_{top} = U_{ie} + U_{ii} + U_{ee} = 2 \sum_{k,n} f_{FD}[\varepsilon_n, T] \varepsilon_n + U_{ii} - U_{ee} \quad (3.30)$$

olarak yazılabilir. $f_{FD}(\varepsilon_n, T)$, fermi-dirac dağılım fonksiyonudur. $-U_{ii}$ terimi, denklemin birinci kısmındaki elektron – elektron etkileşmesinin sonucu olarak gelir. Toplam sembollü kısım (birinci kısım), bant yapısı enerjisidir.

$$E_{bs} = 2 \sum_{k,n} f(\varepsilon_n, T) \varepsilon_n \quad (3.31)$$

Burada ki 2 katsayısı spin dejenerasyonundan kaynaklanmaktadır.

Toplam potansiyel enerji denklemindeki ikinci kısım ise kısa mesafe itici (repulsive) potansiyeldir.

$$U_{rep} = U_{ii} - U_{ee} \quad (3.32)$$

İtici potansiyel iki cisim potansiyellerinin toplamı olarak yazılabilir [39,41].

$$U_{rep} = U_{ii} - U_{ee} = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \Phi(R_{\alpha\beta}) \quad (3.33)$$

Toplam enerji, bant yapısı enerjisi ve itici potansiyel enerji terimlerinin toplamıdır.

$$E_{top} = E_{bs} + U_{rep} \quad (3.34)$$

Atomları hareket ettiren atomlar arası kuvvetler ($\vec{F}_\alpha$), SBMD hamiltonyenden bulunurlar.

$$H = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2m_\alpha} + 2 \sum_n \varepsilon_n f_{FD}(\varepsilon_n, T) + U_{rep} \quad (3.35)$$

$$\vec{F}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial \vec{R}_\alpha} = -\frac{\partial}{\partial \vec{R}_\alpha} 2 \sum_n \varepsilon_n f(\varepsilon_n, T) - \frac{\partial U_{rep}}{\partial \vec{R}_\alpha}$$

$$\vec{F}_\alpha = - \sum_n \underbrace{\langle \psi_n | \frac{\partial h}{\partial \vec{R}_\alpha} | \psi_n \rangle f(\varepsilon_n, T)}_{\text{çekici kuvvetler}} - \underbrace{\frac{\partial U_{rep}}{\partial \vec{R}_\alpha}}_{\text{itici kuvvetler}} \quad (3.36)$$

Çekici (attractive) kuvvet terimi, toplam kuvvetlere ‘Hellmann – Feynman katkısı’ olarak adlandırılırlar. Bu katkının hesaplanması için denge konumlarında bulunmayan atomlar arasındaki SB matris elemanlarının hesaplanması gerekmektedir.

$$\sum_n \langle \psi_n | \frac{\partial h}{\partial \vec{R}_\alpha} | \psi_n \rangle f(\varepsilon_n, T) = \sum_n f(\varepsilon_n, T) \sum_{l\alpha} \sum_{l'\beta} C_{l'\beta}^n \frac{\partial h_{ll'\alpha\beta}(\vec{R}_{\alpha\beta})}{\partial \vec{R}_\alpha} C_{l\alpha}^n \quad (3.37)$$

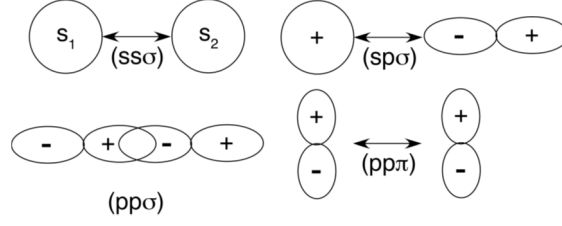
SB yönteminde “hopping integralleri” olarak adlandırılan ve atomik bağlı mesafelerin analitik fonksiyonları olan bu matris elemanlarının hesaplanabilmesi için bir ölçeklemeye (scaling) ihtiyaç vardır. Bu ölçekleme fonksiyonu için kullanılan model GSP (Goodwin – Skinner –Pettifor) modelidir [42].

$$h_{ll'}(R) = h_{ll'}(R^0) * scale_{ll'}(R)$$

$$scale_{ll'}(R) = \left(\frac{R^0}{R}\right)^n \exp \left\{ n \left[-\left(\frac{R}{R^c}\right)^{nc} + \left(\frac{R^0}{R^c}\right)^{nc} \right] \right\} \quad (3.38)$$

Seçilen minimal baz seti olan sp^3 baz seti için 4 bağ yapma geometrisi (Şekil 3. 3) ve buna bağlı olarak 4 sıfırdan farklı “hopping” integrali vardır($ss\sigma, sp\sigma, pp\sigma, pp\pi$).

$$h_{ll'}(R) = \begin{Bmatrix} \langle s_1 | h | s_2 \rangle \\ \langle s_1 | h | p_{2\parallel} \rangle \\ \langle p_{1\parallel} | h | p_{2\parallel} \rangle \\ \langle p_{1\perp} | h | p_{2\perp} \rangle \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} h_{ss\sigma}(R^0) * scale_{ss\sigma}(R) \\ h_{sp\sigma}(R^0) * scale_{sp\sigma}(R) \\ h_{pp\sigma}(R^0) * scale_{pp\sigma}(R) \\ h_{pp\pi}(R^0) * scale_{pp\pi}(R) \end{Bmatrix} \quad (3.39)$$



Şekil 3. 3 C atomlarının hibritleşmesi sonucu meydana gelen σ ve π bağları

Toplam kuvvetlere itici kuvvetlerin katkısı, itici potansiyel enerjinin türevi ile hesaplanır.

$$F_i^x = -\frac{\partial U_{rep}}{\partial r} \quad (3.40)$$

İti potansiyel enerji, i ve j atomları arasındaki çiftli potansiyellerin ($\phi(r_{ij})$) fonksiyoneli olarak verilir [47].

$$U_{rep} = \sum_i f(\sum_j \phi(r_{ij})) \quad (3.41)$$

$f(x)$ fonksiyoneli, 4. derece bir polinomdur.

$$f(x) = C_0 + C_1x + C_2x^2 + C_3x^3 + C_4x^4 \quad (3.42)$$

Çiftli potansiyeller, GSP modeli ile ifade edilir. Bu etkileşmeler için kullanılan parametre seti Xu vd. [42] 'den alınmıştır.

3.1.3 N Mertebe Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi ($O(N)$ SBMD)

Klasik SB metodu, Schrödinger denklemini ters uzayda, Hamiltonyen matrisin direkt köşegenleştirilmesi ile çözer. Bu çözüm için atom sayısının (N) küpü ile orantılı bir simülasyon zamanı gerektirir ($O(N^3)$). Bu nedenle, SB metodunu büyük sistemleri uzun simülasyon adımları için çözmek mümkün olmamaktadır. Atom sayısı ile doğrusal değişen simülasyon zamanı kullanan algoritmaların ($O(N)$) kullanılması ile daha büyük sistemlerin daha uzun simülasyon adımlarında incelenmesi mümkün olacaktır. $O(N)$ metodları bant enerjisini gerçek uzayda çözerler ve her bir atomun bant enerjisine ve bağlanmalara yalnızca yerel etkilerin katkı yaptığı yaklaşımını yaparlar [44,45]. Birçok $O(N)$ algoritması geliştirilmiştir. Bu çalışmada, "Divide and Conquer (DAC)" yaklaşımı [46] kullanılmıştır. Bu yaklaşımın temel fikri, büyük bir sistemin tam bir tanımı, sistemi oluşturan temel parçalarının (kimyasal bağlar, fonksiyonel gruplar vb.) terimleri

üzerinden yapılabilmesidir. Tüm sistemin yük dağılımını, alt sistemlerden gelen katkılara bağlı olarak tanımlar ve her alt sistem kendi tampon bölgesine (buffer region) sahiptir. Bant yapısı enerjisi (E_{BS}), tek elektron etkin Hamiltonyeni ($\hat{H}$) öz değerleri (ϵ_i) ve Fermi – Dirac Dağılımına ($F(\epsilon_i)$) bağlı olarak

$$E_{BS} = 2 \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = 2 \sum_i^{N_b} F(\epsilon_i) \epsilon_i \quad (3.43)$$

olarak ifade edilir [51].

$$F(\epsilon_i) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{\epsilon_i - \mu}{kT})} \quad (3.44)$$

Bu yöntemle göre, sistem öncelikle birçok alt sistemlere bölünür. Sırayla her bir alt sistemin elektron yoğunluğu hesaplanır ve tüm alt sistemler üzerinden toplam alınır. Her bir alt sistem atomik orbitaller yerine yerel baz fonksiyonları ile ifade edilmektedir.

$$H^\alpha C_i^\alpha = S^\alpha C_i^\alpha \epsilon_i^\alpha \quad \alpha: \text{Alt sistem} \quad (3.45)$$

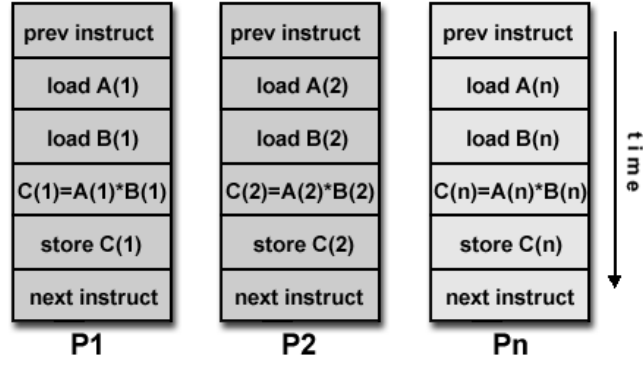
$$\rho_\alpha^{\mu\nu} = 2P_\alpha^{\mu\nu} \sum_i^{N_\alpha} F(\epsilon_i^\alpha) C_{\mu i}^\alpha C_{i\nu}^\alpha \quad (3.46)$$

$$E_{BS} = \sum_{\mu\nu}^{N_b} \rho_\alpha^{\mu\nu} H_{\mu i}^\alpha \quad (3.47)$$

Sistemin toplam enerjisi, denklem 3.30 ile aynı yapıdadır. Her bir alt sistemin Fermi – Dirac dağılım fonksiyonunda kullanılan kimyasal potansiyelin değerinin uygun bir şekilde belirlenmesi önemlidir [44-46]. Kimyasal potansiyelin uygun değeri sistemin Fermi enerji seviyesidir.

3.1.4 Paralleleştirme Yöntemi ve Algoritmaları

SB hesaplamaları, $O(N)$ yaklaşımları kullanılarak daha büyük sistemlerin makul zaman dilimleri içerisinde hesaplanabilmesini sağlar. Paralel algoritmaların kullanılması da bu performansı artırır. Ayrıca $O(N)$ algoritmaları paralelleştirme için uygun algoritmalarıdır. Çalışmada kullanılan simülasyon programı, Prof. Dr. Gülay DERELİ vd. [25-27, 44] tarafından Fortran 77 programlama dili kullanılarak hazırlanmıştır. Program, SIMD “Single Instruction Multiple Data” taksonomisine uygun olarak hazırlanmıştır.



Şekil 3. 4 SIMD taksonomisi

Sadece bant enerjisini hesaplamaları ve kuvvet hesaplamaları paralelleştirilmiştir. Böylece hesaplama düğümleri arasındaki gereksiz haberleşmelere izin verilmemiştir. Paralel hesaplama modeli olarak dağıtık hafızalı mesaj geçme modeli kullanılmıştır. Mesaj geçme modeli uygulaması olarak PVM (Parallel Virtual Machine) kütüphanesi kullanılmıştır.

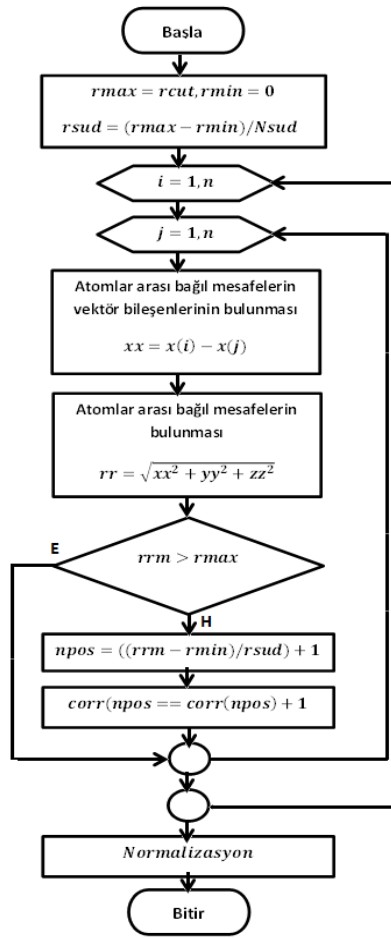
Veri bölümlleme algoritması olarak, RD (Replicated Data) ve DD (Domain Decomposition) algoritmaları kullanılmıştır. RD algoritması, atomik koordinatların tüm hesaplama düğümlerine gönderilmesi için kullanılmıştır. DD algoritması ise, simülasyon kutusunun eşit büyüklükte kübik alt kutulara bölünmesinde ve her bir hesaplama düğümüne ait alt kutu olarak atanmasında kullanılmıştır.

Simülayonlar, 2003 yılında Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından kurulan Y.T.Ü Karbon Nanotüp Simülasyon laboratuvarında tasarlanmış olduğumuz “star” ağ topolojisine sahip Linux Hesaplama Kümesinde (Cluster) gerçekleştirilmiştir.

3.2 TDKNT’lerin Özelliklerinin Hesaplanması

3.2.1 TDKNT’lerin Fiziksel Özelliklerin Hesaplanması

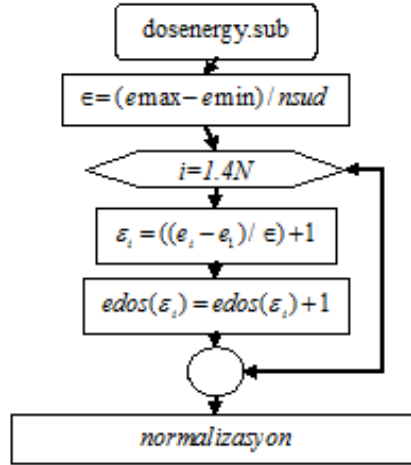
Çalışmada, sıcaklık, gerinim, boşluk ve burulma deformasyonları etkisindeki TDKNT’lerin Radyal dağılım fonksiyonları (RDF), bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları (BUDF) ve bağ açısı dağılım fonksiyonları (BADF) ve atomik koordinasyon sayısı (AKS) incelenmiştir.



Şekil 3. 5 Radyal dağılım fonksiyonu (RDF) akış diyagramı

3.2.2 TDKNT'lerin Elektronik Özelliklerinin Hesaplanması

Kullanılan programda, TDKNT'lerin elektronik durum yoğunlukları (DOS), SBMD simülasyon yöntemi kullanılarak hesaplanan elektronik enerji özdeğerlerinin sayı yoğunluğu şeklindedir. Elektronların en büyük enerji değeri ile en küçük enerji değeri arasındaki bölge, önceden belirlenmiş parametreler mertebesinde parçalara ayrılır. Her parça, etiketlenir ve elektronların, bu etiket ile belirlenmiş enerji aralığında bulunanlarının sayı yoğunluğu tespit edilerek, elektronların enerji spektrumunun dağılımı elde edilir. Bu dağılım uygun şekilde normalize edilerek elektronik durum yoğunluğu hesaplanır.



Şekil 3. 6 Elektronik durum yoğunluğu (eDOS) akış diyagramı

Böylece, durum yoğunluğu;

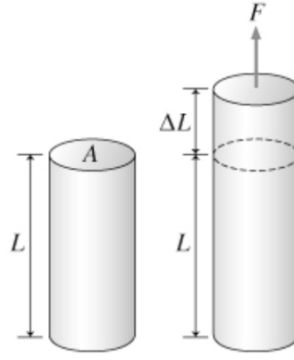
$$D(\varepsilon_i) = \frac{n_i(\varepsilon_i)}{\sum_{i=1}^{4N} n_i(\varepsilon_i)} \quad (3.48)$$

ile hesaplanır. Burada, $n_i(\varepsilon_i)$, ε_i enerji etiketine sahip elektronların sayısıdır. ε_i , $i \in$ genişlikli enerji aralığını temsil eden enerji etiketidir.

3.3 Mekanik Deformasyonların Tanımlanması

3.3.1 Gerinim Deformasyonları

Temel esneklik teorisine göre gerinim, uygulanan bir kuvvet sonucunda cismin parçacıklarının referans uzunluğa göre yer değiştirmeleri sonucu meydana gelen deformasyonların ölçüsüdür. Deformasyonların türüne, şekline ve miktarına bağlı olarak, bu tür deformasyonlar, üç temel teoride toplanmıştır; büyük gerinim teorisi, küçük gerinim teorisi ve büyük dönme teorisi.

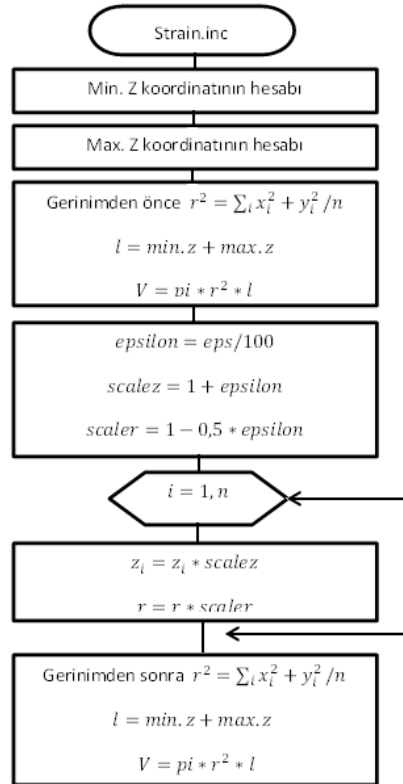


Şekil 3. 7 Normal gerinim

Çalışmada, “Cauchy gerinimi” yada “normal gerinim” kullanılmıştır. Normal gerinim, kuvvet altında cismin boyunda meydana gelen değişim olarak tariflenir.

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (3.49)$$

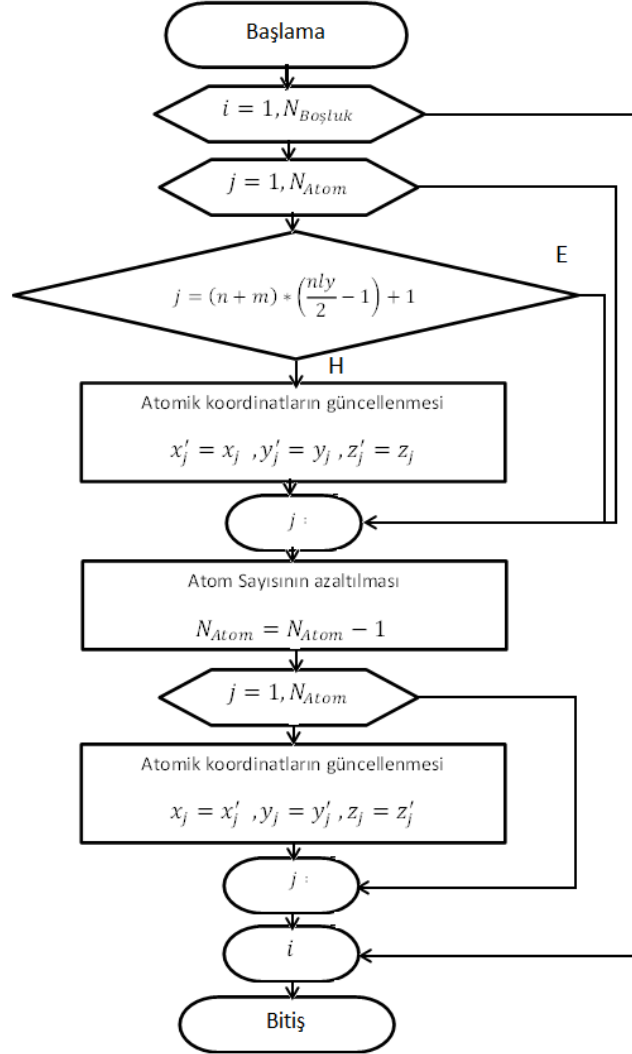
l_0 , malzemenin gerinimden önceki boyu, l ise gerinim uygulandıktan sonraki boyudur. Malzeme gerilmiş ise normal gerinim pozitif değer alır. Eğer malzeme sıkıştırılmış ise normal gerinim negatif değer alır.



Şekil 3. 8 Gerinim alt programı akış diyagramı.

3.3.2 Boşluk Deformasyonları

O(N) SBMD kodu, KNT lerde bir veya daha fazla boşluk oluşturabilecek şekilde geliştirildi. Boşluklar, KNT eksen doğrultusunda KNT ün orta noktasına gelen bölgede, KNT eksenine dik olacak şekilde oluşturulması planlandı. Koda, KNT üzerinde istenilen sayıda boşluk oluşturacak içerik dosyası dahil edildi (vacancy.inc). KNT üzerinde boşluk oluşturma alt programının akışı Şekil 3.9 daki gibidir.



Şekil 3. 9 Boşluk oluşturma alt programı akış diyagramı.

3.3.3 Burulma Deformasyonları

Mekanik olarak, belirli bir kesit alana ve sabit duvar kalınlığına sahip silindire uygulanan tork (T) sonucunda oluşan burulma ifadesi;

$$T = GJ \frac{\theta}{L} \quad (3.50)$$

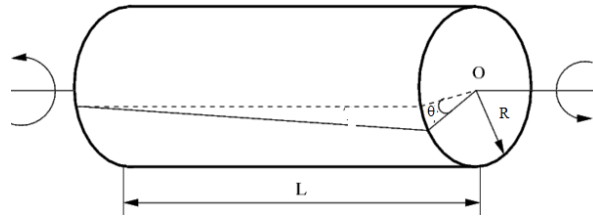
ile verilir. Burada

T : uygulanan tork

GJ : Burulma sertliği

θ : Burulma açısı

L : Silindir boyu



Şekil 3. 10 Burulma

SİMÜLASYON SONUÇLARI

Çalışmada, sıcaklık, düşük ve yüksek sıcaklıklarda gerinim, boşluk ve burulma deformasyonlarının zigzag TDKNT'lerin elektronik özelliklerine etkisi incelenmiştir. Zigzag TDKNT'ler kiralite vektörünün indislerine bağlı olarak $(n, 0)$ ile ifade edilirler. TDKNT'ler, n indisine bağlı olarak üç sınıfta toplanmıştır: $n \equiv 0(mod 3)$, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ TDKNT'ler. Elektronik özellikleri bakımından indisi 3'ün katı olan ($n \equiv 0(mod 3)$) zigzag TDKNT'ler metalik özellik gösterirken diğer tür zigzag TDKNT'ler ($n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$) yarı iletken özellik gösterirler. Çalışmada, (10,0), (12,0), (13,0), (14,0) ve (15,0) TDKNT'ler kullanılmıştır (Çizelge 4.1). Bu KNT'lerin seçimi $n \equiv 0(mod 3)$, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ sınıflandırmasına uygun olacak şekilde yapılmıştır. Seçilen TDKNT'lerin boy/çap oranları birbirlerine yakındır.

Çizelge 4.1 TDKNT'lerin sınıflandırılması

	$n \equiv 0(mod 3)$	$n \equiv 1(mod 3)$	$n \equiv 2(mod 3)$
(n, m)	(12,0), (15,0)	(10,0), (13,0)	(14,0)

Simülasyonlar, deformasyonlara, bağlı olarak iki aşamada gerçekleştirilmiştir. Birinci aşamada TDKNT'ler belirlenen şartlarda denge durumuna getirilmiştir. Değişik MD adım çalışmaları yapılmış 3000MD adımıyla sistemin denge durumuna geldiği saptanmıştır. Bu süreç için 3000 MD adımı kullanılmıştır. Her bir MD adımı, $1fs$ simülasyon süresine karşılık gelmektedir. Simülasyonlarda, periyodik sınır koşulları (PSK), TDKNT eksen doğrultusunda uygulanmıştır (z eksen). Bütün TDKNT'ler 20

katman olarak alınmışlardır. Kullanılan TDKNT'lerin $T=300K$ sıcaklığında dengelenmiş haldeki yarıçapları (r), ortalama boyları (l) ve atom sayıları (N) Çizelge 4. 2' de listelenmiştir.

Çizelge 4.2 TDKNT'lerin simülasyon sonucunda edilen fiziksel parametreleri

(n, m)	(10,0)	(12,0)	(13,0)	(14,0)	(15,0)
$r(\text{\AA})$	3,93	4,71	5,09	5,49	5,88
$l(\text{\AA})$	19,88	19,88	19,88	19,88	19,88
$r(\text{\AA})/l(\text{\AA})$	0,39	0,47	0,51	0,55	0,59
N	200	240	260	280	300

Simülasyonlarda sıcaklık izokinetik yaklaşım kullanılarak sabit tutulmuştur. Potansiyel kesme mesafesi ($r_{cut} = 2,6\text{\AA}$) olarak alınmıştır. $O(N)$ Algoritmasında kullanılan alt sistemlerin tampon bölgesi büyüklükleri ("Buffer skin size") Çizelge 4. 3' de verilmiştir.

Çizelge 4.3 TDKNT'lerin "Buffer Size" parametreleri

(n, m)	(10,0)	(12,0)	(13,0)	(14,0)	(15,0)
Buffer Size ($\text{\AA}$)	4,3	4,5	4,6	4,5	4,8

Deformasyon etkisi altındaki TDKNT'lerin atom başına toplam enerjilerinin (E_{top}) zamana (MD adımı) bağlı olarak değişimleri grafiklerle incelenmiştir. Simülasyonlar, MD adıma bağlı olarak enerji dalgalanmalarının kararlı olduğu zamana kadar devam ettirilmiştir. Bu grafiklerden, toplam enerjinin zaman ortalamaları hesaplanarak, deformasyonlara bağlı olarak atom başına ortalama toplam enerjileri hesaplanmıştır. Deformasyonlara bağlı olarak fermi enerji seviyeleri (E_f) ve elektronik durum yoğunlukları (DOS) belirlenmiştir.

$$g(\varepsilon) = \sum \delta(\varepsilon - \epsilon), N = \int g(\varepsilon) d\varepsilon \Rightarrow g(\varepsilon) = \frac{d}{d\varepsilon} N(\varepsilon) = \frac{N(\varepsilon - \epsilon) - N(\epsilon)}{\epsilon}$$

$$N(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{N_{cell}} \sum_{j=1}^{4N_{at}} \frac{2}{1 + f((E - \varepsilon_i)/k_B T)} * \sum_{j=1}^{4N_{at}} |H(j, i)|^2 \quad (4.1)$$

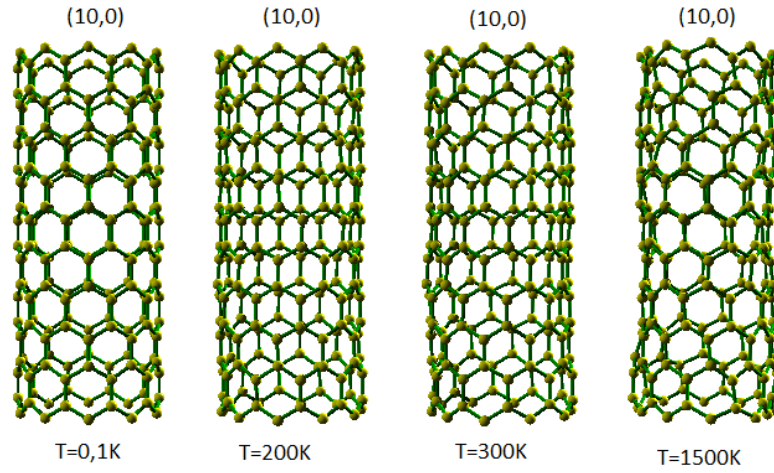
Elektronik durum yoğunlukları (*DOS*) grafikleri histogram olarak verilmiştir. *DOS* grafiklerinin enerji (E) eksen, Fermi enerji seviyesi 0 değerine gelecek şekilde kaydırılmıştır. TDKNT'lerin fiziksel özellikleri, radyal dağılım fonksiyonları(RDF), bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları (BUDF), bağ açısı dağılım fonksiyonları (BADF) ve atomik koordinasyon sayısı (AKS) kullanılarak incelenmiştir.

4.1 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda TDKNT'lerin Elektronik ve Fiziksel Yapısı

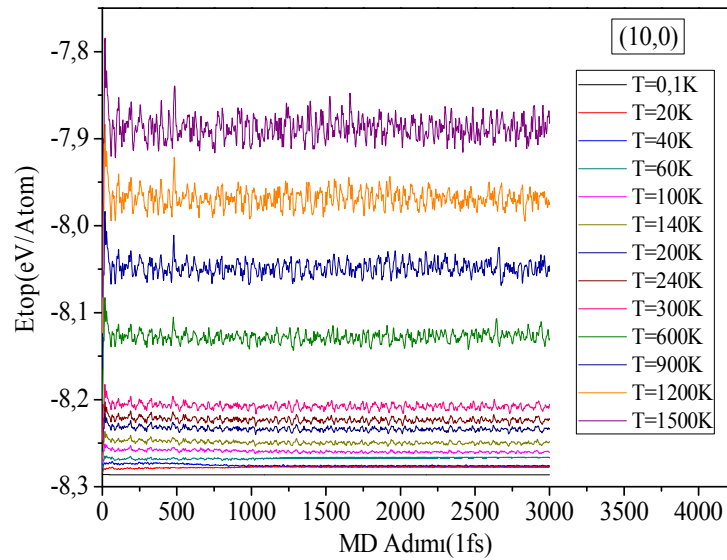
Çalışmada, (10,0) yarıiletken ve (15,0) metalik zigzag TDKNT'lerin toplam enerjilerinin, Fermi enerji seviyelerinin, elektronik durum yoğunluklarının ve buna bağlı olarak enerji bant aralıklarının sıcaklığa bağlı olarak değişimleri incelenmiştir. TDKNT'ler, üzerinde sıcaklık etkisi 0,1K sıcaklık değerinden başlayarak 20K sıcaklık farkları ile 300K sıcaklığına kadar ve 300K den sonra, 300K sıcaklık farkları ile 1500K sıcaklığına kadar çalışılmıştır. Simülasyonlarda TDKNT'ler her sıcaklık değerinde, 3000 MD adımı kullanılarak dengelenmiştir. Bu denge durumlarında, her bir sıcaklık değerinde (10,0) ve (15,0) TDKNT'lerin atom başına toplam enerjileri ve Fermi enerji seviyeleri tespit edilmiştir. Sıcaklığa bağlı olarak toplam enerjilerin ve Fermi enerji seviyelerinin sıcaklığa bağlı olarak değişimleri grafiklerle gösterilmiştir. Ayrıca her sıcaklık değerinde, (10,0) ve (15,0) TDKNT'lerin bant aralıkları hesaplanmıştır (E_g). Enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak değişimi grafiklerle gösterilmiştir. Sıcaklık etkisi altında, TDKNT'lerin fiziksel özelliklerindeki (RDF, BADF, BUDF ve AKS) değişimlerde grafiklerle incelenmiştir.

4.1.1 (10,0) TDKNT

(10,0) Zigzag TDKNT, 0,1K, 20K, 40K, 60K, 100K, 140K, 200K, 240K, 300K, 600K, 900K, 1200K ve 1500K sıcaklıklarda, çalışılmıştır.

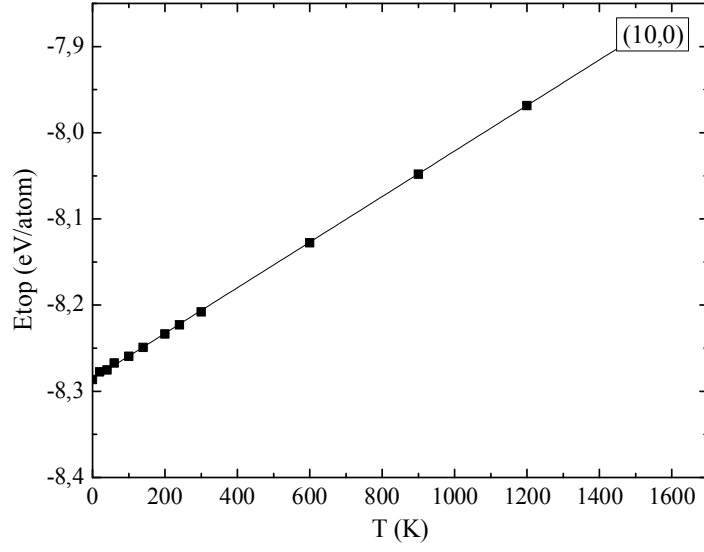


Şekil 4. 1 (10,0) TDKNT'ün değişik sıcaklıklarda simülasyon görüntüleri



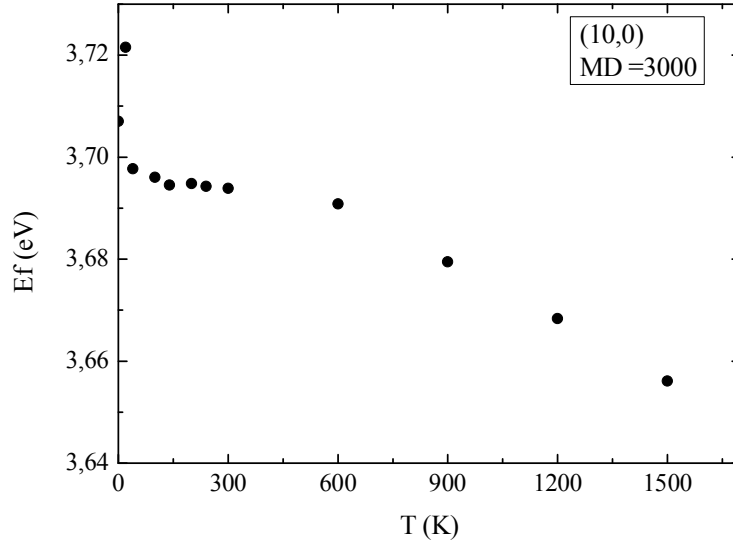
Şekil 4. 2 (10,0) Zigzag TDKNT'ün farklı sıcaklıklarda, toplam enerjinin zamana göre değişimi

Sıcaklık artışı ile MD adımı boyunca toplam enerji dalgalanmalarının genliklerinin arttığı görülmüştür. Bu artış, sıcaklığa bağlı olarak atomlar arasındaki titreşim genliğinin artışından dolayı gerçekleşmektedir. Toplam enerji dalgalanmalarının genliğindeki artışa rağmen 1500K sıcaklık değerine kadar bütün sıcaklıklarda TDKNT belirli bir enerji seviyesi civarında dengede kalabilmektedir ve kararlılıklarını koruyabilmektedir. Sıcaklık artışına bağlı olarak, atom başına ortalama toplam enerji (E_{top}) değerleri artmaktadır.



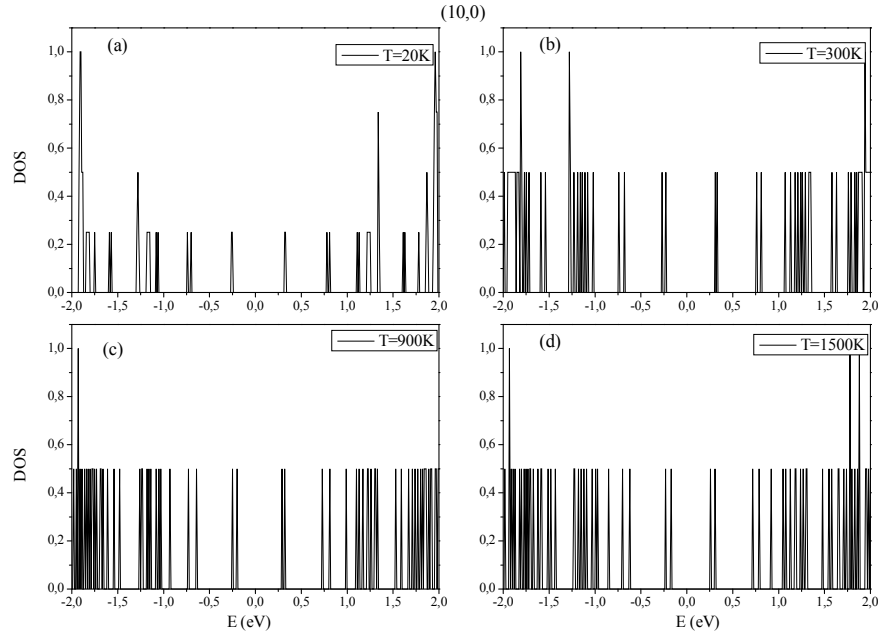
Şekil 4. 3 (10,0) Zigzag TDKNT'ün ortalama toplam enerjisinin (E_{top}) sıcaklığa bağlı olarak değişimi.

Her bir sıcaklık değerinde toplam enerjinin ortalama değerleri tespit edilerek atom başına toplam enerjinin (E_{top}) sıcaklığa bağlı değişimi grafik ile gösterilmiştir (Şekil 4.3). Toplam enerjinin sıcaklığa bağlı olarak lineer artış gösterdiği tespit edilmiştir. Bu artışın oranı $2,64 \times 10^{-4} eV/K$ olarak hesaplanmıştır.



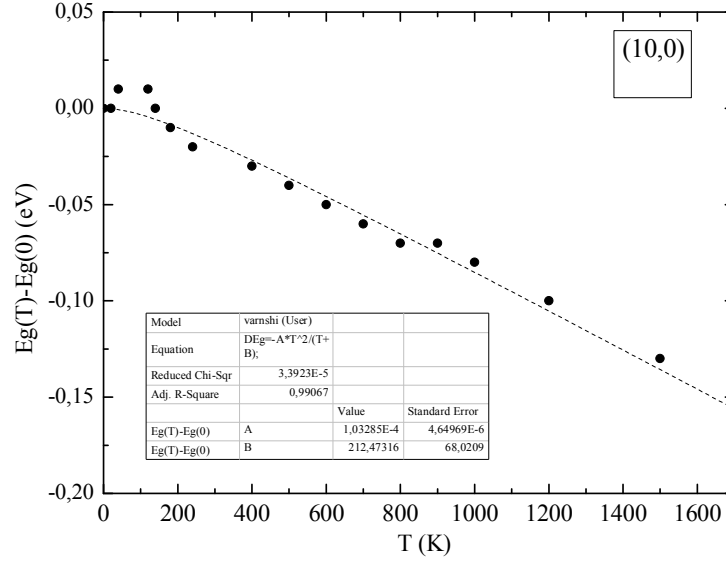
Şekil 4. 4 (10,0) Zigzag TDKNT için, 3000fs simülasyon süresinde Fermi enerjisi seviyesinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi.

Her bir sıcaklık değerinde, Fermi enerji seviyesi 3000MD adımı kullanılarak belirlenmiştir. Yüksek sıcaklık bölgesinde Fermi enerji seviyesi sıcaklığın artışı ile doğrusal olarak azalmaktadır. Fermi enerji seviyesi, düşük sıcaklıklarda 0,1K-60K arasında keskin bir düşüş ve 60K-300K sıcaklık aralığında yine doğrusal olmayan azalan davranış göstermektedir.



Şekil 4. 5 (10,0) TDKNT'ün (a) 20K, (b)300K, (c) 900K ve (d) 1500K sıcaklıklarda DOS grafikleri

TDKNT'ün, 0,1K-1500K sıcaklık aralığında DOS grafikleri oluşturulmuştur (Şekil 4.5) ve tespit edilen Fermi enerjisi civarındaki DOS davranışından enerji bant aralıkları (E_g) tespit edilmiştir ve sıcaklığa bağlı olarak enerji bant aralığının değişimi grafik ile gösterilmiştir (Şekil 4.6).

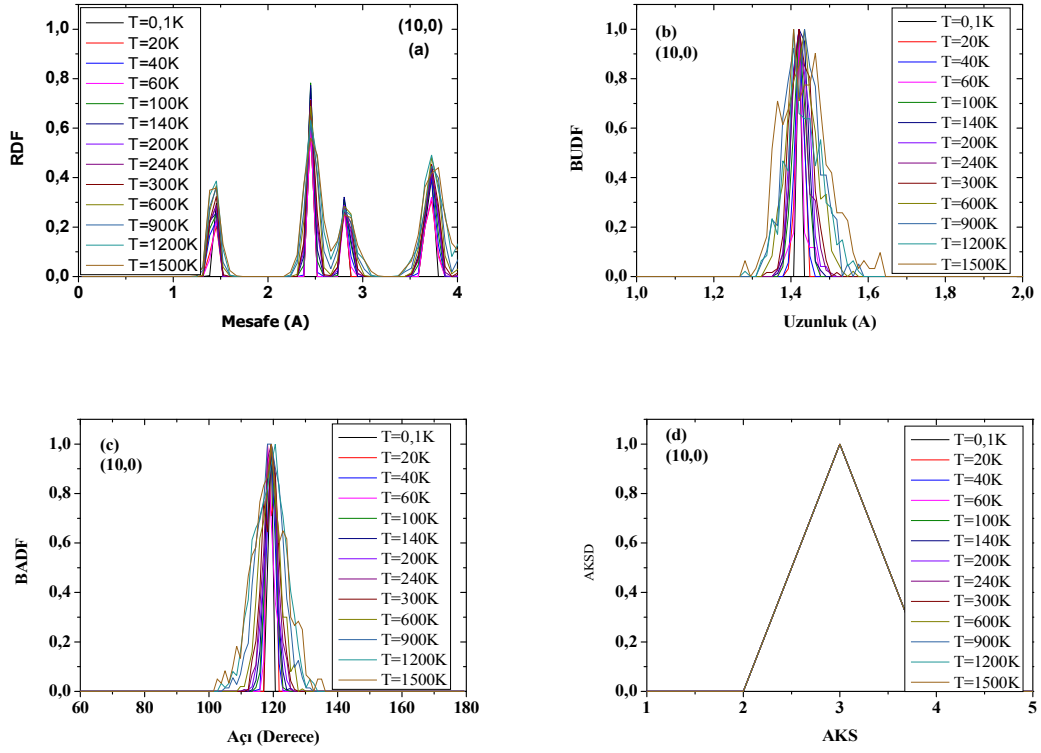


Şekil 4. 6 (10,0) Zigzag TDKNT için 3000fs simülasyon süresinde enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak değişimi

(10,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak değişimi 0,1 K-1500K sıcaklık aralığında, 3000MD adımı kullanılarak incelenmiştir. (10,0) TDKNT $n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı TDKNT olduğundan yarıiletken özellik gösterir. 300K Sıcaklıkta (10,0) TDKNT'ün Enerji bant aralığı 0,56eV olarak belirlenmiştir. Yüksek sıcaklık bölgesinde (300K-1500K) enerji bant aralığı sıcaklık artışı ile doğrusal olarak azalmaktadır. Düşük sıcaklık bölgesinde (0,1K-300K), enerji bant aralığı tekdüze olmayan bir davranış göstermektedir. 0,1K-200K sıcaklıkları arasında, enerji bant aralığı artmaktadır. Bu davranış Varshni modeline uygundur (Denklem 4.2).

$$\Delta E_g = E_g(T) - E_g(0) = -\frac{AT^2}{(B+T)} \quad (4,2)$$

Fit işlemleri uygulanarak (10,0) TDKNT için A ve B fit parametreleri sırası ile $1,03 \times 10^{-4} (eV/K)$ ve 212,48 (K) olarak hesaplanmıştır. Bu sonuçlar, literatürde ortogonal olmayan SB modeli kullanılarak yapılan çalışmanın sonuçları ile uyumludur [1]. (10,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak RDF, BUFD, BADF ve AKS değişimleri grafiklerle incelenmiştir (Şekil 4.7).

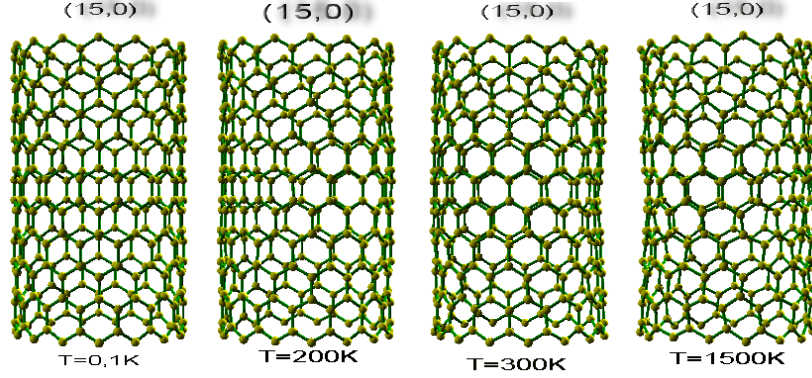


Şekil 4. 7 (10,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF, (c) BADF ve (d) AKS grafikleri

RDF grafiğine göre $T=0,1\text{K}$ sıcaklıkta TDKNT içerisindeki bir referans atomunun birinci komşusu $1,44 \text{ Å}$, ikinci komşusu $2,44 \text{ Å}$ ve üçüncü komşusu ise $2,80 \text{ Å}$ mesafelerde bulunmaktadır. Bu durum KNT'ün geometrik yapısı ile uygundur. Fakat sıcaklık artışına bağlı olarak bu noktadaki dağılımların genişlikleri artmakta böylece sıcaklığa bağlı olarak birinci, ikinci ve üçüncü komşuların uzaklıklarının değiştiği görülmektedir. BUDF sonucu da bu gözlemi desteklemektedir. $T=0,1\text{K}$ sıcaklıkta bağ uzunluğu tam olarak $1,42 \text{ Å}$ değerinde keskin bir pik verirken, sıcaklık artışına bağlı olarak dağılımların genişlikleri artmaktadır. Bu da, atomların bağ uzunluklarının $1,42 \text{ Å}$ civarında başka değerler alabildiğini göstermektedir. BADF'na göre atomik bağlar arasındaki açı değeri 120° dir ve sıcaklık artışı ile dağılımın genişliği artmaktadır. AKS dağılımı çalışılan bütün sıcaklık değerlerinde atomların komşuları ile 3 bağ yaptığını göstermiştir.

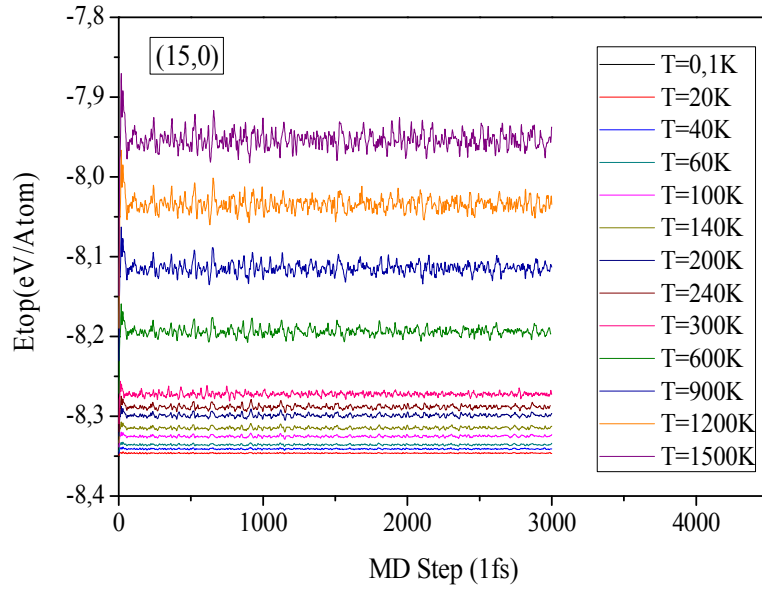
4.1.2 (15,0) TDKNT

(15,0) Zigzag TDKNT, 0,1K, 20K, 40K, 60K, 100K, 140K, 200K, 240K, 300K, 600K, 900K, 1200K ve 1500K sıcaklıklarda, çalışılmıştır.



Şekil 4. 8 (15,0) TDKNT'ün değişik sıcaklıklarda simülasyon görüntüleri

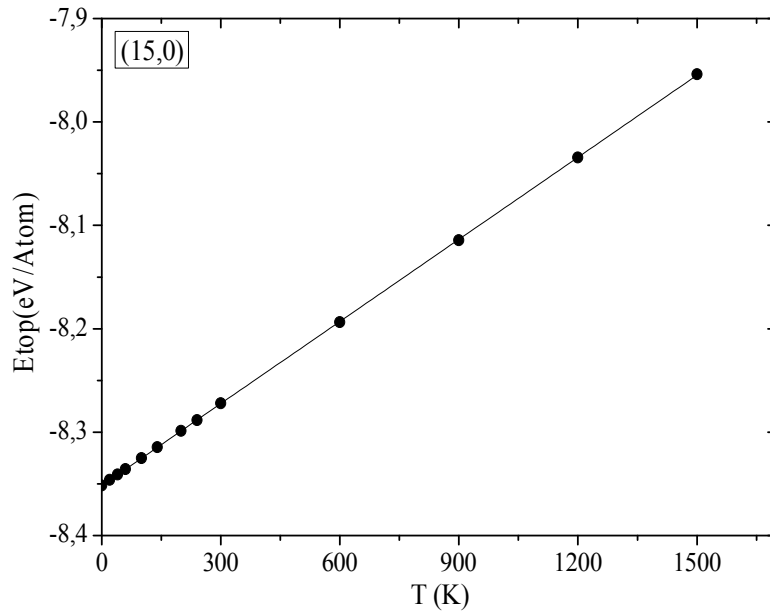
Bu sıcaklık değerlerinde, 3000MD simülasyon adımında toplam enerji değerleri bulunmuştur (Şekil 4. 9).



Şekil 4. 9 (15,0) TDKNT'ün, farklı sıcaklıklarda, toplam enerjinin zamana göre değişimi.

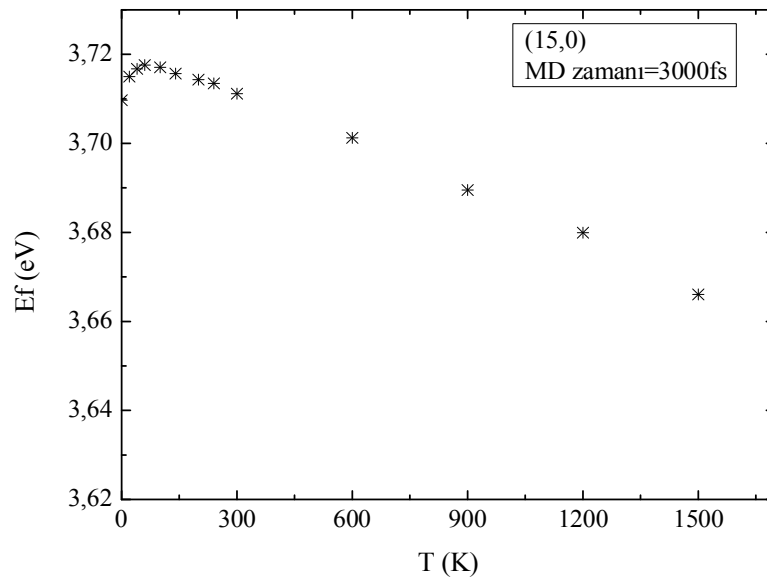
Sıcaklık artışı ile, MD adımı boyunca toplam enerji dalgalanmalarının genliklerinin arttığı görülmüştür. Bu artış, sıcaklığa bağlı olarak atomlar arasındaki titreşim genliğinin artışından dolayı gerçekleşmektedir. Toplam enerji dalgalanmalarının genliğindeki artışa rağmen 1500K sıcaklık değerine kadar bütün sıcaklıklarda TDKNT belirli bir enerji

seviyesi civarında dengede kalabilmektedir ve kararlılıklarını koruyabilmektedir. Sıcaklık artışına bağlı olarak, ortalama toplam enerji değerleri artmaktadır.



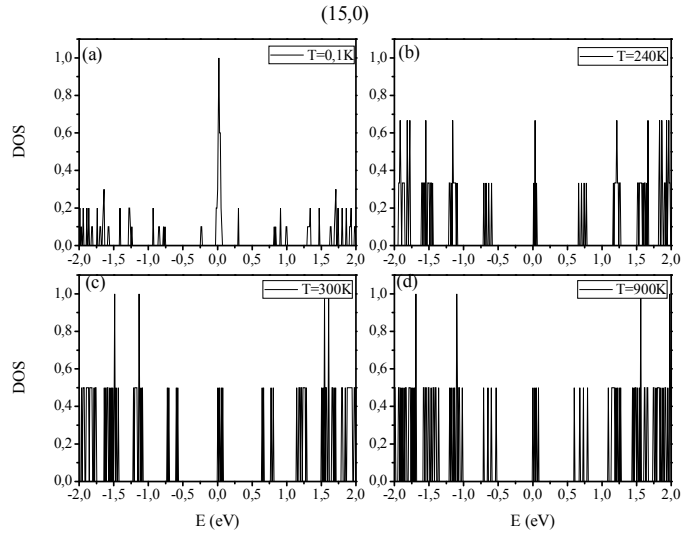
Şekil 4. 10 (15,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi.

Her bir sıcaklık değerinde toplam enerjinin ortalama değerleri tespit edilerek toplam enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi grafik ile gösterilmiştir (Şekil 4. 10). Toplam enerjinin sıcaklığa bağlı olarak lineer artış gösterdiği tespit edilmiştir.



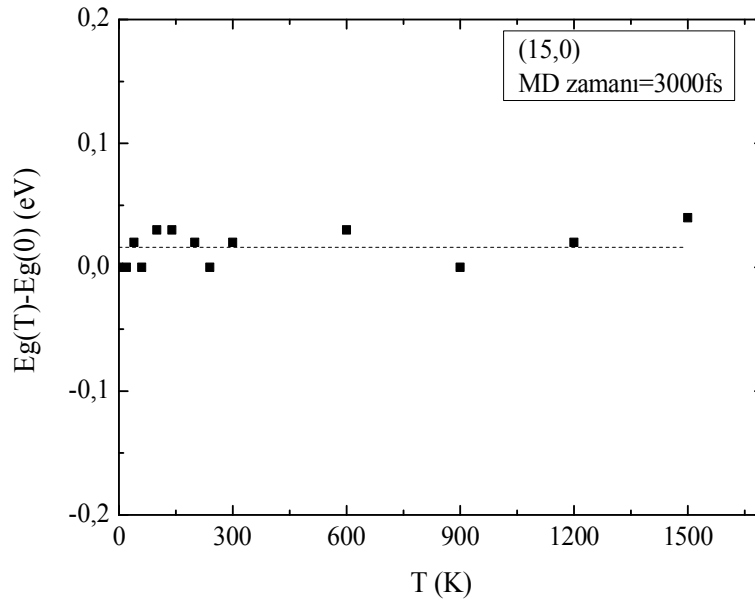
Şekil 4. 11 (15,0) TDKNT için, 3000fs simülasyon süresinde Fermi enerji seviyesinin sıcaklığa bağlı olarak değişimi.

Her sıcaklık değeriinde, Fermi enerji seviyesi belirlendi. Fermi enerji seviyesi, düşük sıcaklık bölgesinde (0,1K-100K) doğrusal olmayan davranış göstermektedir. Daha yüksek sıcaklık değerleri için doğrusal olarak azalmaktadır.



Şekil 4. 12 (15,0) TDKNT'ün (a) 0,1K, (b)240K, (c) 300K ve (d) 900K sıcaklıklarda DOS grafikleri

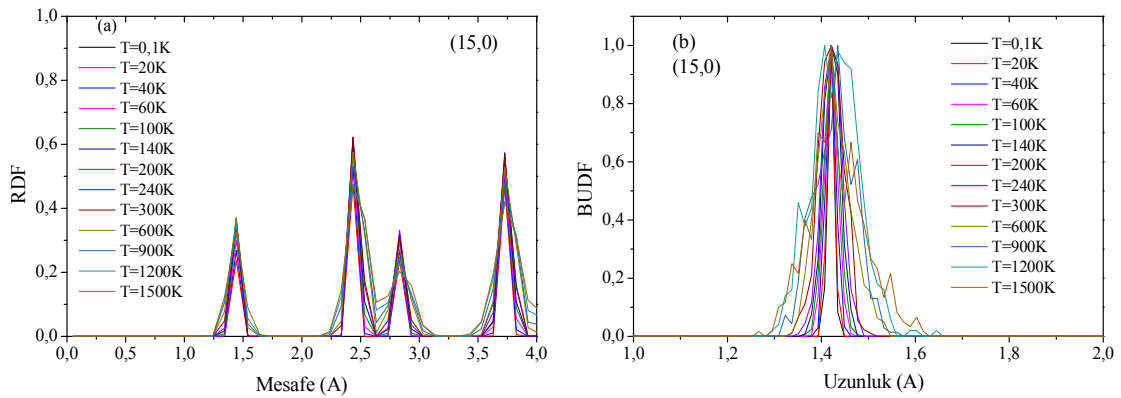
(15,0) TDKNT'ün, 3000MD adımı kullanılarak 0,1K-1500K sıcaklık aralığında DOS grafikleri oluşturuldu ve tespit edilen Fermi enerjisi civarındaki DOS davranışından enerji bant aralıkları (E_g) tespit edildi ve sıcaklığa bağlı olarak enerji bant aralığının değişimi grafik ile gösterildi (Şekil 4. 13).

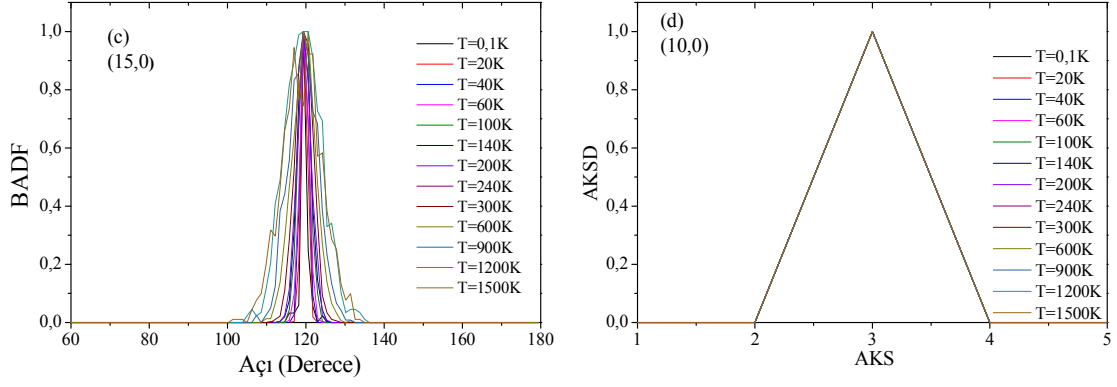


Şekil 4. 13 (15,0) TDKNT için 3000fs simülasyon süresinde enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak değişimi

(15,0) zigzag TDKNT, $n = 3q$ tipi zigzag KNT olduğundan, metalik özellik gösterir. 0,1 K sıcaklıkta, enerji bant aralığı 0,01eV olarak hesaplanmıştır. Enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak belirgin bir değişiklik göstermediği ve elektronik özelliğinin değişmediği görülmüştür. Buna göre, (15,0) metalik TDKNT'ün elektronik yapısının, MD adımına ve bu MD adımı boyunca uygulanan sıcaklığa bağlı olmadığı tespit edilmiştir.

(15,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak RDF, BUDF, BADF ve AKS değişimleri grafiklerle incelenmiştir (Şekil 4.14).





Şekil 4. 14 (10,0) TDKNT'ün sıcaklığa bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF, (c) BADF ve (d) AKS grafikleri

RDF grafiğine göre $T=0,1K$ sıcaklıkta TDKNT içerisindeki bir referans atomunun 1. Komşusu $1,44 \text{ Å}$, 2. Komşusu $2,44 \text{ Å}$ ve 3. Komşusu ise $2,80 \text{ Å}$ mesafelerde bulunmaktadır. Bu durum KNT'ün geometrik yapısı ile uygundur. Fakat sıcaklık artışına bağlı olarak bu noktadaki dağılımların genişlikleri artmakta böylece sıcaklığa bağlı olarak birinci, ikinci ve üçüncü komşuların ortalama uzaklıklarının değişmediği fakat dağılımların genişliğinin arttığı görülmektedir. BUDF sonucu da bu gözlemi desteklemektedir. $T=0,1K$ sıcaklıkta bağ uzunluğu tam olarak $1,42 \text{ Å}$ değerinde keskin bir pik verirken, sıcaklık artışına bağlı olarak dağılımların genişlikleri artmaktadır. Bu da, atomların bağ uzunluklarının $1,42 \text{ Å}$ civarında başka değerler alabildiğini göstermektedir. BADF'na göre atomik bağlar arasındaki açı değeri 120° dir ve sıcaklık artışı ile dağılımın genişliği artmaktadır. AKS dağılımı çalışılan bütün sıcaklık değerlerinde atomların komşuları ile 3 bağ yaptığını göstermiştir.

4.1.3 Yorum

TDKNT'lerin atom başına ortalama toplam enerji (E_{top}) değerleri, sıcaklık artışına bağlı olarak doğrusal artış göstermektedir. Sıcaklığa bağlı olarak (10,0) ve (15,0) TDKNT'lerin ortalama toplam enerjilerinin artış oranı sırası ile $2,64 \times 10^{-4} eV/K$ ve $2,65 \times 10^{-4} eV/K$ olarak hesaplanmıştır. Fermi enerjileri (E_f), düşük sıcaklıklarda ($T < 200K$) artarken, yüksek sıcaklıklarda ($T > 200K$) doğrusal olarak azalmaktadır. Enerji bant aralıklarında (E_g) sıcaklığa bağlı olarak meydana değişiklikler TDKNT'ün elektronik özelliklerine göre değişiklik göstermektedir. Metalik (15,0) TDKNT'ün, enerji bant aralığı (E_g), sıcaklığa bağlı olarak belirgin bir değişiklik göstermemektedir. Fakat yarıiletken

(10,0)TDKNT'ün enerji bant aralığı, 200K den büyük sıcaklıklarda bulk yarı iletkenlerin davranışına benzer olarak doğrusal bir şekilde azalmaktadır. Düşük sıcaklıklarda enerji bant aralığı, artış göstermektedir. Bu davranış, TDKNT'lerin nanoboyutlarından kaynaklanmaktadır. Bu sonuç literatürde ortogonal olmayan SM modeli sonucu [1] ile uyumludur.

Düşük ve yüksek sıcaklıklarda TDKNT'lerin RDF, BUDF, BADF ve AKS fiziksel özellikleri incelenmiştir. TDKNT'lerin T=0,1K sıcaklıkta bağ uzunlukları 1,42Å ve bağ açıları 120° değerindedir. Sıcaklık artışına bağlı olarak bağ uzunluğu ve bağ açıları değerleri bu değer civarında ve sıcaklık etkisi bağ uzunluklarını ve bağ açılarını değiştirmektedir. Buda, sıcaklığın TDKNT'ün fiziksel yapısında değişiklik meydana getirdiğini göstermektedir. Fakat her atom çalışılan bütün sıcaklıklarda komşuları ile 3 bağ yapmaya devam etmektedir. Bu sonuç, çalışılan sıcaklıklarda TDKNT'lerin altıgen örgü yapısını koruduğunu göstermektedir. Bağ koptuktan sonra sıcaklık arttırılırsa beşgen, yedigen bağ olasılıkları başlamaktadır.

4.2 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerinim Etkisi

Çalışmada, zigzag TDKNT 'lerin enerjetik ve elektronik yapılarının eksenel gerinime bağlı olarak değişimleri incelenmiştir. Çalışmada zigzag TDKNT'ler kiralite vektörlerinin 'n' indisine bağlı olarak $n \equiv 0(mod 3)$, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ TDKNT'ler olmak üzere üç sınıfta toplanmıştır. $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı için (12,0) TDKNT, $n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı için (10,0) ve (13,0) TDKNT'ler ve $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı için (14,0) TDKNT seçilmiştir.

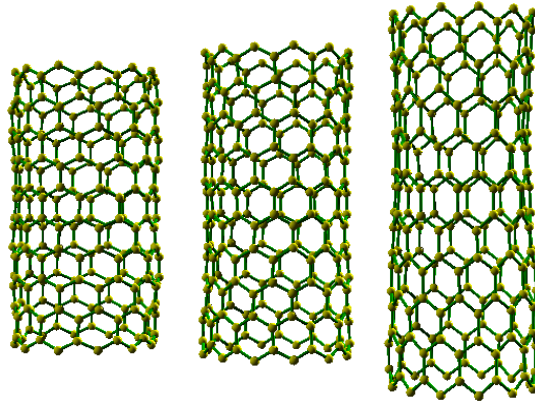
Simülasyonlarda, eksenel gerinim, TDKNT'ün simetri eksenine denklem (3. 49) 'a uygun olarak uygulandı. Negatif gerinim değerleri sıkıştırmayı, pozitif gerinim değerleri ise germeyi ifade etmektedir. Simülasyonlarda, sıcaklık etkisi 300K ve 1200K değerlerinde gerinim TDKNT'lere iki adımda uygulandı. Birinci adımda, TDKNT, 3000MD adımı kullanılarak denge durumuna getirildi. İkinci adımda, denge durumundaki TDKNT'lere, 2000MD adımı boyunca gerinim uygulandı.

4.2.1 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerininin TDKNT'lerin Elektronik Yapısına Etkisi

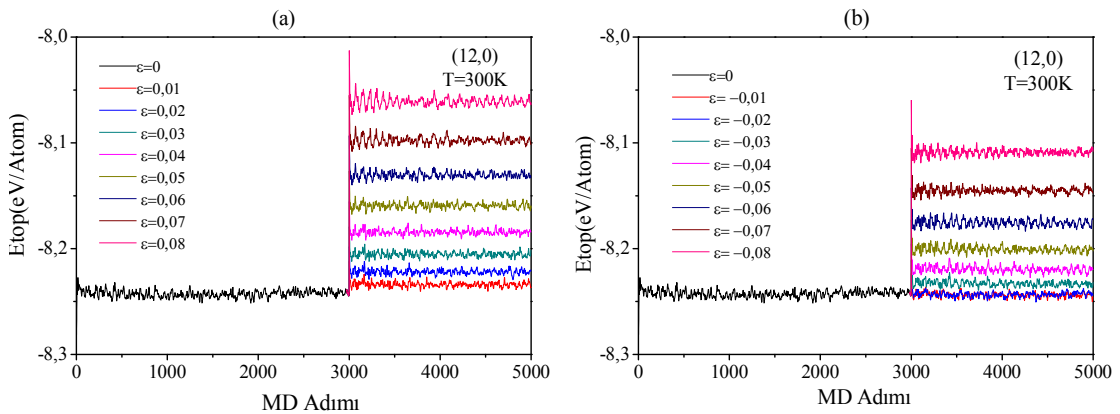
Uygulanan bütün gerinim değerlerinde, TDKNT'lerin atom başına ortalama toplam enerji, Fermi enerji seviyesi ve enerji bant aralıklarının gerinime bağlı olarak değişimleri incelenmiştir.

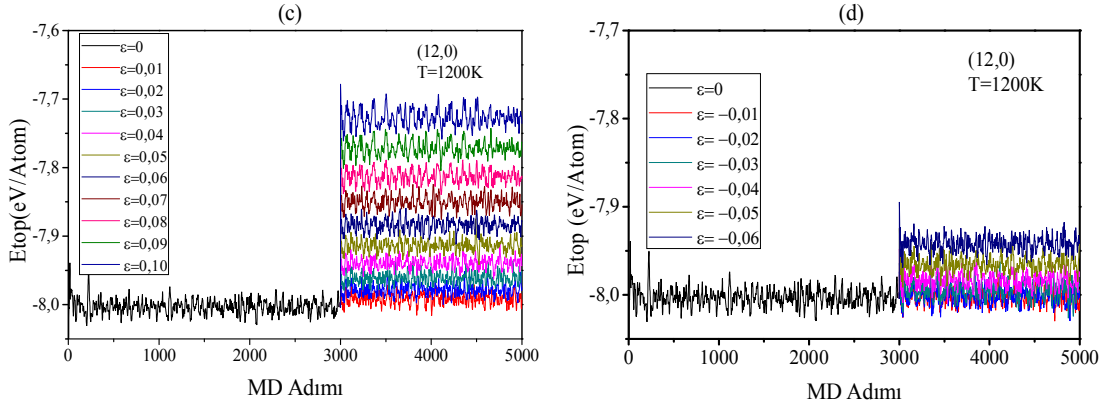
4.2.1.1 $n \equiv 0(mod 3)$ Sınıfı TDKNT

(12,0) TDKNT, $n \equiv 0(mod 3)$ tipi zigzag TDKNT'dür ve teorik olarak denge durumunda metalik özellik göstermesi gerekmektedir. Çalışmada sıfır gerinim durumunda (12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,01 eV olarak hesaplanmıştır. (12,0) TDKNT'e 300K sıcaklıkta -0,08 ile 0,21 arasında 1200K sıcaklığında -0,06 ile 0,10 arasında gerinim uygulanmıştır.



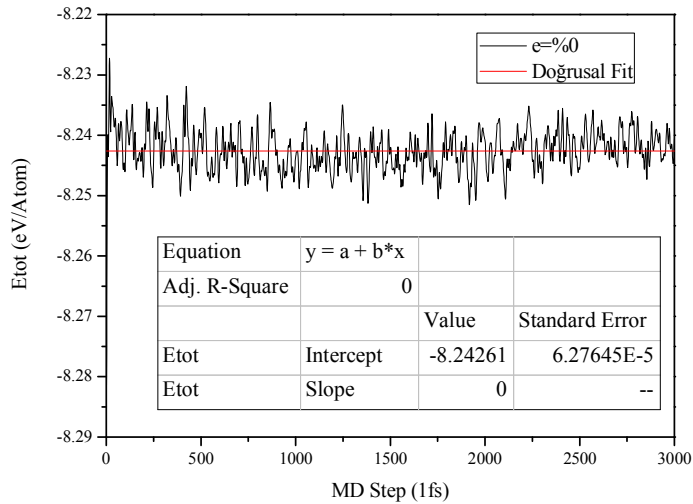
Şekil 4. 15 Gerinim etkisindeki (12,0) TDKNT'ün simülasyon görüntüleri





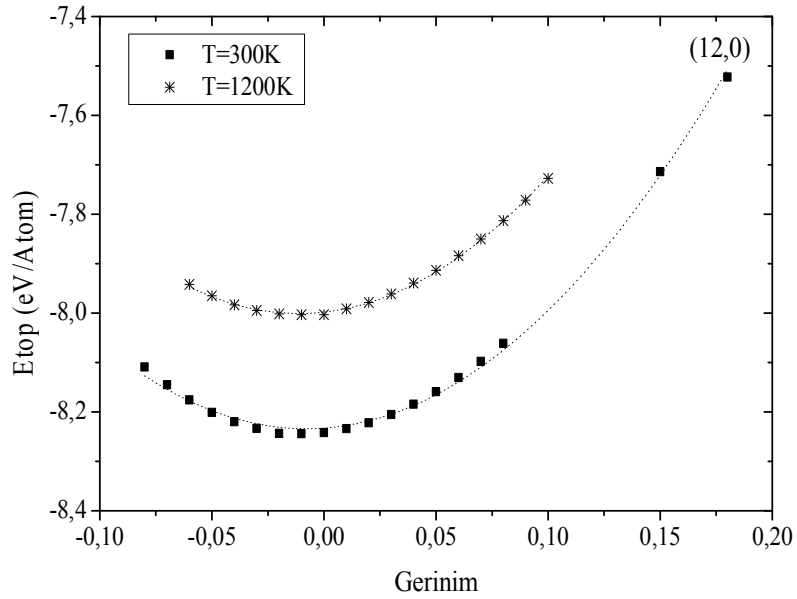
Şekil 4. 16 $T=300K$ sıcaklıkta (a) Germe (b) sıkıştırma ve $T=1200K$ sıcaklıkta (c) Germe (d) sıkıştırma etkisinde (12,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin zamana göre değişimi

Şekil 4. 16'de, $T = 300K$ ve $T = 1200K$ sıcaklıkta germe ve sıkıştırma gerinimi etkisindeki (12,0) TDKNT'ün MD simülasyonu boyunca toplam enerjindeki değişim gösterilmiştir. İlk 3000MD adımı KNT denge durumuna getirilmiştir. Sonraki 2000MD adımı boyunca gerinim uygulanmıştır. Uygulanan gerinimlere bağlı olarak toplam enerji dalgalanmalarının genliği artmasına rağmen gerinim altında yapısal kararlılığını koruduğu görülmektedir. $T=1200K$ sıcaklıkta enerji değerlerindeki salınımların genlikleri artmakta fakat denge durumu korunmaktadır. Her gerinim değeri için, grafiklere doğrusal fit işlemi uygulanarak, MD simülasyonu boyunca toplam enerji değişimlerinin ortalamaları hesaplanmıştır (Şekil 4. 17).

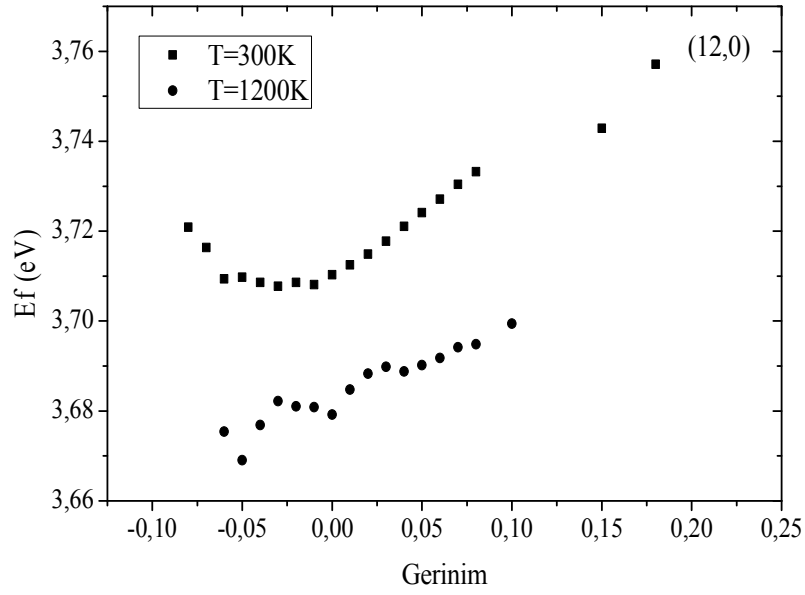


Şekil 4. 17 MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması

Şekil 4.18’de, ortalama toplam enerjinin, gerinime bağı olarak değişimi gösterilmiştir. Toplam enerjinin, gerinimin ikinci derece artan bir fonksiyonu olduğu görülmektedir. Buna göre uygulanan bu gerinim değerleri altında, KNT, elastik davranış gösterebilmektedir. Ortalama toplam enerji değeri sıcaklığın artışına bağı olarak artmakla birlikte bu elastik davranış T=1200K sıcaklık sonucunda da görülmektedir.

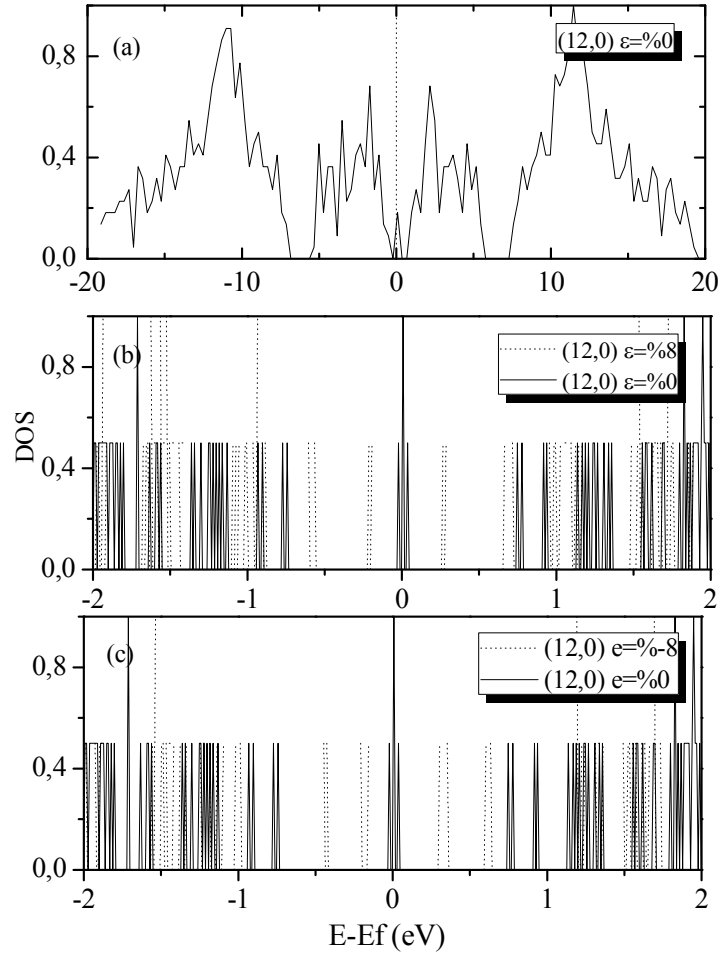


Şekil 4. 18 (12,0) TDKNT’ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağı değişimi



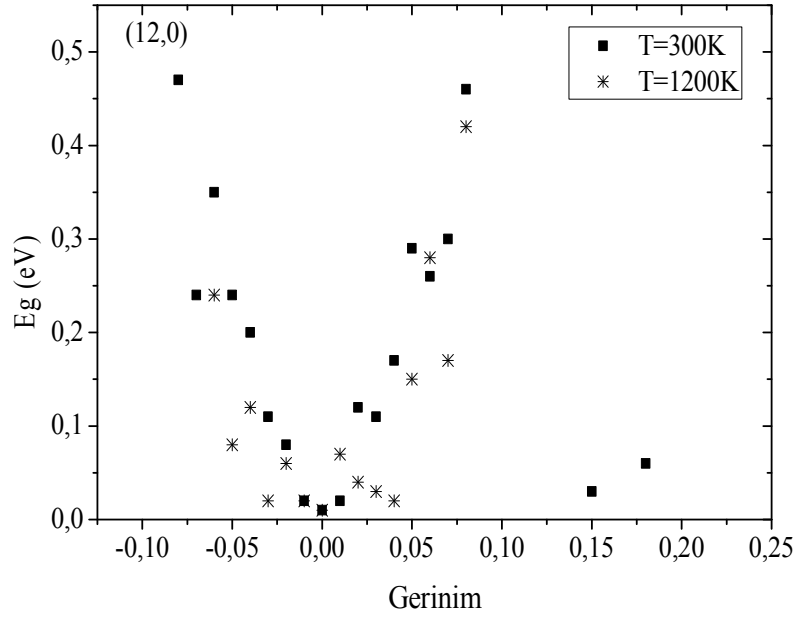
Şekil 4. 19 (12,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 4. 19'de Fermi enerjisinin gerinime bağlı olarak değişimi 300K ve 1200K sıcaklık değerleri için gösterilmiştir. T=300K sıcaklıkta germe etkisinde Fermi enerji seviyesinin arttığı görülmüştür. -0,02 sıkıştırma değerine kadar Fermi enerji seviyesi azalmakta fakat bu değerden sonra Fermi enerji seviyesi artmaktadır. T=1200K sıcaklıkta Fermi enerji seviyeleri germe etkisinde artmakta iken 0,05 sıkıştırma değerine kadar azalmaktadır.



Şekil 4. 20 (12,0) TDKNT'ün gerinim etkisinde DOS grafikleri

Her bir gerinim değeri için denklem 4. 1 kullanılarak DOS hesaplanmış ve grafiklerle gösterilmiştir (Şekil 4. 20). DOS grafiklerinde Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluklarından her bir gerinim değerinde enerji bant aralıkları (E_g) elde edilmiştir.

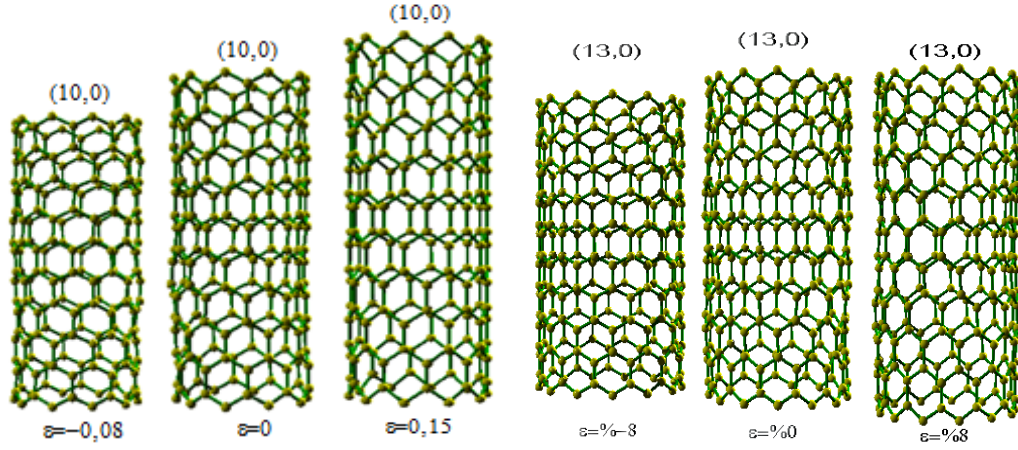


Şekil 4. 21 (12,0) TDKNT'ün $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (E_g) gerinime bağlı değişimi

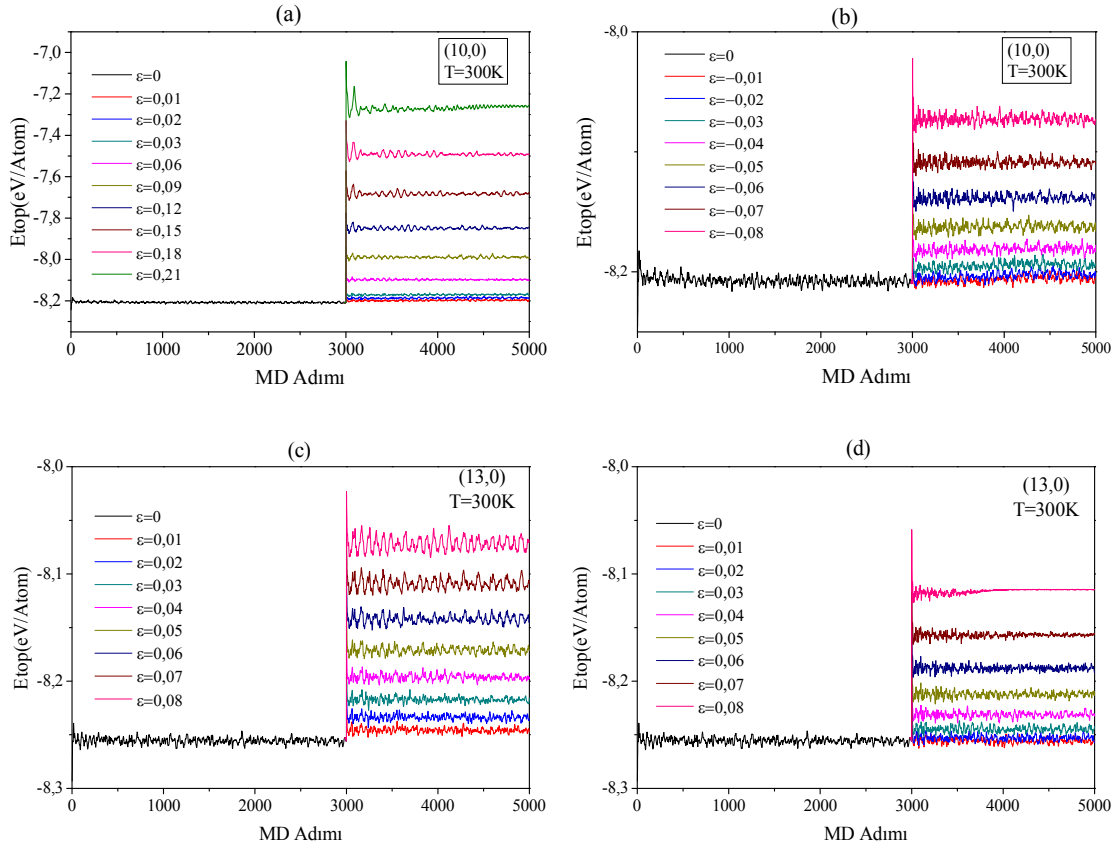
Şekil 4. 21'da, (12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının gerinime bağlı olarak değişimi 300K ve 1200K sıcaklıklarında gösterilmiştir. Her iki sıcaklık değerinde de sıfır gerinimde (12,0) TDKNT, metalik özellik göstermektedir. Sıfır gerinimde, enerji bant aralığı 0,01 eV olarak hesaplanmıştır. 0,08 değerine kadar ve yine simetrik olarak 0,08 sıkıştırma değerine kadar enerji bant aralığı artmaktadır. Bu değerlerde enerji bant aralığı 0,47 eV değerine ulaşmaktadır ve metal yarıiletken geçişleri gerçekleşmektedir. Bu sonuç, literatürde ilk prensipler yaklaşımı hesaplamaları ile [7] uygun sonuç vermektedir.

4.2.1.2 $n \equiv 1(mod 3)$ Sınıfı TDKNT'ler

$n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı TDKNT'lerin incelenmesinde (10,0) ve (13,0) TDKNT'ler kullanılmıştır. Bu sınıf TDKNT'ler elektronik özellikleri bakımından yarıiletken özellik göstermektedirler. Çalışmada, gerinim uygulanmadan ve $T = 300K$ sıcaklıkta, (10,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,53 eV ve (13,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,44 eV olarak hesaplanmıştır. (10,0) TDKNT'e 300K sıcaklıkta -0,08 ile 0,21 aralığında ve (13,0) TDKNT'e 300K ve 1200K sıcaklıklarda -0,08 ile 0,15 aralıklarında gerinim uygulanmıştır.



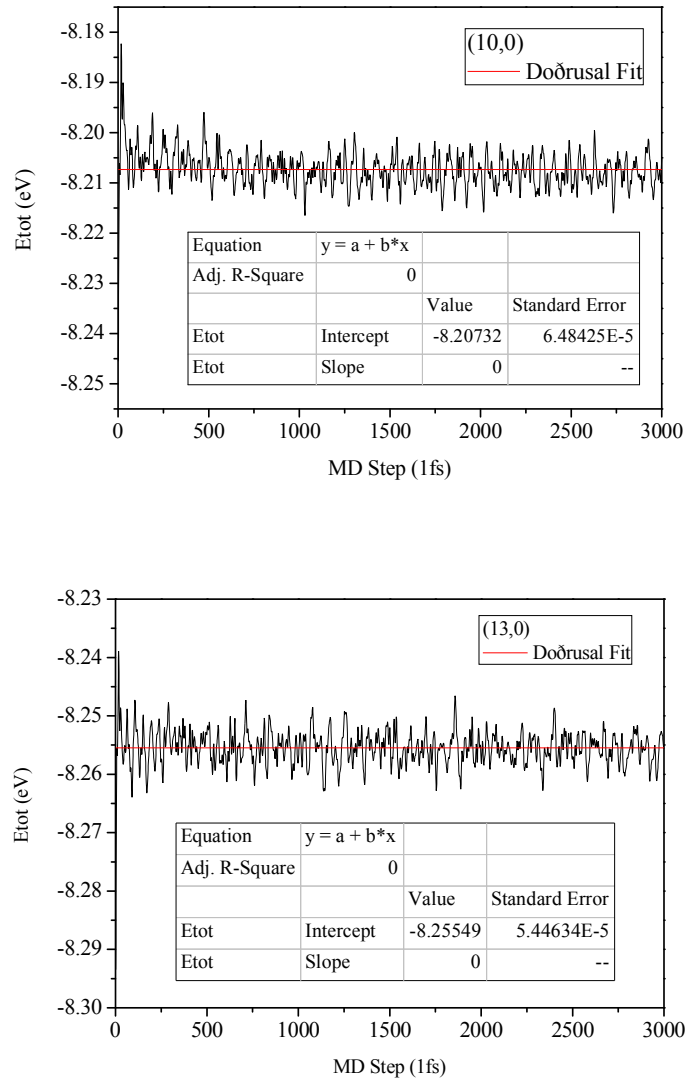
Şekil 4. 22 Gerinim etkisindeki(10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin simülasyon görüntüleri



Şekil 4. 23 (10,0) TDKNT'ün (a) germe ve (b) sıkıştırma etkisinde, (13,0) TDKNT'ün (c) germe ve (d) sıkıştırma etkisinde atom başına toplam enerjisinin zamana bağlı değişimi

Şekil 4. 23'de, germe ve sıkıştırma gerinimleri etkisindeki (10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin MD simülasyonu boyunca toplam enerjilerindeki değişim gösterilmiştir. İlk 3000MD adımında KNT denge durumuna getirilmiştir. Sonraki 2000MD adımı boyunca gerinim

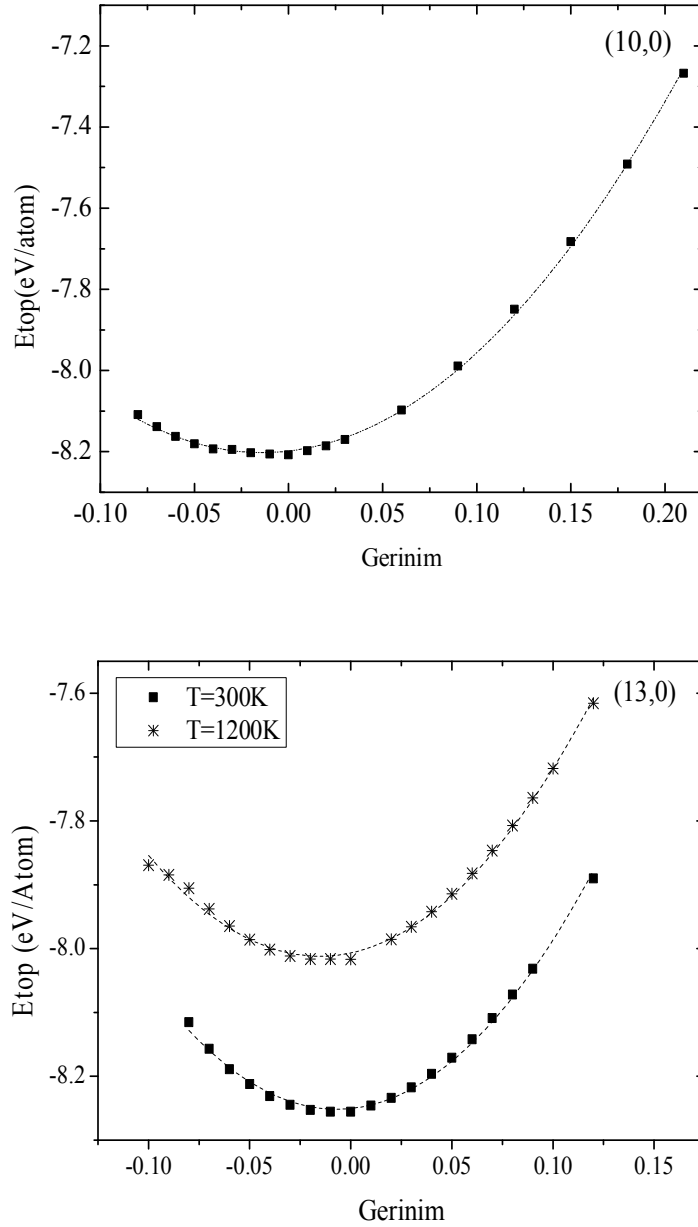
uygulanmıştır. Uygulanan gerinimlere bağlı olarak toplam enerji dalgalanmalarının genliği artmasına rağmen gerinim altında yapısal kararlılıklarını koruduğu görülmektedir. Her gerinim değeri için, grafiklere doğrusal fit işlemi uygulanarak, MD simülasyonu boyunca toplam enerji değişimlerinin ortalamaları ve denge durumlarındaki ortalama atom başına toplam enerjileri değerleri (E_{top}) hesaplanmıştır (Şekil 4. 24).



Şekil 4. 24 MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması

Şekil 4. 25' de, (10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin ortalama toplam enerji değerlerinin (E_{top}), gerinime bağlı olarak değişimi T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda gösterilmiştir. Ortalama toplam enerji, T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda her iki TDKNT için, gerinimin quadratik

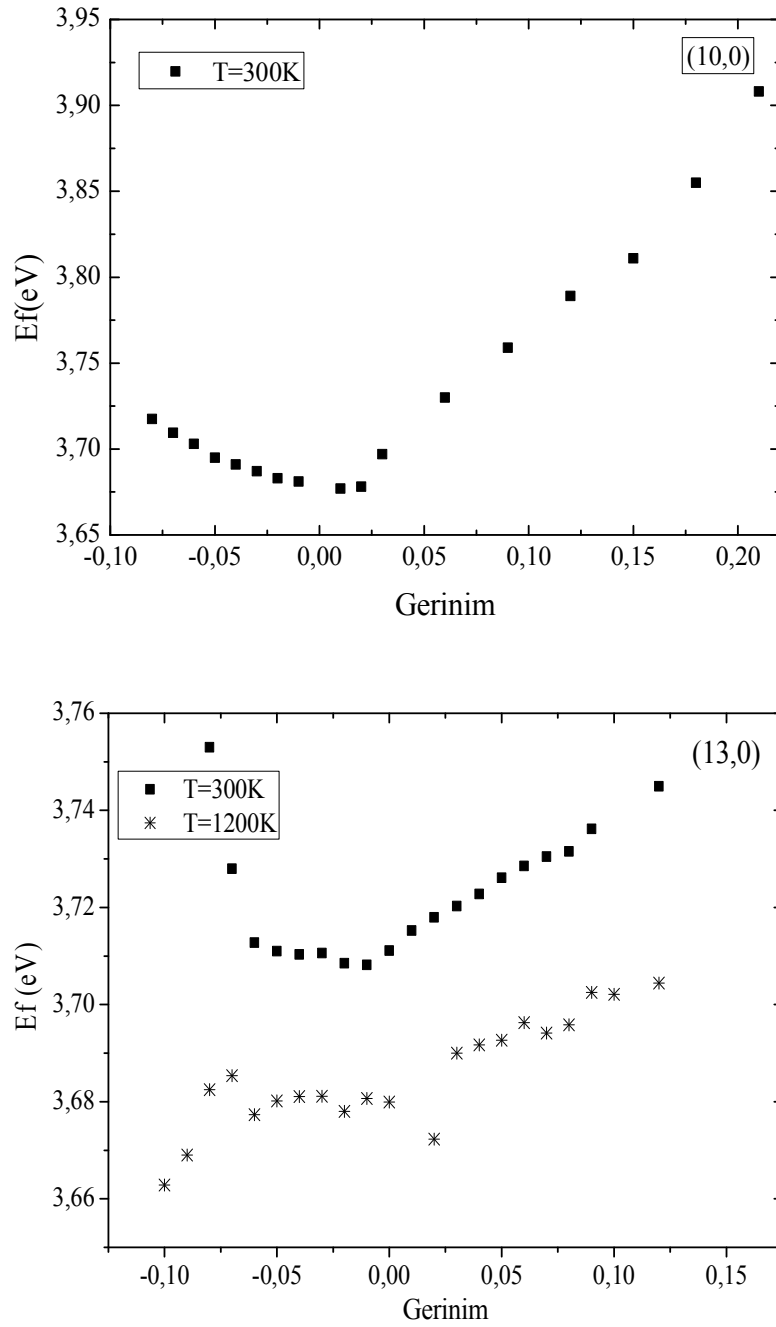
artan bir fonksiyonu olarak değişmektedir. Buna göre uygulanan bu gerinim değerleri altında, (10,0) ve (13,0) TDKNT'ler, elastik davranış gösterebilmektedir. Bu sonuç, ilk prensipler yaklaşımı sonuçları ile uygundur [4].



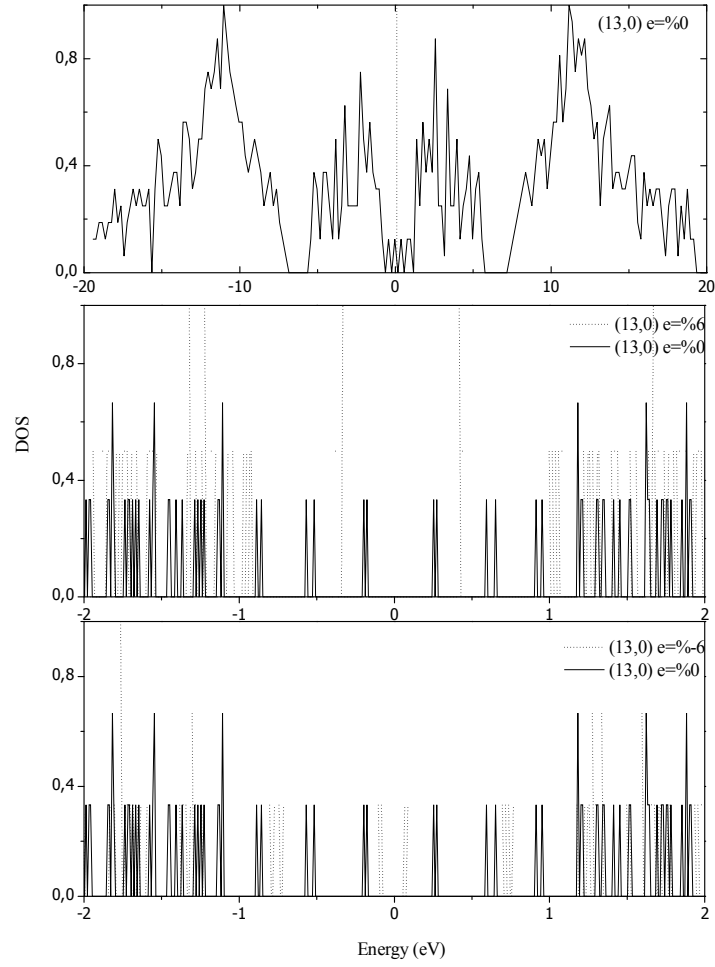
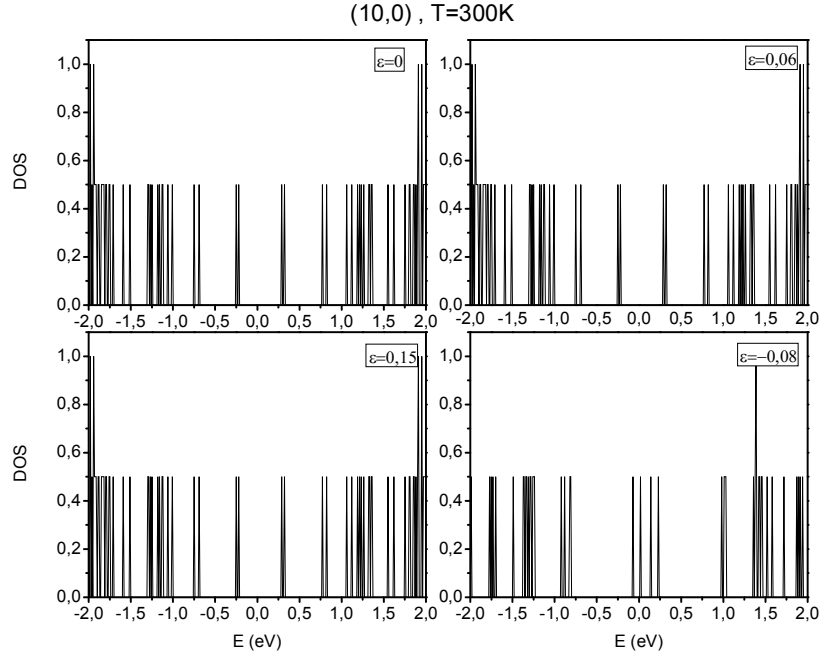
Şekil 4. 25 (10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin toplam enerji değerlerinin, gerinime bağlı olarak değişimi

Şekil 4. 26'da (10,0) ve (13,0) TDKNT'lerin Fermi enerji seviyelerinin (E_F), gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Her iki TDKNT için, Fermi enerji seviyesi germe /sıkıştırma gerinimlerine bağlı olarak artmaktadır. Bu artış belirgin bir fonksiyonel

davranış vermemektedir. (13,0) TDKNT'ün E_f değeri 1200K sıcaklıkta 0,07 sıkıştırma değerinden sonra azalmaktadır.

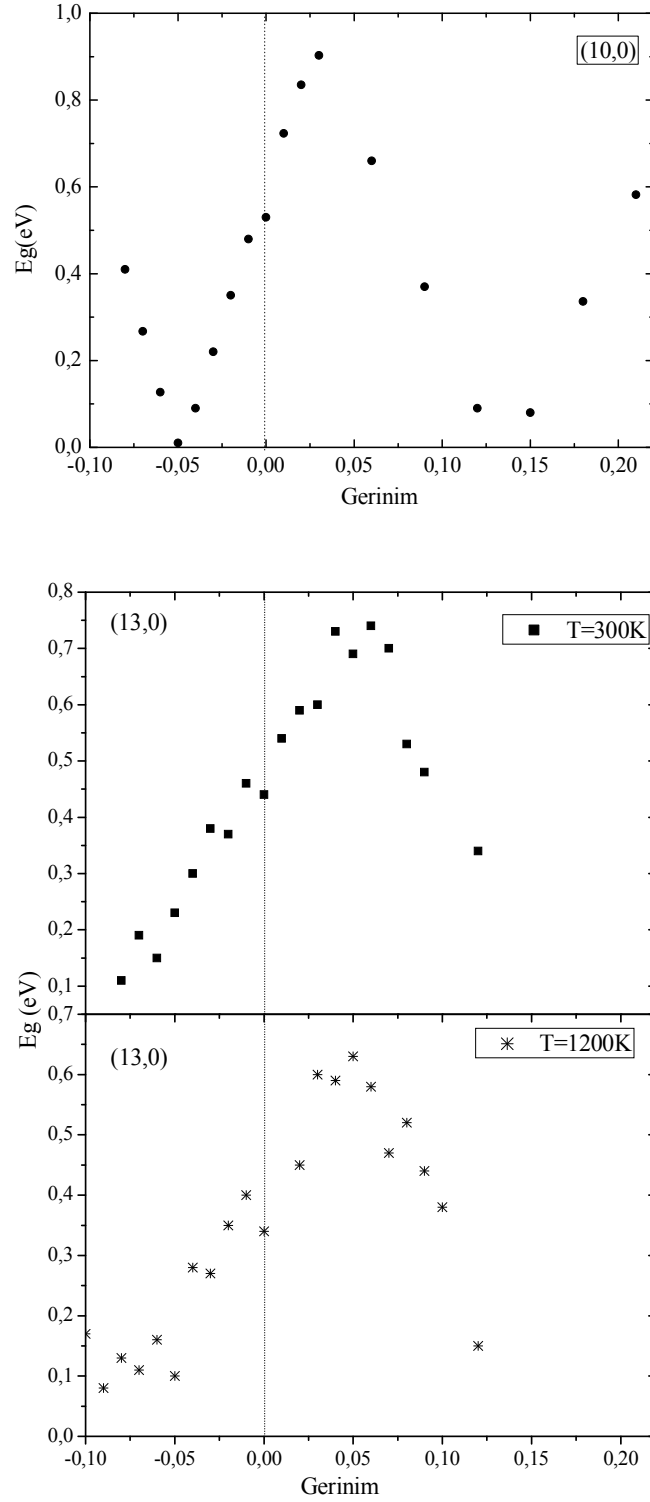


Şekil 4. 26 (a) (10,0) $T=300K$ (b) (13,0) TDKNT'ün $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 4. 27 (10,0) ve (13,0) TDKNT'leri gerinim etkisinde DOS grafikleri

Her bir gerinim değeri için denklem 4. 1 kullanılarak DOS hesaplanmış ve grafiklerle gösterilmiştir (Şekil 4. 27). DOS grafiklerinde Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluklarından her bir gerinim değerinde enerji bant aralıkları (E_g) elde edilmiştir.

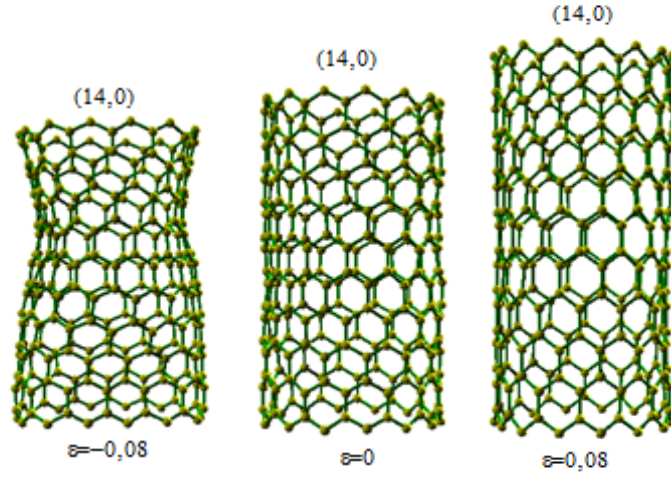


Şekil 4. 28 (10,0) TDKNT'ün T=300K sıcaklıkta ve (13,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (E_g) gerinime bağlı değişimi

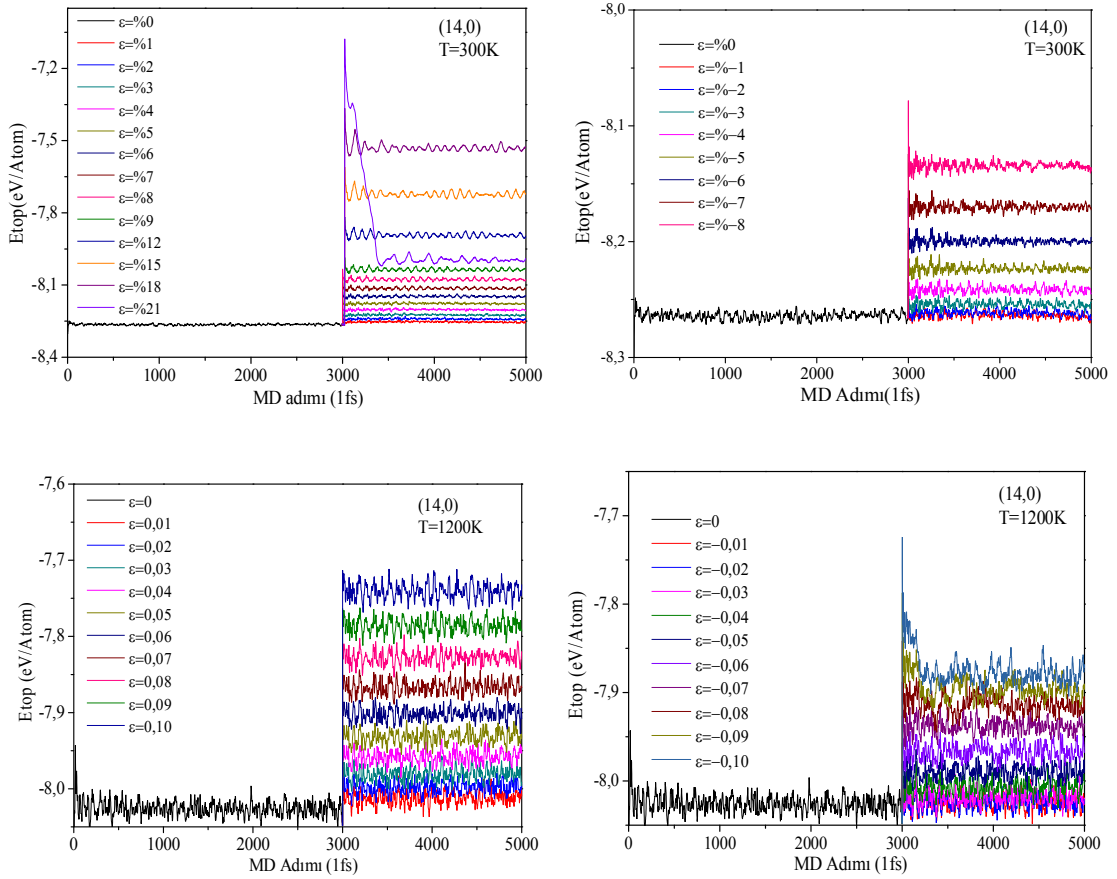
Şekil 4. 28’de (10,0) ve (13,0) TDKNT’lerin enerji bant aralılarının (E_g) gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Sıfır gerinimde (10,0) TDKNT’ün enerji bant aralığı 0,53eV olarak ölçülmüştür. 0,03 germe değerine kadar enerji bant aralığının arttığı ve bu gerinim değerinde 0,90 eV değerine ulaştığı tespit edilmiştir. 0,03 ile 0,15 germe değerleri arasında enerji bant aralığı azalmaktadır ve 0,15 germe değerinde 0,08 eV değerine düşmektedir. Bu değerde yarıiletken – metal geçişi olmaktadır. Ayrıca -0,05 sıkıştırma değerine kadar enerji bant aralığı, 0,01eV değerine kadar azalmakta ve yine bu sıkıştırma değerinde yarıiletken - metal geçişi olmaktadır. -0,05 değerinden -0,08 sıkıştırma değerine kadar enerji bant aralığı artmaktadır. Sıfır gerinimde (13,0) TDKNT’ün enerji bant aralığı 300K sıcaklıkta 0,44eV ve 1200K sıcaklıkta 0,34 eV olarak ölçülmüştür. 300K sıcaklıkta 0,06 germe değerine, 1200K sıcaklıkta 0,05 germe değerine kadar enerji bant aralığının arttığı ve bu gerinim değerlerinde sırası ile 0,74eV ve 0,63eV değerine ulaştığı tespit edilmiştir. Her iki sıcaklık değerinde 0,03 ile 0,12 germe değerleri arasında enerji bant aralığı azalmaktadır. 300K ve 1200K sıcaklıkta sıkıştırma etkisinde enerji bant aralığı azalmaktadır. 300K sıcaklıkta 0,08 sıkıştırma etkisinde 0,11eV değerine ve 1200K sıcaklıkta 0,05 sıkıştırma etkisinde 0,10 eV değerine düşmektedir. Bu değerlerde yarıiletken – metal geçişi olmaktadır. (10,0) ve (13,0) TDKNT’ler $n \equiv 1(mod 3)$ tipi TDKNT’ler olduklarından enerji bant aralıklarının gerinime bağlı değişimleri benzer davranışlar vermektedir. Bu sonuçlar, literatürde, ilk prensipler yaklaşımı [4, 5, 7, 9] ve sıkı bağ hesaplamaları [6] sonuçları ile uygundur.

4.2.1.3 $n \equiv 2(mod 3)$ Sınıfı TDKNT’ler

$n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı TDKNT’lerin incelenmesinde (14,0) TDKNT kullanılmıştır. (14,0) Sıfır gerinim etkisinde durumunda yarıiletken özellik göstermesi gerekmektedir. Çalışmada sıfır gerinim durumunda (14,0) TDKNT’ün enerji bant aralığı 0,55 eV olarak hesaplanmıştır. (14,0) TDKNT’e -0,08 ile 0,21 aralığında gerinim uygulanmıştır.



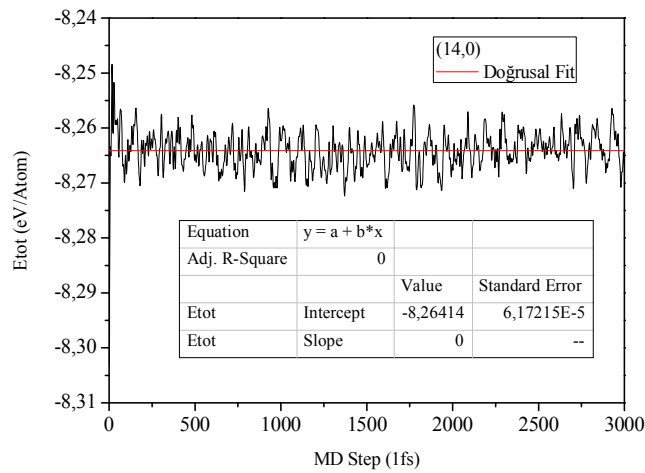
Şekil 4. 29 (14,0) TDKNT'ün sıkıştırma denge ve gerinim altındaki simülasyon görüntüleri



Şekil 4. 30 T=300K sıcaklıkta (a) Germe (b) sıkıştırma ve T=1200K sıcaklıkta (c) Germe (d) sıkıştırma etkisinde (14,0) TDKNT'ün toplam enerjisinin zamana göre değişimi

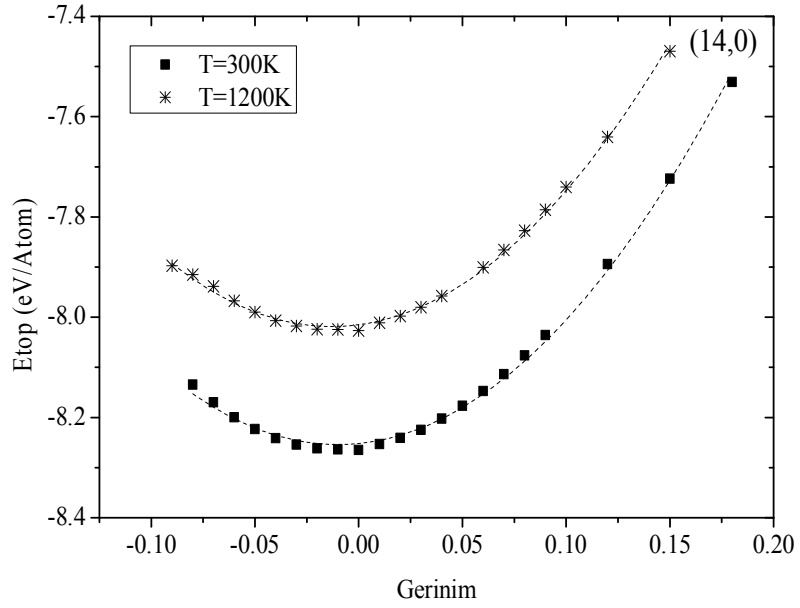
Şekil 4. 30 da germe / sıkıştırma gerinimi etkisindeki (14,0) TDKNT'ün MD simülasyonu boyunca toplam enerjisindeki T=300K ve T=1200K sıcaklık değerleri için değişimler gösterilmiştir. İlk 3000MD adımı KNT denge durumuna getirilmiştir. Sonraki

2000MD adımı boyunca gerinim uygulanmıştır. T=300K sıcaklıkta (14,0) TDKNT'ün, 0,18 gerinim değerine kadar yapısal kararlılığını koruduğu görülmektedir. 0,21 gerinim değerinde yapısal kararlılığı bozulmaktadır. T=1200K sıcaklıkta, enerji dalgalanmalarının genliği artmasında rağmen uygulanan gerinim değerlerinde yapısal kararlılık korunmakta yapı bozulmamaktadır. Her gerinim değerinde, grafiklere doğrusal fit işlemi uygulanarak, MD simülasyonu boyunca toplam enerji değişimlerinin ortalamaları hesaplanmıştır (Şekil 4. 31).

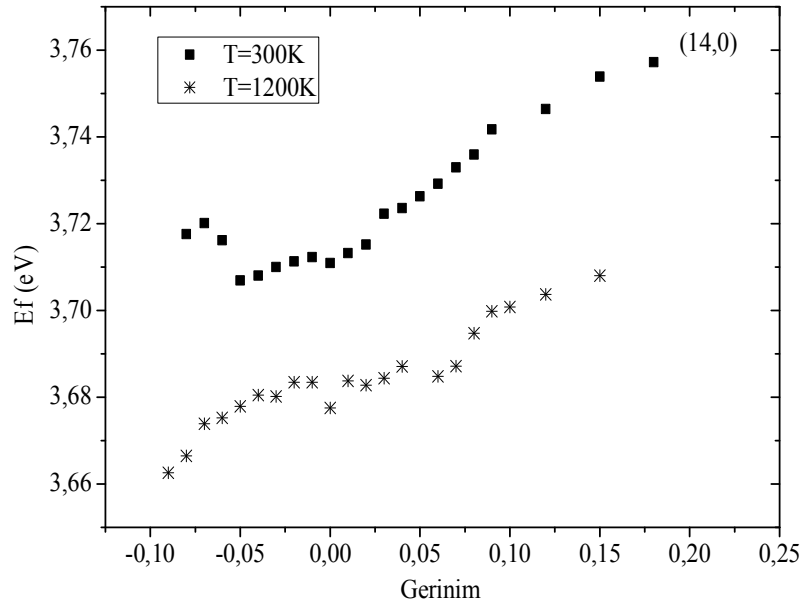


Şekil 4. 31 MD simülasyonları boyunca ortalama toplam enerjinin doğrusal fit ile hesaplanması

Şekil 4. 32 de ortalama toplam enerjinin, gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Toplam enerjinin, 0,18 germe değerine kadar, gerininin quadratik artan bir fonksiyonu olduğu görülmektedir. Buna göre uygulanan bu gerinim değerleri etkisinde, KNT, elastik davranış gösterebilmektedir.

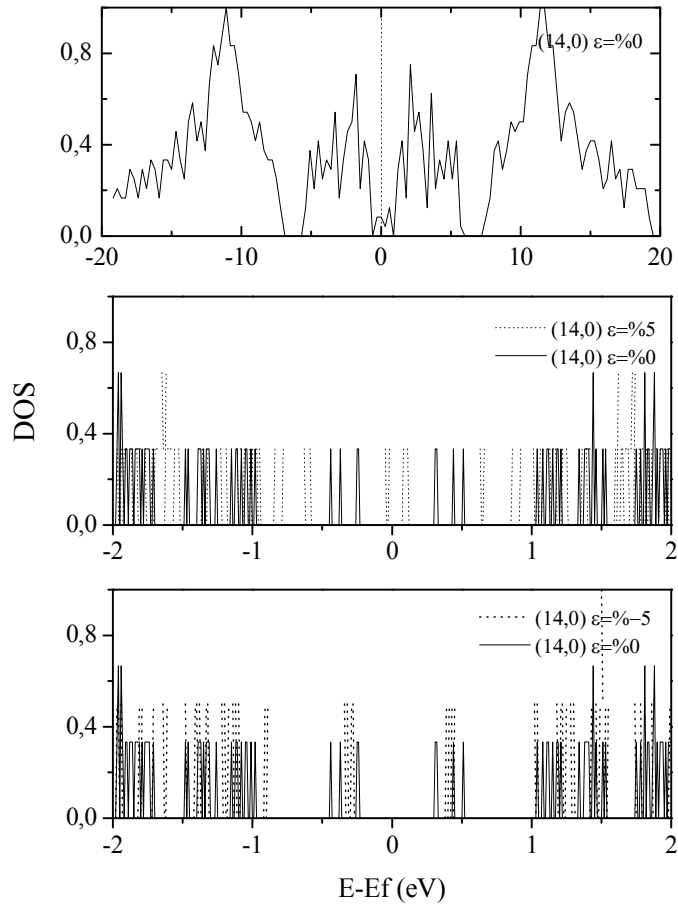


Şekil 4. 32 (14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



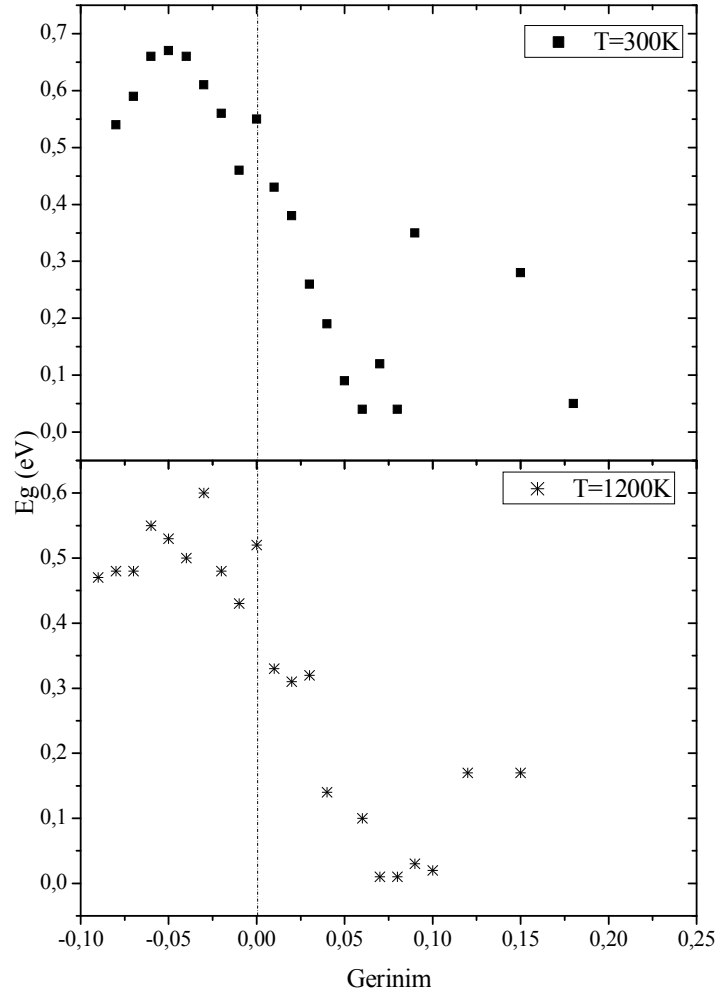
Şekil 4. 33 (14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 4. 33 de Fermi enerjisinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Germe etkisinde Fermi enerji seviyesinin arttığı görülmüştür. Sıkıştırma gerinim etkisinde, Fermi enerji seviyesinde, fonksiyonel bir değişim gözlemlenmemektedir.



Şekil 4. 34 (14,0) TDKNT'ün gerinim etkisinde DOS grafikleri

Herbir gerinim değeri için DOS grafikleri oluşturuldu. Grafiklerden, her bir gerinim değerinde enerji bant aralıkları (E_g) elde edildi.



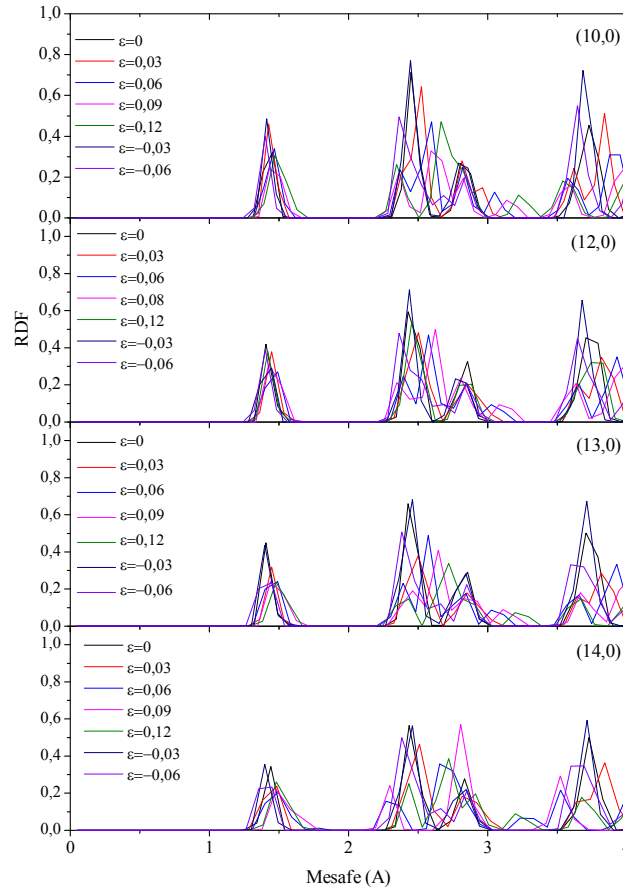
Şekil 4. 35 (14,0) TDKNT'ün T=300K ve T=1200K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının (E_g) gerinime bağlı değişimi

Şekil 4.35'de (14,0) Enerji bant aralığının gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Sıfır gerinimde (14,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 300K sıcaklıkta 0,55 eV, 1200K sıcaklıkta 0,52eV olarak ölçülmüştür. Enerji bant aralığı her iki sıcaklık değerinde germe etkisinde azalmaktadır. (14,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı, 300K sıcaklıkta 0,06 germe gerinimi etkisinde 0,04 eV değerine 1200K sıcaklıkta 0,01eV değerine düşer ve bu gerinim değerinde yarıiletken - metal geçişi meydana gelir. Sıkıştırma gerinimi etkisinde, 300K ve 1200K sıcaklıklarda sırası ile -0,05 ve 0,06 sıkıştırma değerlerine kadar enerji bant aralığı artar. Bu noktalarda, enerji bant aralıkları sırası ile 0,67eV ve 0,55 değerine ulaşır. Bu noktadan sonra enerji bant aralığı tekrar azalır. Bu sonuç, literatürde, ilk prensipler yaklaşımı hesaplamaları [7] ve sıkı bağ yaklaşımı hesaplamaları [6] ile uyumludur.

4.2.2 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Gerininin TDKNT'lerin Fiziksel Yapısına Etkisi

Gerinim deformasyonları etkisindeki TDKNT'lerin fiziksel özellikleri, RDF, BUDF ve BADF kullanılarak incelenmiştir.

Şekil 4.36'da (10,0), (12,0) (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin radyal dağılım fonksiyonları (RDF) grafikleri verilmiştir.

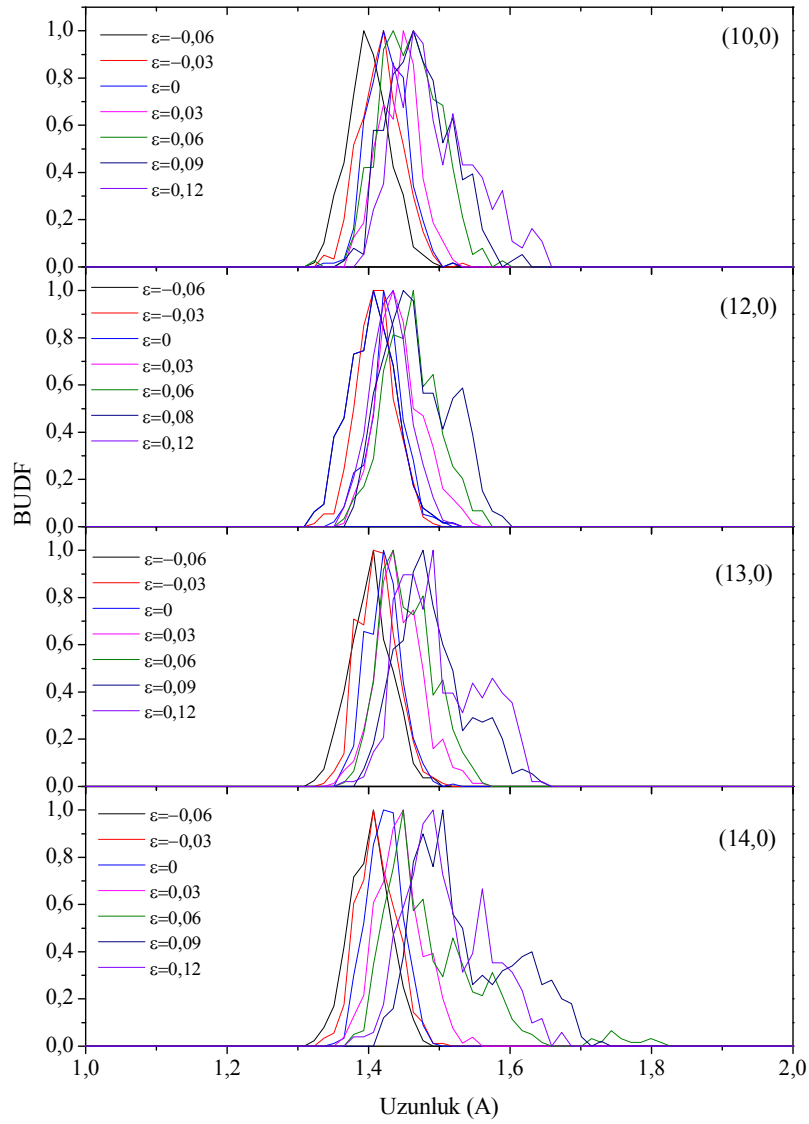


Şekil 4. 36 (10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün eksenel gerinime bağlı olarak RDF grafikleri

Deformasyonsuz (10,0) TDKNT'de 1. Komşu mesafesi 1,44 Å, 2. komşu mesafesi 2,50 Å ve 3. komşu mesafesi 2,80 Å olarak tespit edildi. %12 Germe etkisinde 1. komşu mesafesi 1,47 Å, 2. komşu mesafesi 2,35 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,66 Å oldu. %6 sıkıştırma etkisinde, 1. komşu mesafesi 1,40 Å, 2. komşu mesafesi 2,36 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,84 Å oldu. Deformasyonsuz (12,0) TDKNT'de 1. Komşu mesafesi 1,41 Å, 2. komşu mesafesi 2,43 Å ve 3. komşu mesafesi 2,85 Å olarak tespit edildi. %12 Germe etkisinde 1. komşu mesafesi 1,42 Å, 2. komşu mesafesi 2,44 Å ve 3. komşu mesafesi ise

2,77 Å oldu. %6 Sıkıştırma etkisinde, 1. komşu mesafesi 1,40 Å, 2. komşu mesafesi 2,36 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,84 Å oldu. Deformasyonsuz (13,0) TDKNT’de 1. Komşu mesafesi 1,41 Å, 2. komşu mesafesi 2,43 Å ve 3. komşu mesafesi 2,85 Å olarak tespit edildi. %12 Germe etkisinde 1. komşu mesafesi 1,47 Å, 2. komşu mesafesi 2,43 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,71 Å oldu. %6 Sıkıştırma etkisinde, 1. komşu mesafesi 1,45 Å, 2. komşu mesafesi 2,38 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,85 Å oldu. Deformasyonsuz (14,0) TDKNT’de ise 1. Komşu mesafesi 1,41 Å, 2. komşu mesafesi 2,43 Å ve 3. komşu mesafesi 2,85 Å olarak tespit edildi. %12 Germe etkisinde 1. komşu mesafesi 1,47 Å, 2. komşu mesafesi 2,43 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,71 Å oldu. %6 Sıkıştırma etkisinde, 1. komşu mesafesi 1,45 Å, 2. komşu mesafesi 2,38 Å ve 3. komşu mesafesi ise 2,85 Å oldu. Buna göre, 1. Komşu mesafesi germe etkisinde artarken sıkıştırma etkisinde azalmaktadır. 2. komşu mesafesi germe ve sıkıştırma etkisinde azalmakta ve 3. komşu mesafesi ise germe etkisinde azalırken sıkıştırma etkisinde artmaktadır.

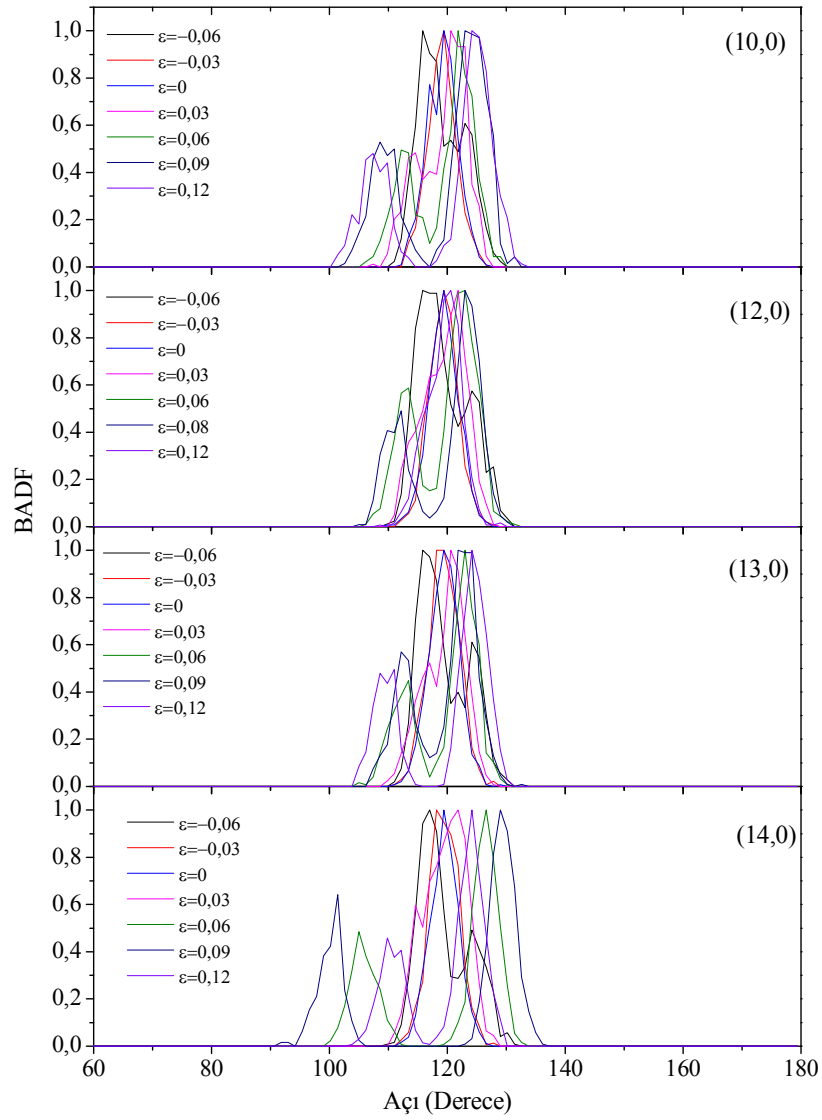
Şekil 4.37’de (10,0), (12,0) (13,0) ve (14,0) TDKNT’lerin bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları (BUDF) grafikleri verilmiştir.



Şekil 4. 37 (10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün aksenal gerinime bağlı olarak BUDF grafikleri

Deformasyonsuz (10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin bağ uzunluğu dağılımları 1,42 Å olarak tespit edilmiştir. (10,0) TDKNT'ün BUDF %12 germe etkisinde 1,46 Å değerine çıkarken, %6 sıkıştırma etkisinde 1,39 Å değerine azalmıştır. (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin bağ uzunluğu %8 germe etkisinde sırası ile 1,45 Å, 1,49 Å ve 1,49 Å değerlerine çıkarken, %6 sıkıştırma etkisinde 1,40 Å değerine azalmıştır.

Şekil 4.38'de (10,0), (12,0) (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin bağ açısı dağılım fonksiyonları (BADF) grafikleri verilmiştir.

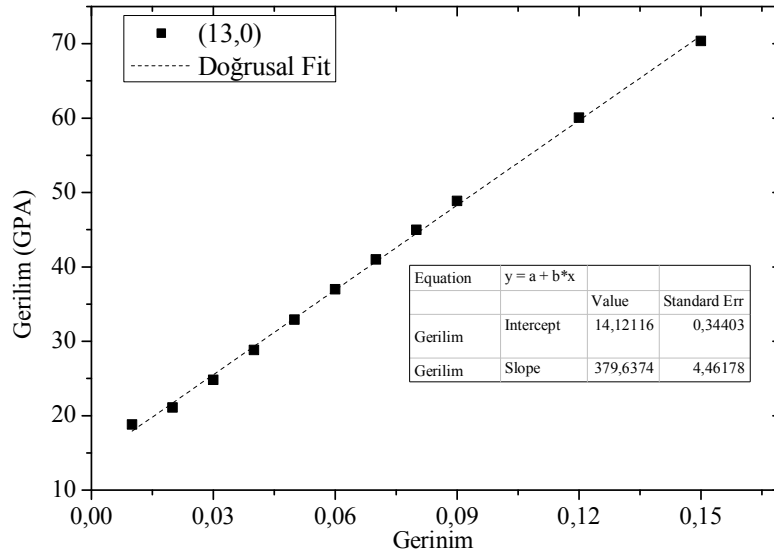
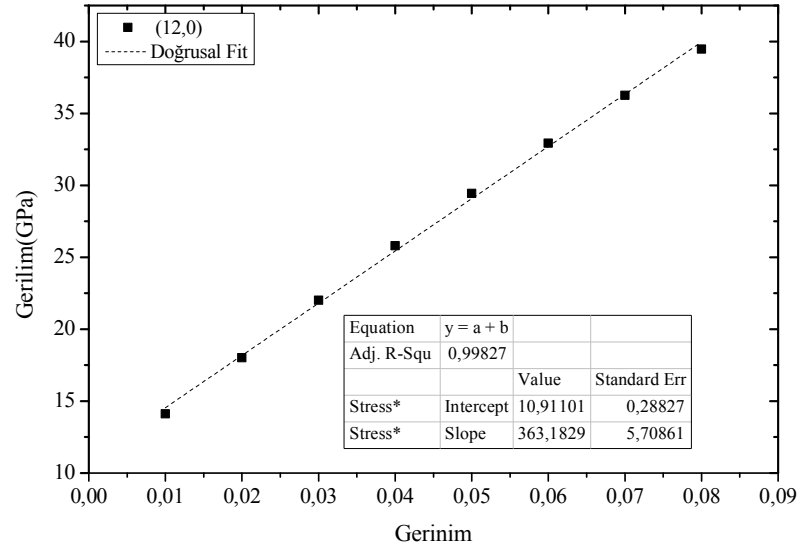


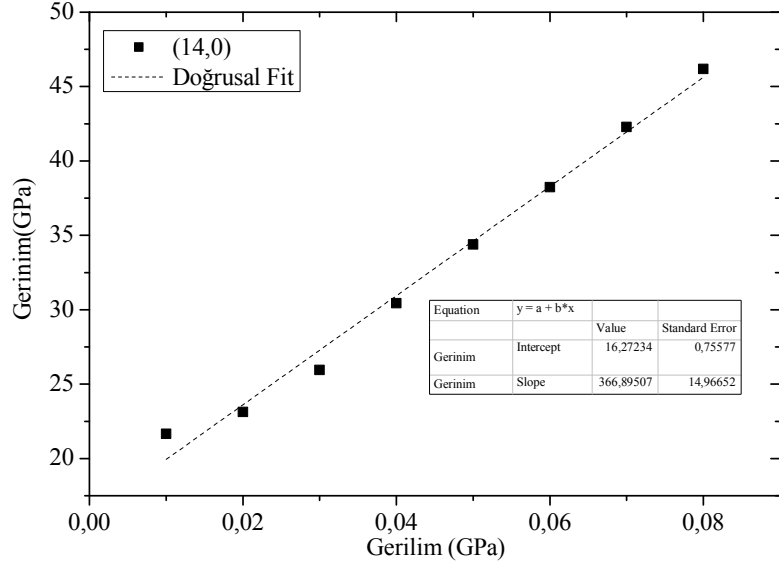
Şekil 4. 38 (10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün eksenel gerinime bağlı olarak BADF grafikleri

Bağ açısı değeri deformasyonsuz (10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT için $119,4^\circ$ olarak tespit edilmiştir. Bu değer bütün TDKNT'ler için %6 sıkıştırma etkisinde $115,4^\circ$ değerinde azalırken %12 germe etkisinde 124° değerine yükselmektedir. Ayrıca germe etkisinde (10,0) TDKNT için 108° değerinde (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ler için 112° değerinde yeni bir pik meydana gelmektedir.

4.2.3 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda TDKNT'lerin Mekanik Yapısı

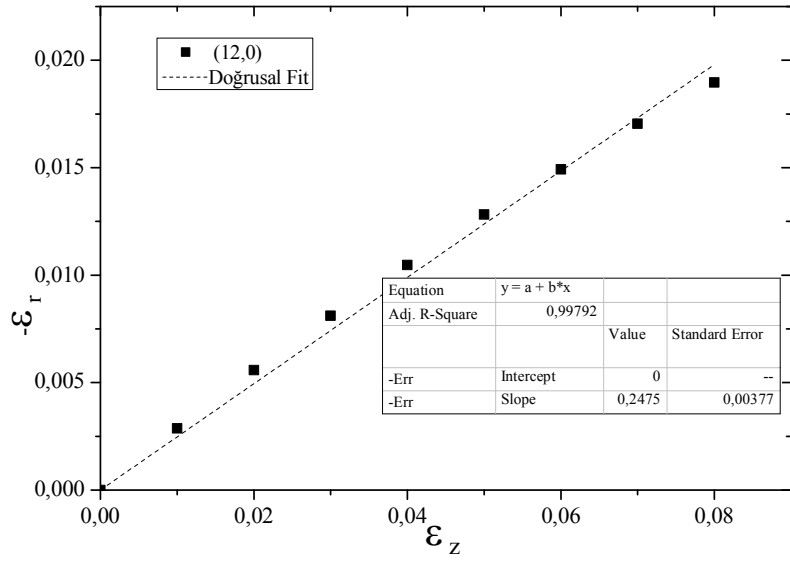
(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta mekanik özellikleri (Young modülü, Poisson oranı) incelenmiştir. Young modülü (Y), aksenal gerilimin (σ), aksenal gerinime (ε) oranı olarak hesaplanmıştır ($Y = \Delta\sigma/\Delta\varepsilon$). Aksenal gerilim (σ), malzemenin kesit alanına etki eden dış kuvvet olarak tanımlanmıştır ($\sigma = F/A$).

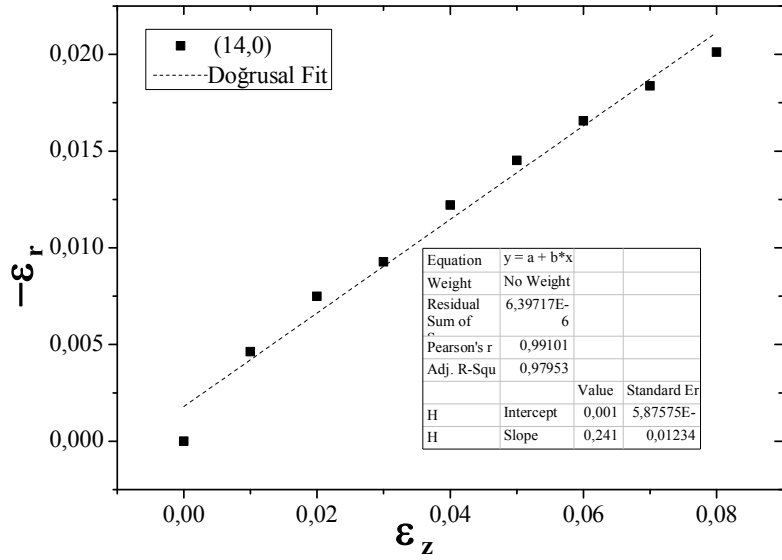
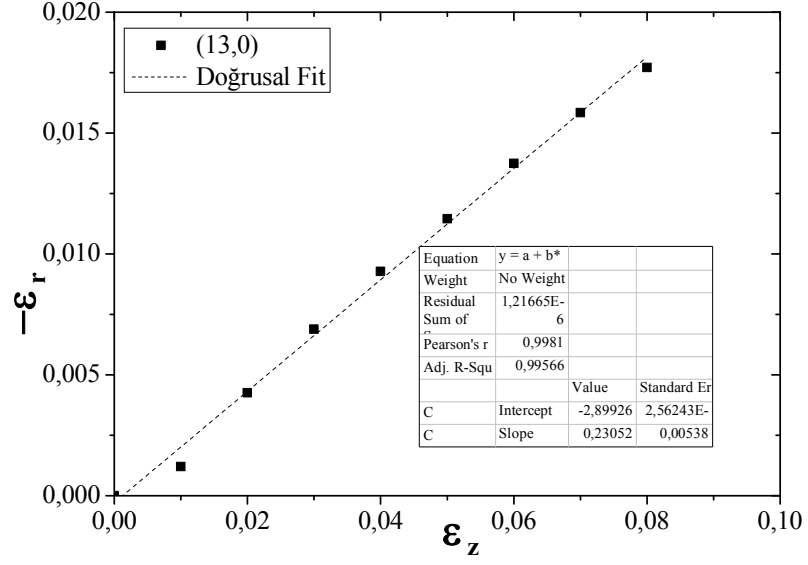




Şekil 4. 39 (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin gerilim – gerinim grafikleri

300K sıcaklıkta (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ün, Young modülü gerilim – gerinim grafiklerinin (Şekil 4.39) eğimi kullanılarak hesaplanmıştır. Young modülü sırası ile 363GPa, 380GPa ve 366GPa olarak tespit edilmiştir.



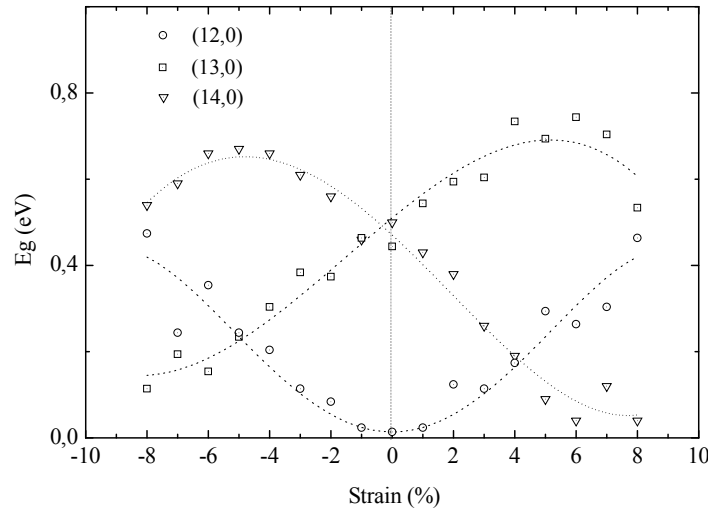


Şekil 4. 40 (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin radyal gerinimin eksenel gerinime bağlı değişimi

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta Poisson oranları radyal gerinimin (ϵ_r), eksenel gerinime (ϵ_z) bağlı değişimleri kullanılarak hesaplanmıştır ve sırası ile 0,247, 0,230 ve 0,241 olarak tespit edilmiştir.

4.2.4 Yorum

(10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin enerji ve elektronik özellikleri 300K ve 1200K sıcaklıklarda eksenel gerinime bağlı olarak incelenmiştir. İncelenen bütün TDKNT'lerin toplam enerjileri, gerininin quadratik fonksiyonları formundadırlar. İncelenen gerinim değerlerinde her iki sıcaklık değerinde tüm TDKNT'ler, yapısal kararlılıklarını ve elastik özelliklerini korumaktadırlar.



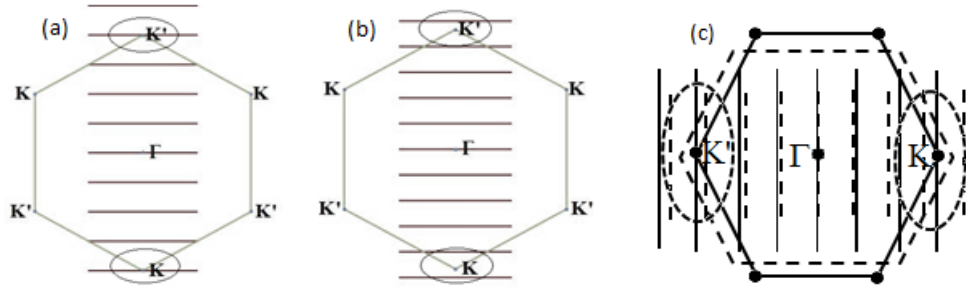
Şekil 4. 41 (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının gerinime bağlı değişimleri

(12,0) TDKNT, $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı TDKNT olduğundan, sıfır gerinim etkisinde metalik davranış göstermektedir. Germe ve sıkıştırma gerinimleri etkisinde, enerji bant aralığı artmakta ve metal yarıiletken geçişleri meydana gelmektedir.

(10,0) ve (13,0) TDKNT'ler, $n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı TDKNT'ler olduklarından sıfır gerinim etkisinde yarıiletken davranış göstermektedirler. Eksenel gerinim etkisinde her iki TDKNT, benzer davranışlar göstermektedirler. Enerji bant aralıkları germe gerinimine bağlı olarak artmasına rağmen sıkıştırma gerinimi etkisinde azalmaktadırlar ve yarıiletken – metal geçişleri meydana gelmektedir.

(14,0) TDKNT, $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı bir TDKNT olduğundan sıfır gerinim etkisinde yarıiletken davranışı göstermektedir. Sıkıştırma gerinimi etkisinde, enerji bant aralığı artmaktadır. Buna karşılık germe gerinimi etkisinde, enerji bant aralığı azalmakta ve yarıiletken – metal geçişi meydana gelmektedir. 300K ve 1200K sıcaklık değerlerinde,

enerji bant aralıklarının gerinime bağlı olarak değişimleri benzer davranışlar göstermektedir.



Şekil 4. 42 (a) $n \equiv 0(mod 3)$ metalik ve (b) $n \equiv 1(mod 3), n \equiv 2(mod 3)$ yarı iletken zigzag TDKNT'lerin 1.Brillouin bölgeleri (c) Eksenel gerinime bağlı olarak Brillouin bölgelerindeki değişim.

İki boyutlu grafenin enerji dispersiyon bağıntısı üzerinde tanımlı bir boyutlu TDKNT enerji dispersiyon eğrileri, grafenin π ve anti π (π^*) bantlarının simetrik ve dejenere olduğu K simetri noktası üzerinden geçerlerse, durum yoğunluğu Fermi seviyesinde belirli bir değere sahip olur ve sıfır enerji bant aralığına sahip olurlar. $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'ler bu durumu sağlamaktadırlar (Şekil 4.42 a) ve metalik özellik gösterirler. $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'lerin enerji dispersiyon eğrileri K simetri noktasından geçmezler (Şekil 4.42 b) ve yarı iletken özellik gösterirler (Şekil 2.7) [40]. Eksenel gerinime bağlı olarak grafenin ters uzay örgüsü ve WW' çizgi segmentleri ile ifade edilen TDKNT'ün ters uzay örgüsü ile olan yönelimleri değişir. Eksenel gerinime bağlı olarak K simetri noktası ile en yakın WW' çizgi segmenti arasındaki mesafe dolayısı ile enerji bant aralığı değişir ve belirli gerinim değerlerinde metal-yarıiletken ya da yarıiletken – metal geçişleri meydana gelir (Şekil 4.42 c).

Eksenel gerinime bağlı olarak bütün zigzag TDKNT'lerin RDF, BUDF, BADF fiziksel özellikleri değişmektedir. Birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri uygulanan eksenel gerinim değerinde ve türünden etkilenmektedir.

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta Young modülü ve Poisson oranı değerleri hesaplanmıştır. (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Young modülü (Y) sırası ile 363GPa, 380GPa ve 366GPa olarak ve Poisson oranları sırası ile 0,247, 0,230 ve 0,241olarak tespit edilmiştir.Literatürde, TDKNT'lerin Young modülü 300 GPa ile 1 TPa arasında ve Poisson oranı 0,100 ile 0,300 arasındadeğerler bildirilmiştir [27-29].

4.3 Düşük / Yüksek Sıcaklıklarda Boşluk Kusurlarına Bağlı Olarak TDKNT'lerin Elektronik Yapısı

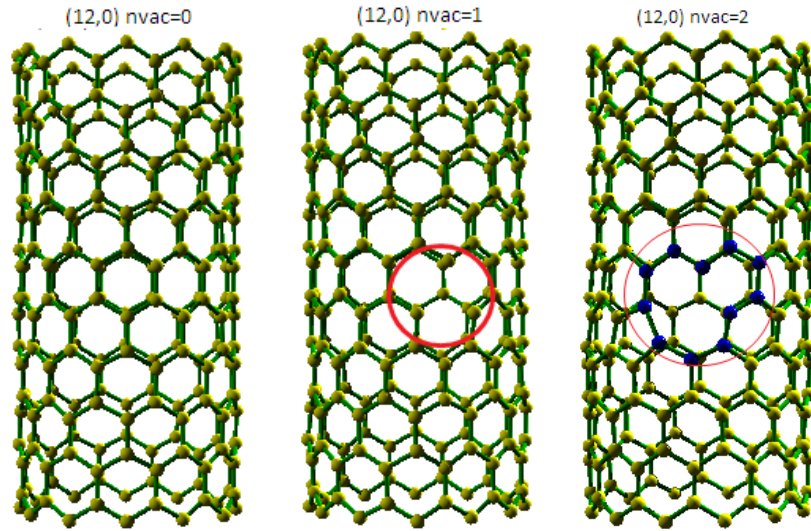
Bu çalışmada (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin, itici potansiyel enerjilerinin, bant yapısı enerjilerinin, kinetik enerjilerinin ve atom başına toplam enerjilerinin TDKNT üzerinde meydana gelen boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değişimleri incelenmiştir. Ayrıca bu TDKNT'lerin boşluk kusurlarında, Fermi enerji seviyelerinin değişimi tespit edilmiş ve bu değişimlere bağlı olarak elektronik durum yoğunlukları, gerçek uzay hesaplamaları kullanılarak hesaplanmıştır. Elektronik durum yoğunluklarının, Fermi enerji seviyesi civarındaki davranışlarından enerji bant aralıkları hesaplanmıştır. Böylece TDKNT'lerin elektronik yapısı boşluk deformasyonlarında, incelenmiştir.

4.3.1 Yöntem Seçimi

Çalışılan TDKNT'lerde, tek boşluk (TB) ve çift boşluk (ÇB) kusurlarının etkisi üç farklı yöntemle incelenmiştir. Birinci yöntemde, TB ve ÇB, kusurlarına sahip TDKNT'lere, 3000MD adımı boyunca doğrudan simülasyon uygulanmıştır (Boşluk). İkinci yöntemde, TB ve ÇB kusurları iki adımda incelenmiştir. Birinci adım da, kusursuz TDKNT'ler 3000MD adımı boyunca dengeye getirilmiştir. İkinci adımda, dengedeki TDKNT'lerde TB ve ÇB kusurları oluşturulup 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır (Denge+Boşluk). Üçüncü yöntemde ise, 3000MD adımı boyunca dengeye getirilmiş kusursuz TDKNT' üzerinde önce TB kusuru oluşturup 3000MD adımı boyunca dengelendikten sonra boşluk kusurunun olduğu bölgede bir boşluk daha oluşturulmuş ve 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır (Denge+Boşluk+Boşluk). Bir MD adımı 1 fs süresine karşılık gelmektedir. Bu üç yöntem ile simülasyon uygulanan (12,0), TDKNT'ün enerji değerlerinin, Fermi enerji seviyesinin ve elektronik durum yoğunluklarının TB ve ÇB kusurlarına bağlı olarak değişimi incelenmiştir.

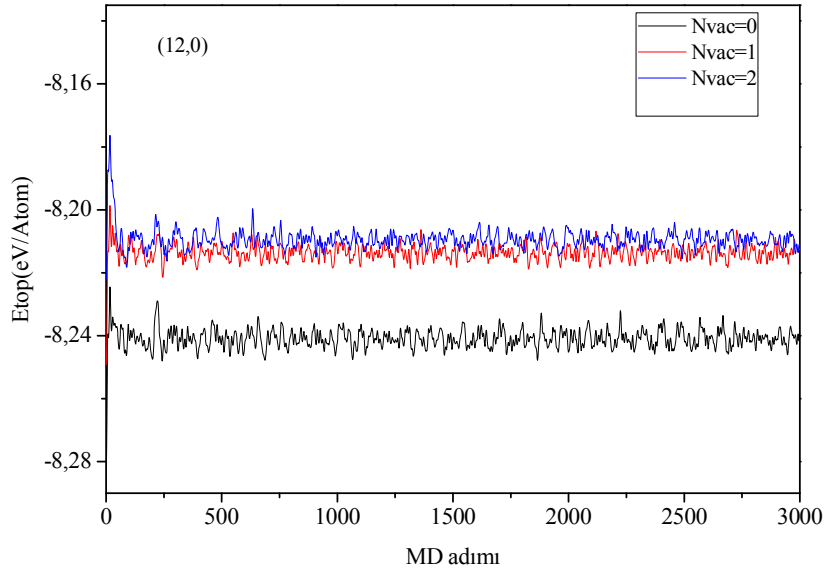
4.3.1.1 Boşluk

Kusursuz, TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'lere, 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır. Simülasyon sonunda C atomlarının, ÇB kusurlarında, beşgen örgüler meydana getirdikleri görülmüştür (Şekil 4. 43).



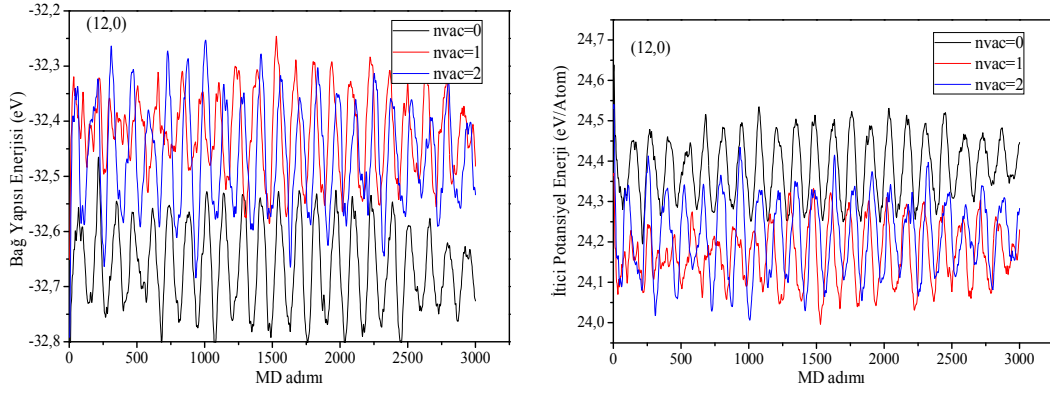
Şekil 4. 43 3000MD adımı sonunda, kusursuz, TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT görüntüleri

Simülasyon boyunca atom başına toplam enerji (E_{tot}) değerlerinin değişimleri grafikler ile tespit edilmiştir (Şekil 4.44).



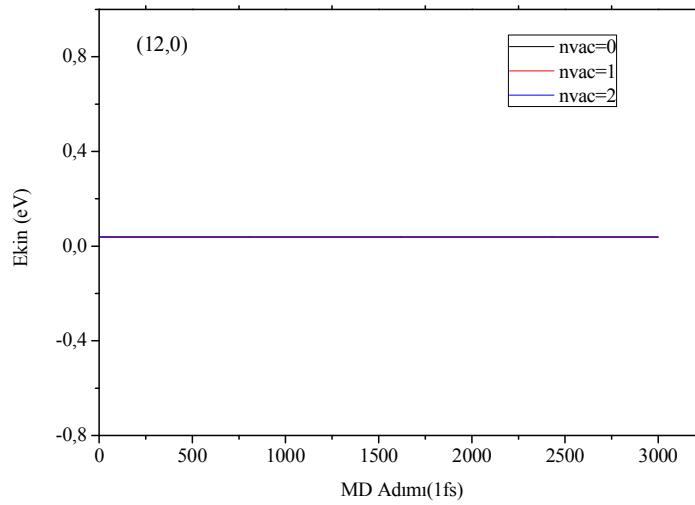
Şekil 4. 44 Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

3000MD adımında sistemin her üç durum içinde dengelendiği görülmüştür. Boşluk sayısının artışına bağlı olarak toplam enerjinin (E_{tot}) arttığı görülmüştür. Kusursuz (12,0) TDKNT ün ortalama atom başına toplam enerjisi -8.241 eV değerinde iken TB kusurunda -8.214 eV, ÇB kusurunda ise -8.209 eV değerine artmaktadır.



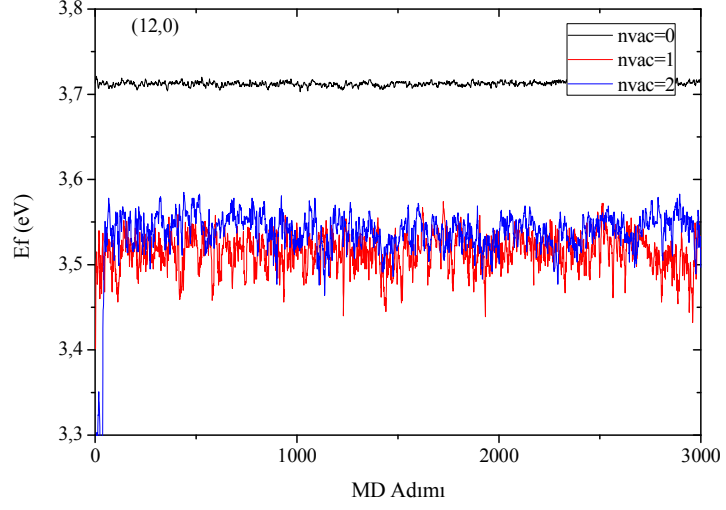
Şekil 4. 45 Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin MD adımına bağlı değişimi

Bant yapısı enerjisi (E_{bs}) ve itici potansiyel enerjinin (E_{rep}) MD adımına bağlı olarak belirli bir değer civarında dengelendiği ve boşluk kusurunun artmasına bağlı olarak bant yapısı enerjisinin arttığı, itici potansiyel enerjinin azaldığı görülmüştür (Şekil 4. 45).



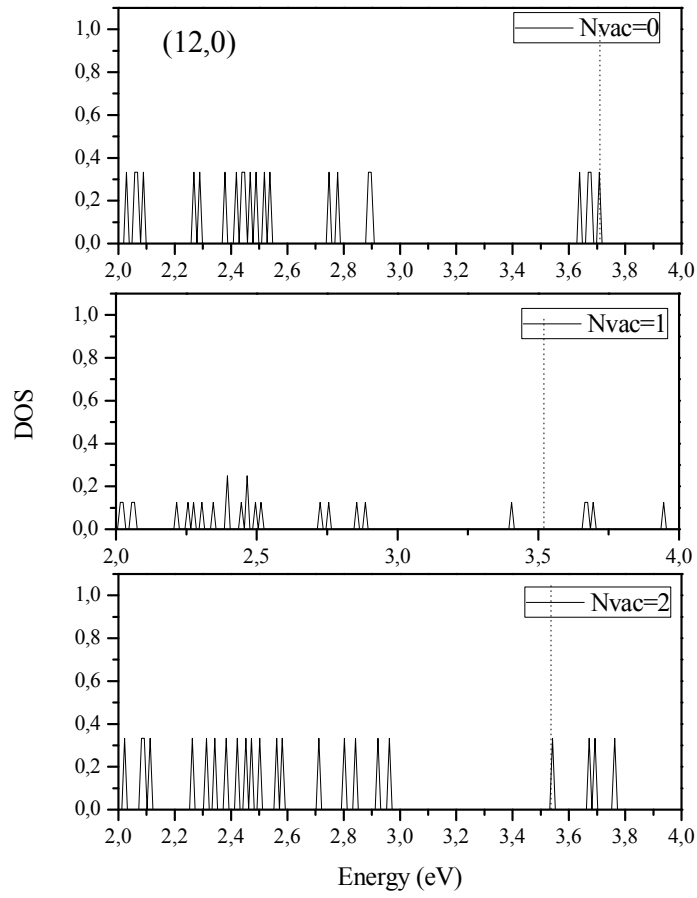
Şekil 4. 46 Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

Kinetik enerji değerinin, MD adımı boyunca değişmediği ve boşluk kusurundan bağımsız olduğu görülmüştür.



Şekil 4. 47 Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi

Şekil 4.47 de, Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi gösterilmiştir. TB ve ÇB Fermi enerji dalgalanmaları kusursuz yapıdaki enerji dalgalanmalarından fazla olmasına rağmen, belirli bir değer civarında dengelenmektedir. Kusursuz (12,0) TDKNT Fermi enerjisi 3,71 eV iken, TB ve ÇB kusurlarında 3,51 eV ve 3,53 eV değerlerine düşmüştür.



Şekil 4. 48 Kusursuz,TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir.

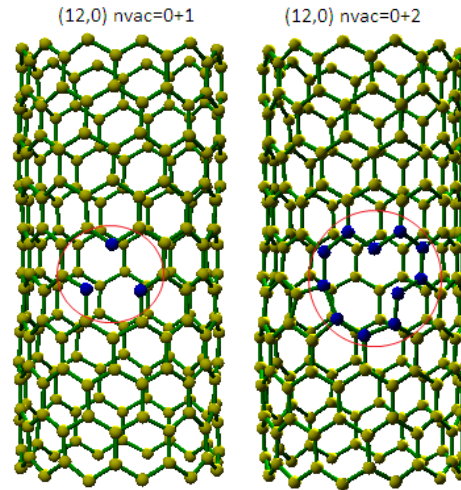
(12,0) TDKNT ün elektronik yapısının boşluk kusurlarına bağlı olarak değişimini incelemek için elektronik durum yoğunluğu grafikleri oluşturuldu. Grafiklerdeki kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir. Elektronik durum yoğunluğunun Fermi enerji seviyesi civarındaki davranışından enerji bant aralığı değerleri tespit edildi. Kusursuz (12,0) TDKNT ün, enerji bant aralığı değeri 0.01 eV olarak ölçüldü ve metalik özellik gösterdiği tespit edildi. TB kusuruna bağlı olarak Fermi enerji seviyesi civarındaki enerji bant aralığı 0.16 eV değerine artmaktadır. ÇB kusuruna bağlı olarak Fermi enerjisi civarında enerji durumları ortaya çıkmaktadır ve enerji bant aralığı 0.02 eV değerine azalmaktadır.

Çizelge 4.4 (12,0) TDKNT'ün TB ve ÇB kusurlarında toplam enerji ve enerji bant aralıkları

	E _{tot} (eV)		E _g (eV)	Atom Sayısı
	Değer	Std Hata		
nvac=0	-8.24088	5.52E-05	0.01	240
nvac=1	-8.21355	4.62E-05	0.16	239
nvac=2	-8.20935	5.86E-05	0,02	238

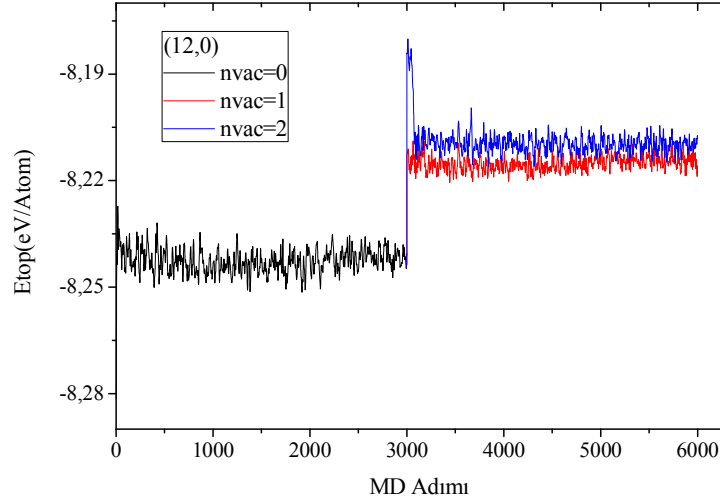
4.3.1.2 Denge+Boşluk

(12,0) TDKNT'ün enerji ve elektronik yapısının, boşluk kusurlarına bağlı olarak incelemek için uygulanan ikinci yöntemde, 3000MD adımı boyunca dengelenmiş olan kusursuz (12,0) TDKNT üzerine, TB kusurlu ve çift boşluk kusurlu olarak 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır. Simülasyonlar sonunda, ÇB kusurlarında, C atomlarının kusur bölgesi civarında beşgen örgüler meydana getirdiği görülmüştür (Şekil 4.49).



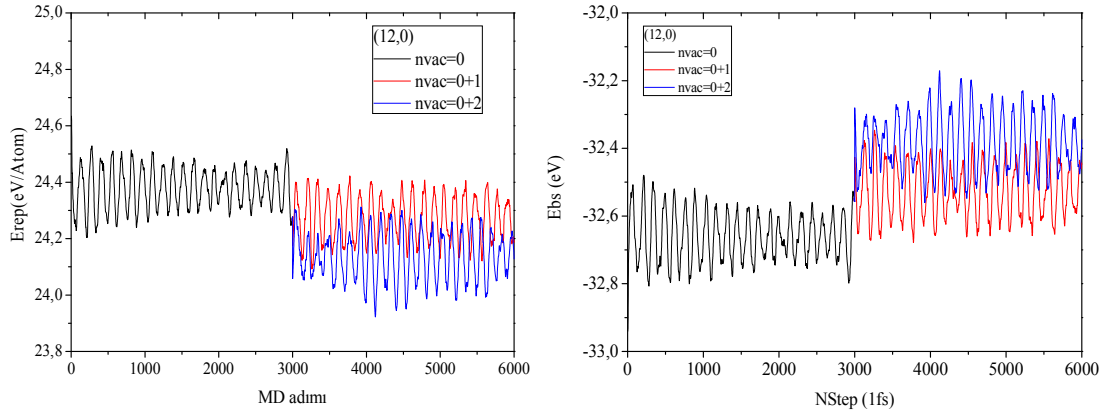
Şekil 4. 49 3000MD adımı denge sonrasında 3000 MD adımı TB ve ÇB kusurlu (13,0) TDKNT görüntüleri

Denge ve denge üzerine boşluk simülasyonları boyunca atom başına toplam enerji (E_{tot}) değerlerinin değişimleri grafikler ile tespit edilmiştir (Şekil 4.50).



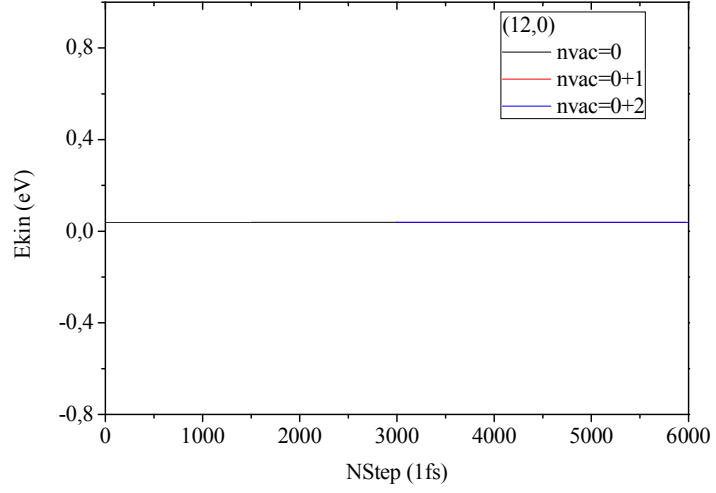
Şekil 4. 50 TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

Toplam enerji değerlerinin, dengelendiği görülmüştür. TB kusurlu (12,0) TDKNT oralma toplam enerji değeri TB kusurunda, -8.215 eV değerine ve ÇB kusurunda -8.209 eV değerine artmaktadır. Bu enerji değerleri, birinci yöntemde TB ve ÇB kusurları için elde edilen ortalama toplam enerji değerleri ile uyumludur.



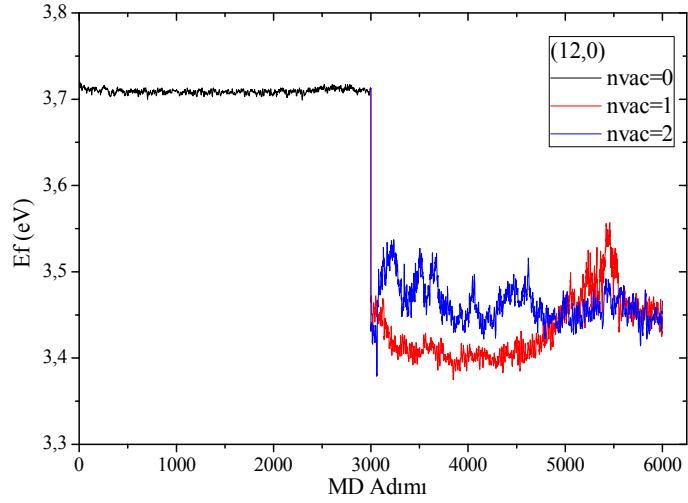
Şekil 4. 51 TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin MD adımına bağlı değişimi

Bant yapısı enerjisi (Ebs) ve itici potansiyel enerjinin (Erep) MD adımına bağlı olarak belirli bir değer civarında dengelendiği ve boşluk kusurunun artışına bağlı olarak bant yapısı enerjisinin arttığı, itici potansiyel enerjinin azaldığı görülmüştür (Şekil 4. 51).



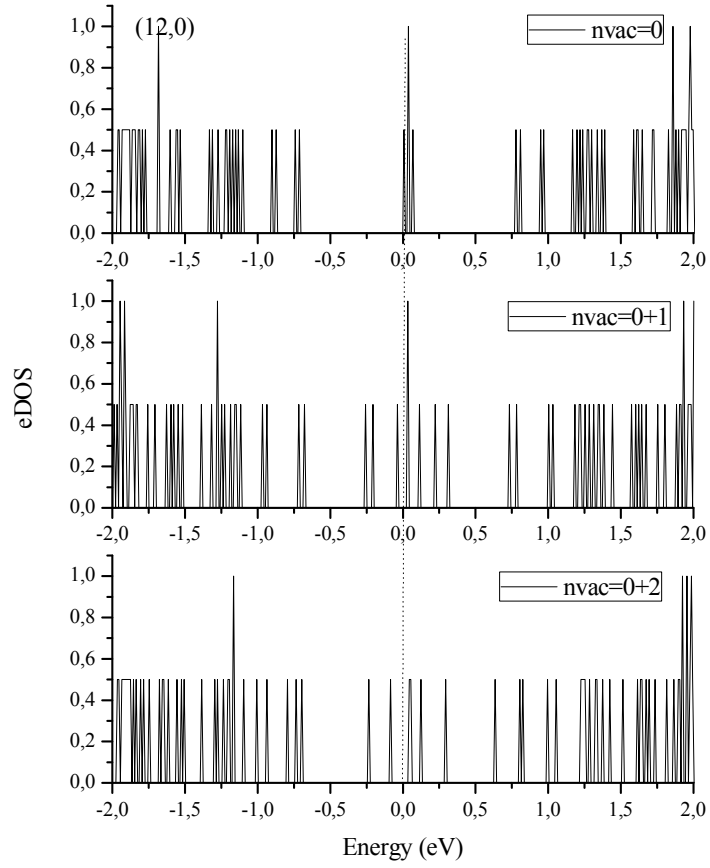
Şekil 4. 52 TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

Kinetik enerji değerinin, MD adımı boyunca değişmediği ve boşluk kusurundan bağımsız olduğu görülmüştür (Şekil 4. 52).



Şekil 4. 53 TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi

Fermi enerji seviyesi, TB ve ÇB kusurlarını bağlı olarak azalmıştır. Fermi enerji seviyesindeki düşüş TB kusurunda, ÇB kusurlarında göre daha fazladır (Şekil 4. 53).



Şekil 4. 54 Kusursuz, TB ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir

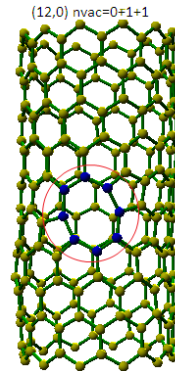
(12,0) TDKNT ün elektronik yapısının boşluk kusurlarına bağlı olarak değişimini incelemek için elektronik durum yoğunluğu grafikleri oluşturuldu. Elektronik durum yoğunluğunun Fermi enerji seviyesi civarındaki davranışından enerji bant aralığı değerleri tespit edildi. (12,0) TDKNT 'ün enerji bant aralığının boşluk sayısına bağlı olarak arttığı ve TB kusurunda 0.07 eV değerine ÇB kusurunda 0.13 eV değerine ulaştığı görülmüştür. TB ve ÇB kusurlarında, (12,0) TDKNT ün TB ve ÇB kusurlarında enerji bant aralığının artmasına rağmen metalik davranışının değişmediği tespit edilmiştir.

Çizelge 4.5 (12,0) TDKNT'ün TB ve ÇB kusurlarında toplam enerji ve enerji bant aralıkları

	Etot(eV)		Eg(eV)	Atom Sayısı
	Değer	Std Hata		
nvac=0+1	-8.21512	3.68E-05	0.07	239
nvac=0+2	-8.20922	7,44E-05	0.13	238

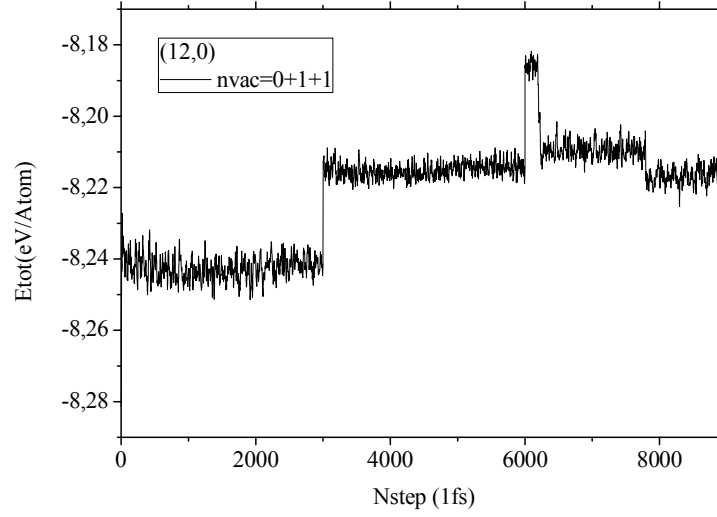
4.3.1.3 Denge + Boşluk + Boşluk:

Üçüncü yöntem olarak, 3000MD adımı boyunca dengelenmiş olan kusursuz (12,0) TDKNT üzerinde öncelikle bir boşluk oluşturulmuş ve 3000MD adımı daha simülasyon uygulanıp bu sisteminde dengeye gelmesi sağlanmıştır. Dengedeki TB kusurlu bu TDKN üzerinde boşluk kusuru civarında bir boşluk daha oluşturulmuş ve 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır. Simülasyon sonucunda, boşluk kusuru bölgesinde C atomlarının 2 tane beşgen ve bir tane sekizgen bağ yaptığı görülmüştür (Şekil 4.55).

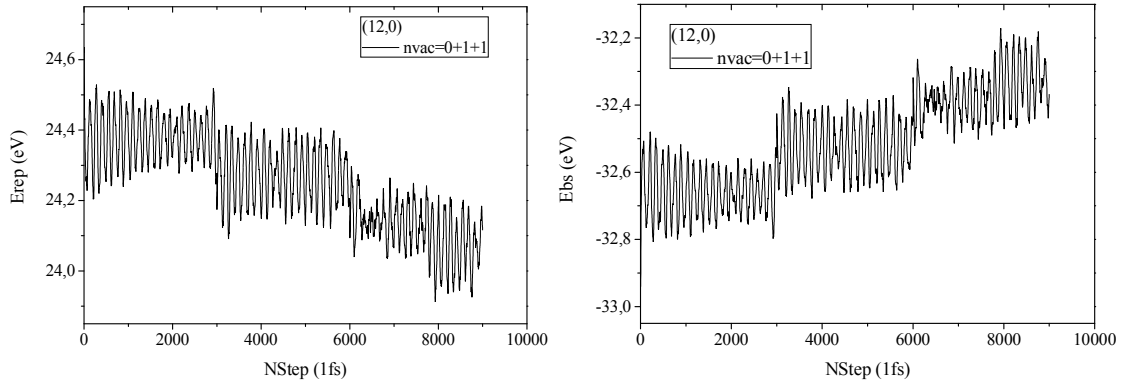


Şekil 4. 55 TB kusuru üzerine uygulanan ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün simülasyon sonun da meydana gelen görüntüsü

Sistemin denge durumunu belirleyebilmek için simülasyon boyunca atom başına toplam enerji değerinin MD adım göre değişimi grafik olarak belirlendi. ÇB kusurunda, yapının 3000MD adımı ile dengelenemediği görülmüştür (Şekil 4. 56).

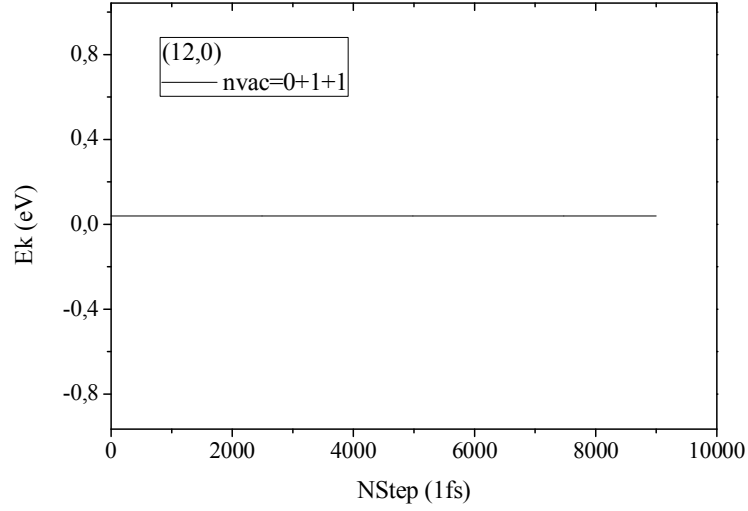


Şekil 4. 56 ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Toplam enerjisinin MD adımına bağlı değişimi



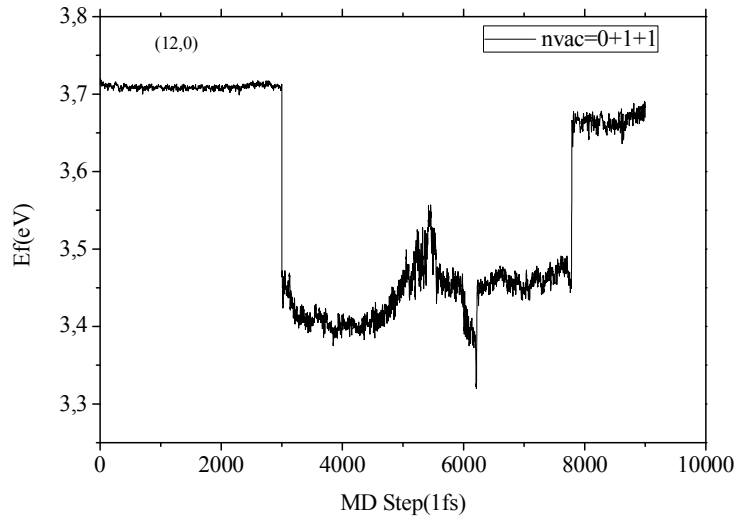
Şekil 4. 57ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün bant yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

Bant yapısı enerjisi (Ebs) ve itici potansiyel enerjisinin (Erep) MD adımına bağlı olarak belirli bir değer civarında dengelendiği ve boşluk kusurunun artışına bağlı olarak bant yapısı enerjisinin arttığı, itici potansiyel enerjisinin azaldığı görülmüştür (Şekil 4. 57).



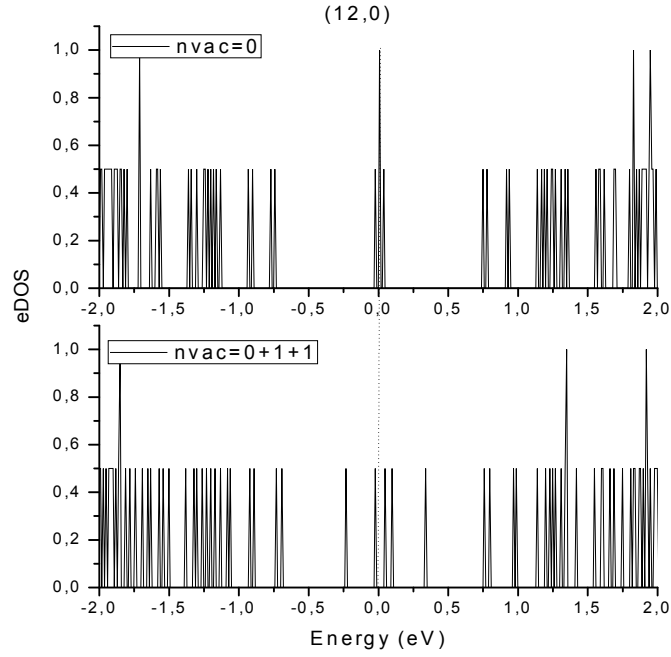
Şekil 4. 58 ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün kinetik enerjisinin MD adımına bağlı değişimi

Kinetik enerji değerinin, MD adımı boyunca değişmediği ve boşluk kusurundan bağımsız olduğu görülmüştür (Şekil 4.58).



Şekil 4. 59 ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişimi

Toplam enerjinin MD adıma göre değişiminde görülen dengesizlik Fermi enerji seviyesinin MD adımına bağlı değişiminde de görülmektedir (Şekil 4. 59). Fermi enerji seviyesi, ÇB kusurunun olduğu 6000-9000MD adımları arasında farklı iki denge seviyesi civarında değerler almaktadır.



Şekil 4. 60 Kusursuz ve ÇB kusurlu (12,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunlukları. Kesikli çizgiler Fermi enerji seviyesini göstermektedir

Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde, ÇB kusurlu yapının Fermi enerji seviyesi civarındaki enerji bant aralığının kusursuz yapıdakinden daha geniş olduğu görülmektedir. Bu enerji bant aralığı değeri 0.07 eV olarak ölçülmüştür. Fakat bu değer ikinci yöntemde elde edilen ÇB kusurlu yapının enerji bant aralığı değeri olan 0.13 eV değerinden daha küçüktür ve ikinci yöntemde elde edilen TB kusurlu yapının enerji bant aralığı değerine uygundur.

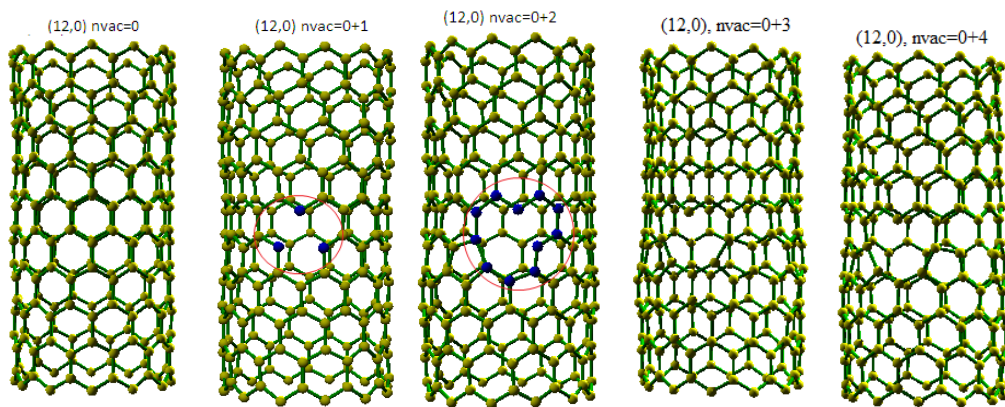
Sistem üzerine deformasyon uygulanabilmesi için öncelikle sistemin uygun Md adımı boyunca dengeye getirilmesi gerekmektedir. Daha sonra sistem üzerine deformasyon uygulanmaktadır. Çok boşluk deformasyonlarında tek boşluk deformasyonunun üzerine başka boşluk deformasyonunun uygulanması, deformasyonlu sistemi dengeye getirememektedir. Bu nedenle bundan sonraki simülasyon çalışmalarında kusursuz TDKNT'ler önce dengeye getirilmiş daha sonra atomik boşluklar oluşturularak simülasyona devam edilmiştir.

4.3.2 Zigzag TDKNT'lerin Enerji ve Elektronik Yapılarına, Nanotüp Eksenine Dik Oluşan Boşlukların Etkisi

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin, atom başına toplam enerjilerinin, Fermi enerji seviyelerinin, elektronik durum yoğunluklarının ve enerji bant aralıklarının boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değişimleri 0,1K, 300K ve 1200K sıcaklıklarda incelenmiştir. Çalışmada, 240 atomundan oluşan (12,0), 260 C atomundan oluşan (13,0) ve 280 C atomundan oluşan (14,0) TDKNT'ler kullanılmıştır. TDKNT'ler 20 tabakadan oluşmaktadırlar ve boyları 20Å dır. Simülasyonlarda sıcaklık değerleri 0,1K, 300K ve 1200K olarak alınmıştır. Simülasyonlar iki adımda gerçekleştirilmiştir. Birinci adımda, kusursuz nanotüpler 3000 moleküler dinamik (MD) adımı (1 MD adımı= 1 fs) boyunca dengeye getirilmiştir. İkinci adımda, dengedeki kusursuz KNT'lerde sırası ile 1,2,3,4 ve 5 atom boşlukları meydana getirilerek 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanmıştır.

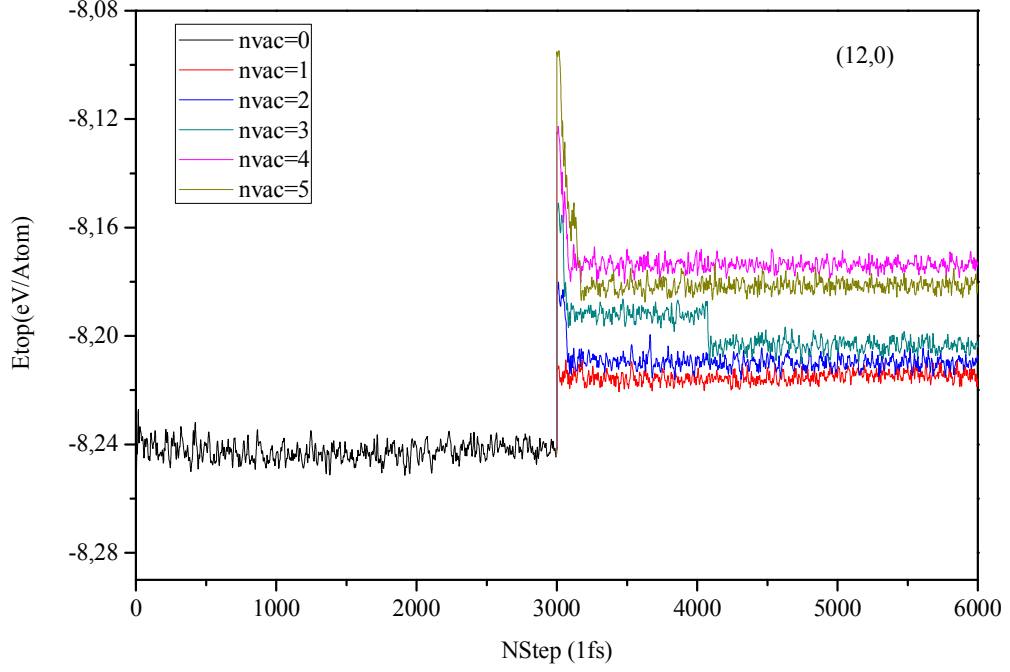
4.3.2.1 (12,0) TDKNT

(12,0) TDKNT'nin yarıçapı 4,71Å dır. Kusursuz (12,0) TDKNT, metalik özellik göstermektedir. Enerji bant aralığı 300K sıcaklıkta 0,01eV olarak ölçülmüştür. 3000MD adımı boyunca dengeye getirildikten sonra sırasıyla 1,2,3,4 ve 5 adet karbon (C) atomu çıkartılarak 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanarak yeniden dengeye getirilmiştir. Çalışma 0,1K, 300K ve 1200K sıcaklıklarda yapılmıştır. Dengedeki kusursuz ($n_{vac}=0$) ve kusurlu ($n_{vac}=1,2,3,4,5$) (12,0) TDKNT resimleri Şekil 4. 61' de verilmiştir.



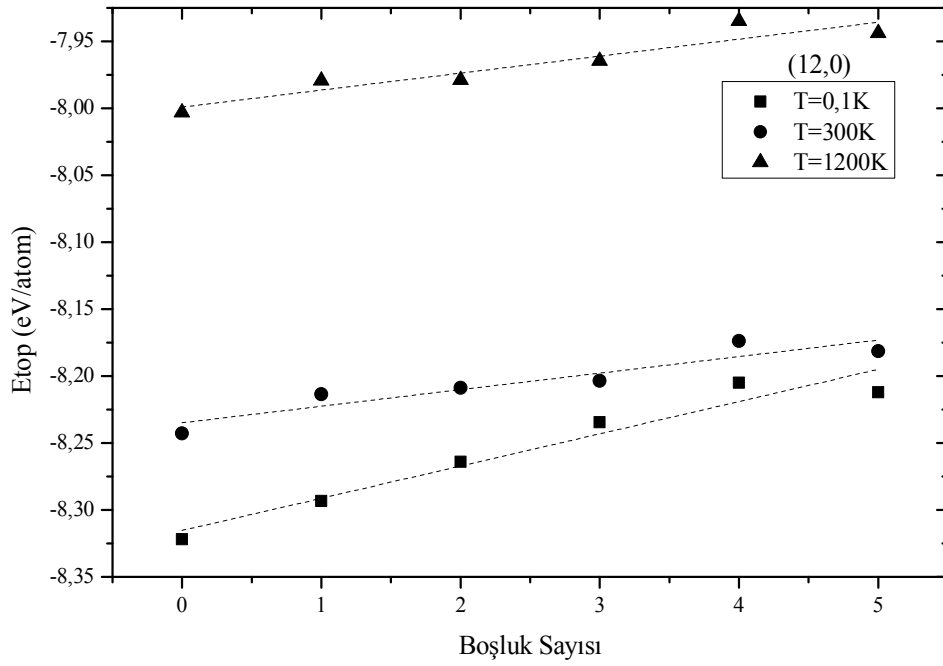
Şekil 4. 61 Kusursuz ve boşluk kusurlu (12,0) TDKNT görüntüleri

Denge ve denge üzerine boşluk simülasyonları boyunca atom başına toplam enerji (E_{top}) değerlerinin değişimleri grafikler ile tespit edilmiştir (Şekil 4. 62).



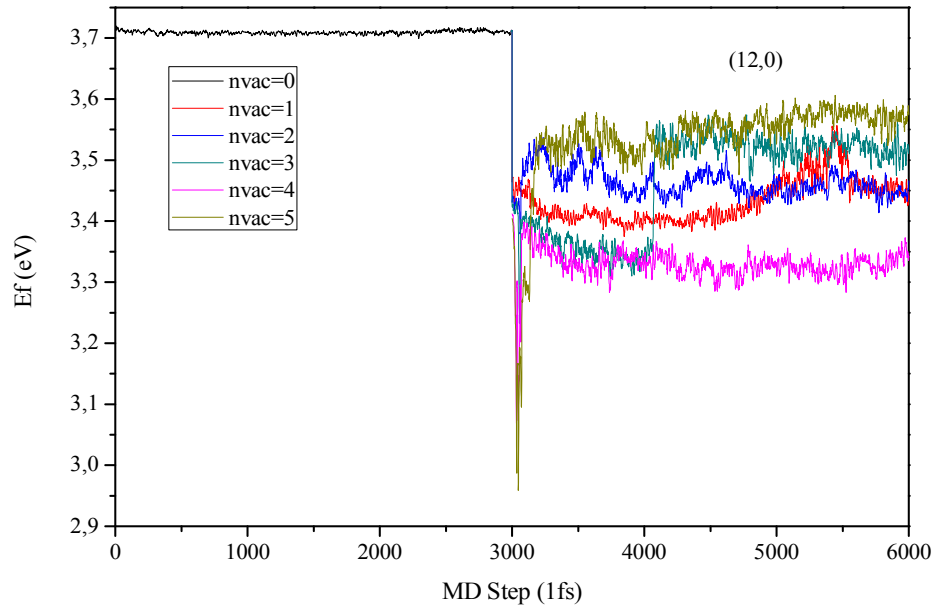
Şekil 4. 62 (12,0) TDKNT'ün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (E_{top}), MD adımına bağlı olarak değişimi

Şekil 4.63'de $T=0,1K$, $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıkta (12,0) TDKNT'ün ortalama atom başına toplam enerjisinin boşluk kusurlarına bağlı olarak doğrusal arttığı görülmüştür. Doğrusal artışların eğimleri sıcaklığa bağlı olarak değişmektedir.

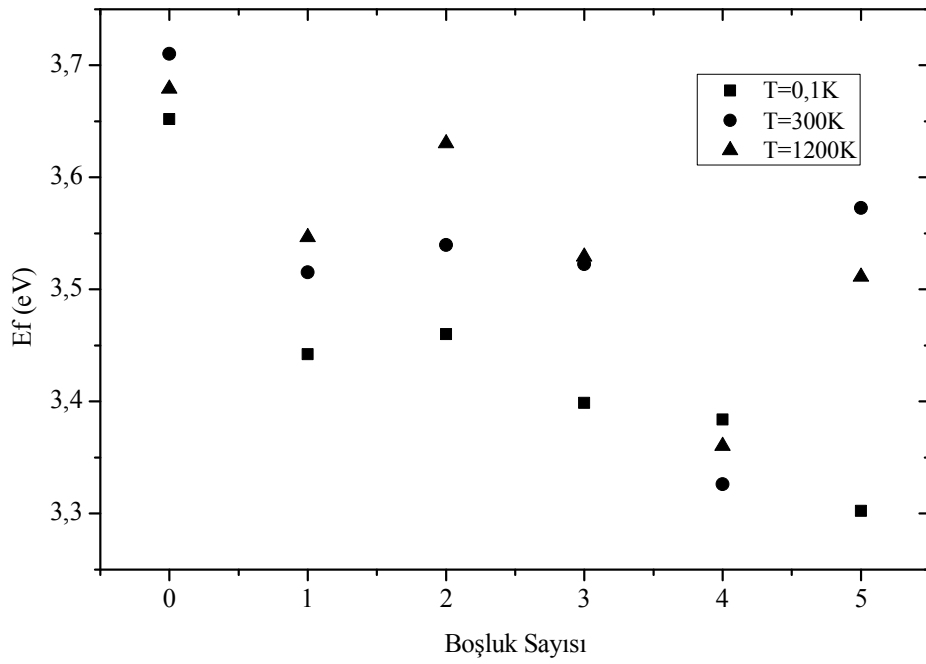


Şekil 4. 63 (12,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (E_{top}), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

Şekil 4. 64'de Fermi enerji seviyesinin (E_f) değişik boşluk deformasyonlarda, MD adımına bağlı olarak değişimi verilmiştir. Kusursuz (12,0) TDKNT'lerin Fermi enerji seviyesi 3,71eV olarak tespit edilmiştir. Boşluk deformasyonuna bağlı olarak Fermi enerji seviyesinin azaldığı görülmektedir. Fakat boşluk sayısı ile Fermi korelasyon görülmemektedir (Şekil 4.65).

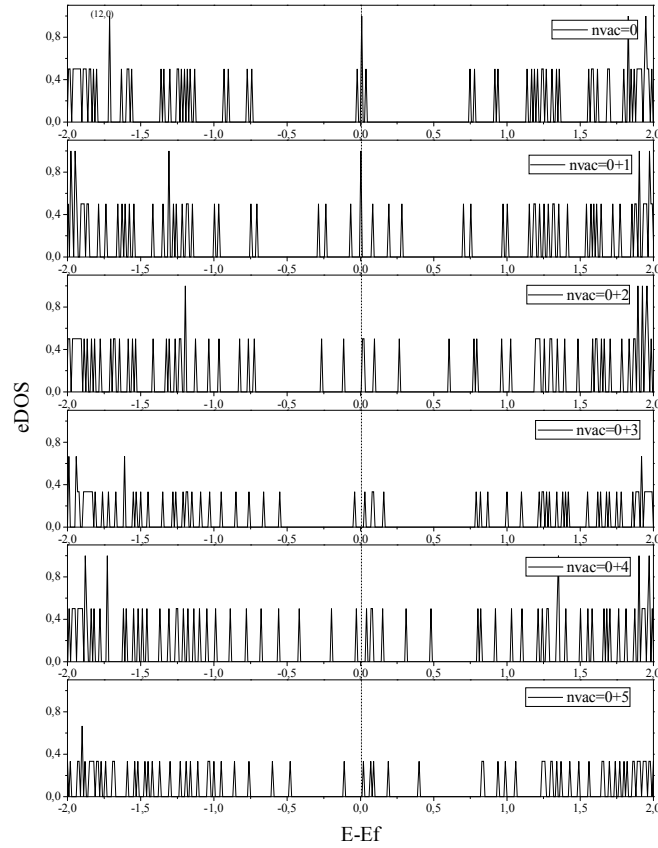


Şekil 4. 64 (12,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerji seviyesinin(E_f), MD adımına bağlı olarak değişimi

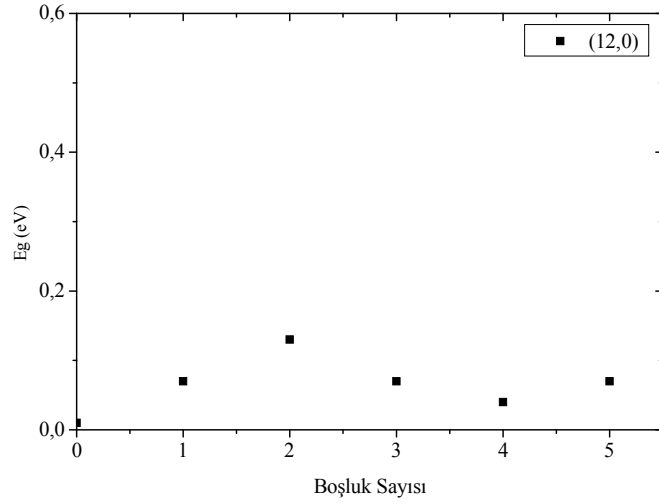


Şekil 4. 65 (12,0) TDKNT Fermi enerji seviyesinin (E_f) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

Değişik boşluk deformasyonlarında, elektronik durum yoğunlukları (eDOS) grafikleri oluşturulmuştur (Şekil 4. 66). Elektronik durum yoğunluklarının boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değiştiği tespit edilmiştir. Elektronik durum yoğunluklarının Fermi enerji seviyesi(E_f) civarındaki davranışından enerji bant aralıkları (E_g) belirlenmiştir (Şekil 4. 67).

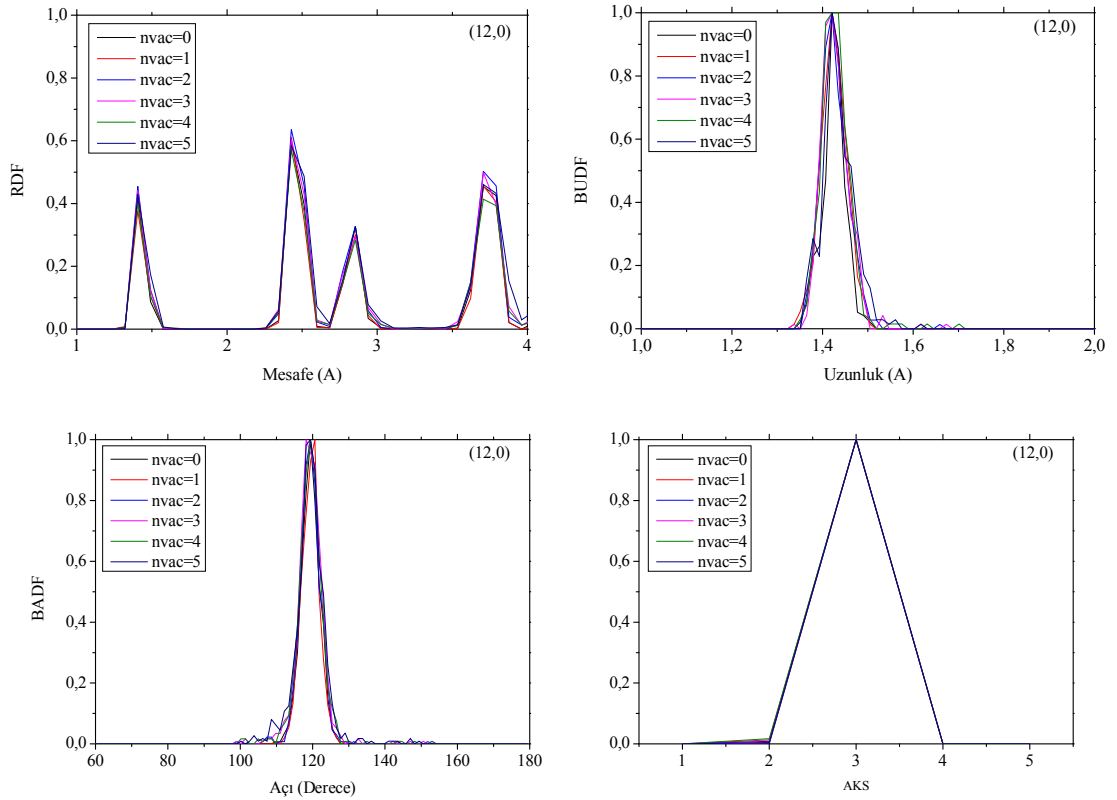


Şekil 4. 66 (12,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri



Şekil 4. 67 (12,0) TDKNT enerji bant aralığının (E_g), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

(12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,01 eV olarak tespit edilmiştir. Bu değere bağlı olarak (12,0) TDKNT metalik özellik göstermektedir. İki boşluk deformasyonunda enerji bant aralığı 0,13eV değerine artmaktadır. 4 boşluk deformasyonunda 0,04 eV değerini almaktadır.

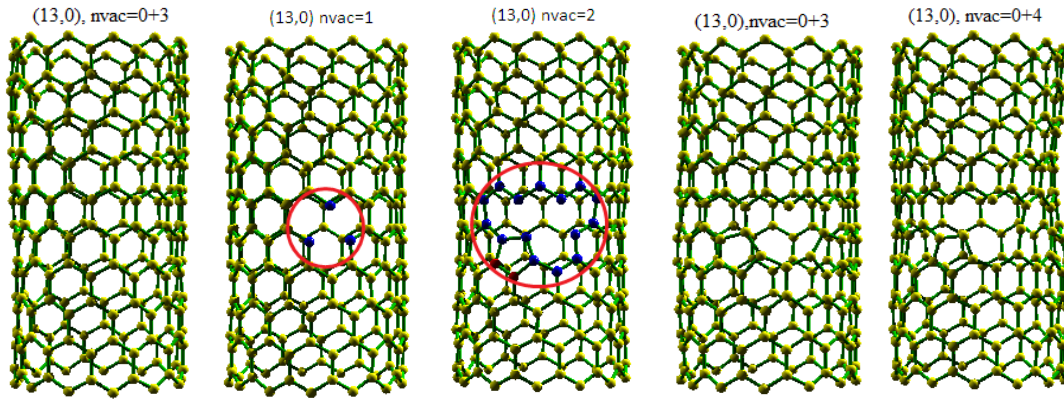


Şekil 4. 68 (12,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının değişim grafikleri

Şekil 4.68’de (12,0) TDKT’ün RDF, BUDF, BADF ve AKS dağılım grafikleri verilmiştir. Kusursuz (12,0) TDKNT’ün, sırası ile 1,40Å, 2,43Å ve 2,85Å olan 1., 2. ve 3. komşu mesafeleri, TDKNT eksen doğrultusunda oluşturulan boşluk kusurlarına bağlı olarak değişim göstermemiştir. Benzer şekilde 1,42 Å olan bağ uzunluğu, 119,4° olan bağ açısı dağılım değerlerinde boşluk kusurlarına bağlı olarak değişmemiştir. Kusur (12,0) TDKNT’ün 3 olan atomik koordinasyon sayısı, boşluk kusurlarında 2 değeri içinde dağılım vermiştir. Bu değer, boşluk civarındaki bazı atomların koşulları ile 2 bağ yaptığını göstermektedir.

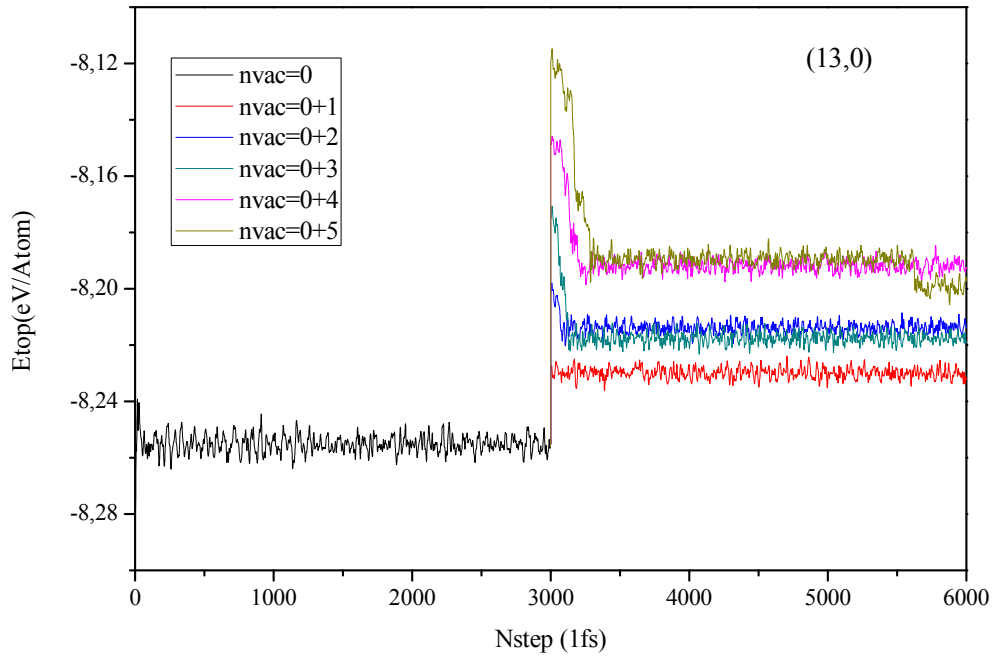
4.3.2.2 (13,0) TDKNT

(13,0) TDKNT’ün yarıçapı 5,1Å dır. Kusursuz (13,0) TDKNT, yarıiletken özellik göstermektedir. Enerji bant aralığı 0,44eV olarak ölçülmüştür. 3000MD adımı boyunca dengeye getirildikten sonra sırasıyla 1,2,3,4 ve 5 adet karbon (C) atomu çıkartılarak 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanarak yeniden dengeye getirilmiştir. Dengedeki kusursuz (nvac=0) ve kusurlu (nvac=1,2,3,4,5) (13,0) TDKNT resimleri Şekil 4.69’de verilmiştir.



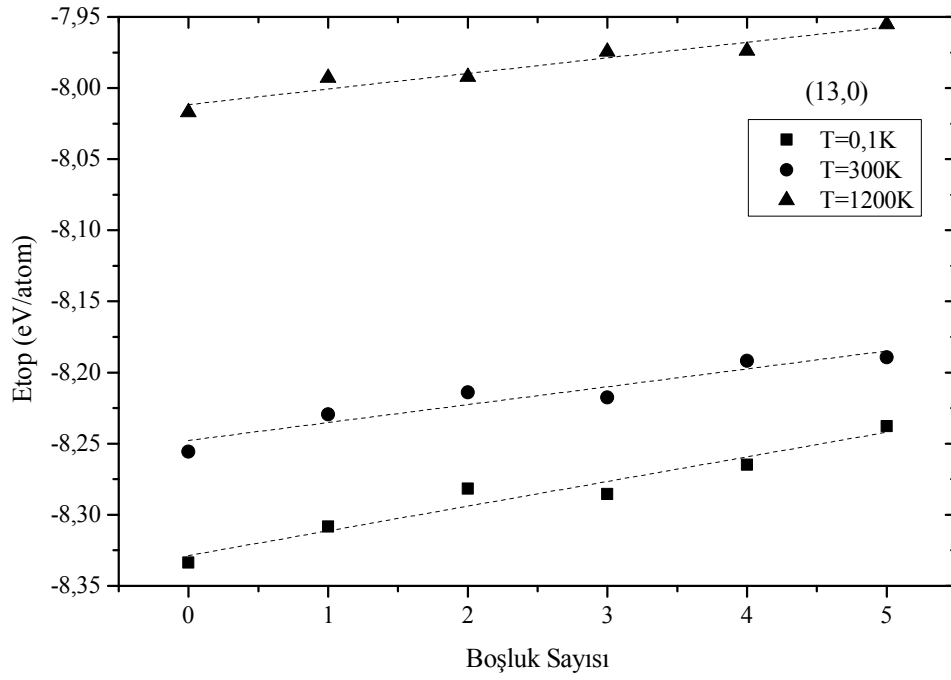
Şekil 4. 69 Kusursuz ve boşluk kusurlu (13,0) TDKNT görüntüleri

Denge ve denge üzerine boşluk simülasyonları boyunca atom başına toplam enerji (Etot) değerlerinin değişimleri grafikler ile tespit edilmiştir (Şekil 4. 70).



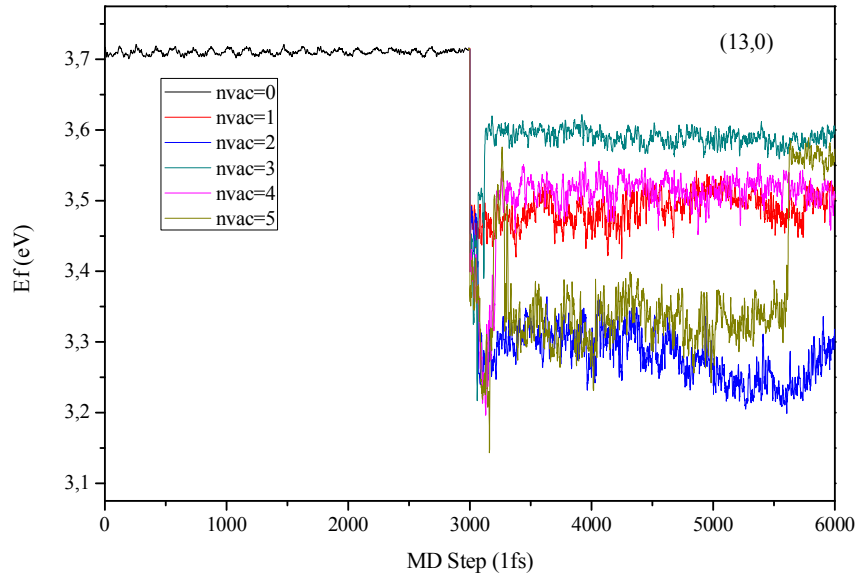
Şekil 4. 70 (13,0) TDKNT'nün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (E_{top}), MD adımına bağlı olarak değişimi

Atom başına toplam enerjinin tüm boşluk deformasyonlarında dengelendiği belirlenmiştir. Boşluk sayısının artışına bağlı olarak ortalama enerji değerleri artmaktadır. $T=0,1K$, $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıkta ortalama toplam enerjinin, boşluk sayısına bağlı olarak değişimi Şekil 4.71'de verilmiştir. Ortalama toplam enerji değerleri boşluk sayısı ile doğrusal olarak artmaktadır. Bu doğrusal artışların eğimleri sıcaklık değerine bağlı olarak değişmektedir.

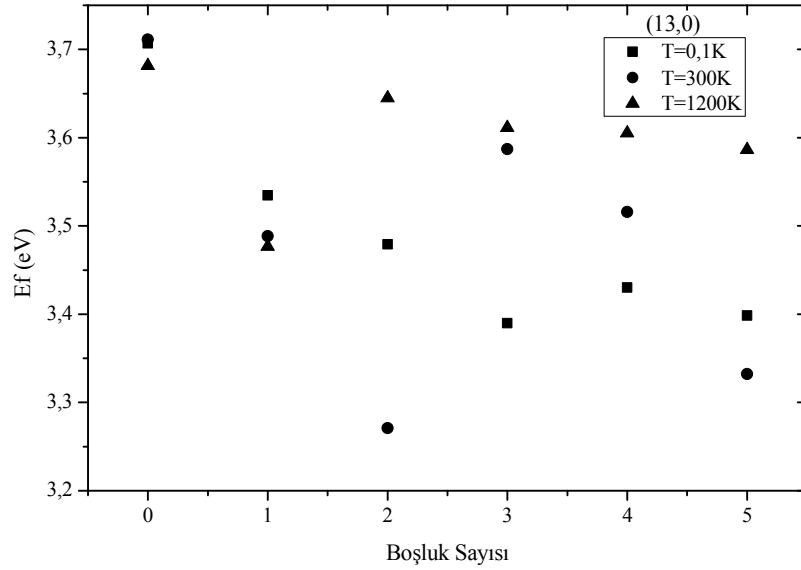


Şekil 4. 71 (13,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (E_{tot}), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

Şekil 4. 72’de Fermi enerji seviyesinin (E_f) değişik boşluk deformasyonlarda, MD adımına bağlı olarak değişimi verilmiştir. Kusursuz (13,0) TDKNT’lerin Fermi enerji seviyesi 3,71eV olarak tespit edilmiştir. Boşluk deformasyonuna bağlı olarak Fermi enerji seviyesinin iki boşluk deformasyonuna kadar azaldığı üç boşluk deformasyonunda arttığı bundan sonra dört ve beş boşluk deformasyonunda tekrar azaldığı görülmektedir (Şekil 4.73).



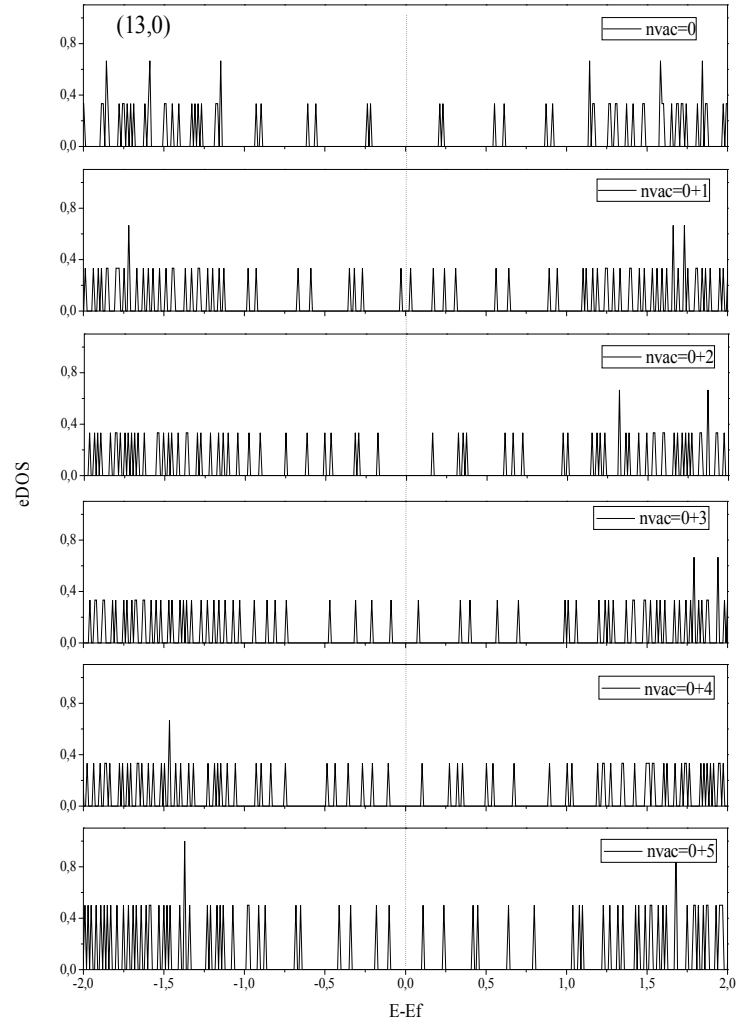
Şekil 4. 72 (13,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerjisi seviyesinin(E_f), MD adımına bağlı olarak değişimi



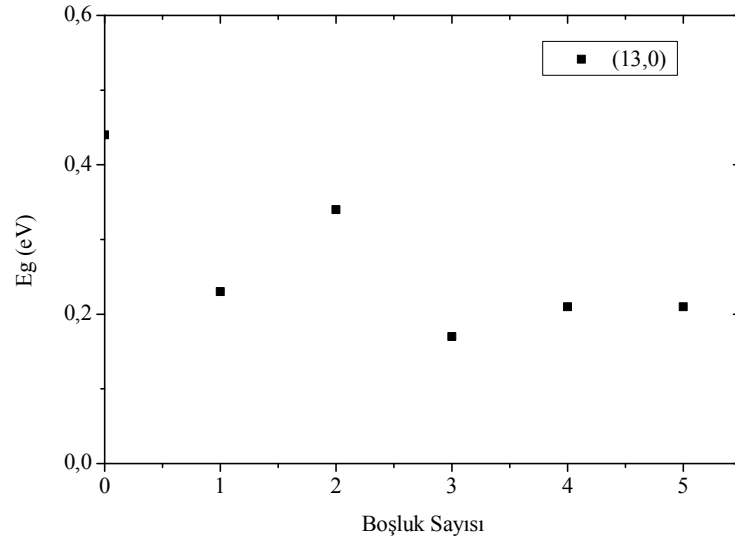
Şekil 4. 73 (13,0) TDKNT Fermi enerjisi seviyesinin (E_f) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

Değişik boşluk deformasyonlarında, elektronik durum yoğunlukları (eDOS) grafikleri oluşturulmuştur (Şekil 4. 74). Elektronik durum yoğunluklarının boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değiştiği tespit edilmiştir. Elektronik durum

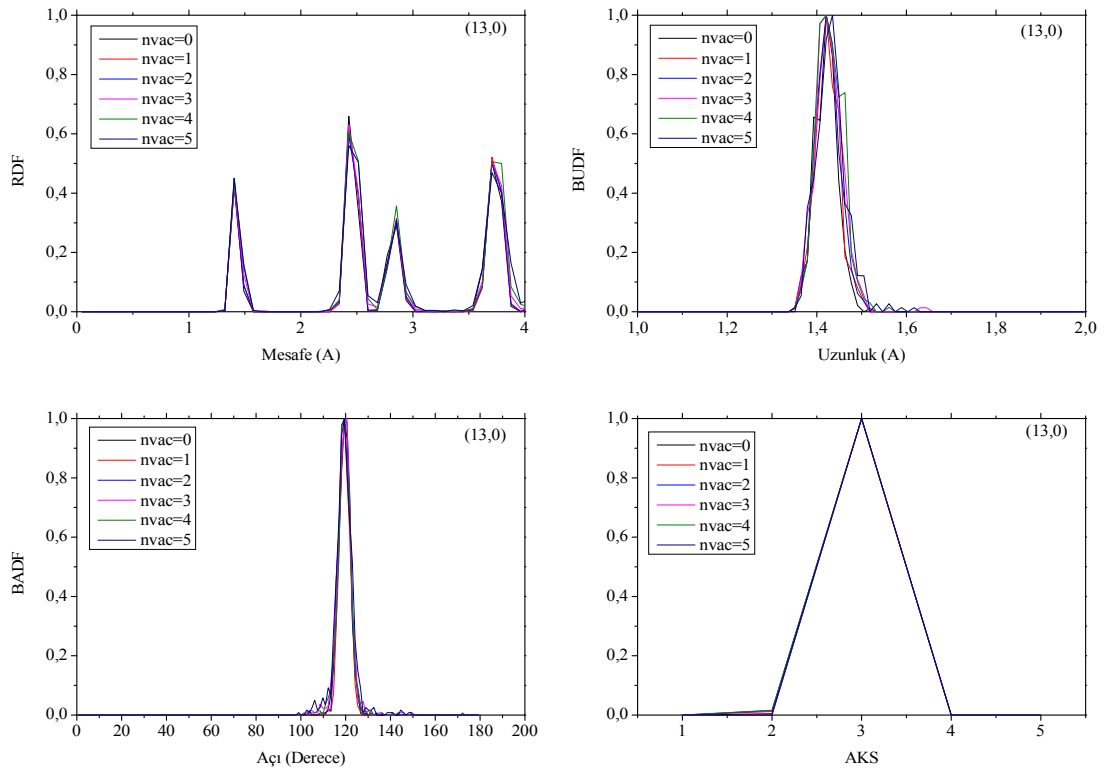
yoğunluklarının Fermi enerji seviyesi (E_f) civarındaki davranışından enerji bant aralıkları (E_g) belirlenmiştir (Şekil 4. 75).



Şekil 4. 74 (13,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri



Şekil 4. 75 (13,0) TDKNT enerji bant aralığının (E_g), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi. Kusursuz (13,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,44eV olarak tespit edilmiştir. Buna bağlı olarak (13,0) TDKNT, yarıiletken özellik göstermektedir. Boşluk deformasyonlarına bağlı olarak enerji bent aralığı değerleri azalmaktadır. Üç boşluk deformasyonunda enerji bant aralığı 0,17eV değerine düşmektedir.

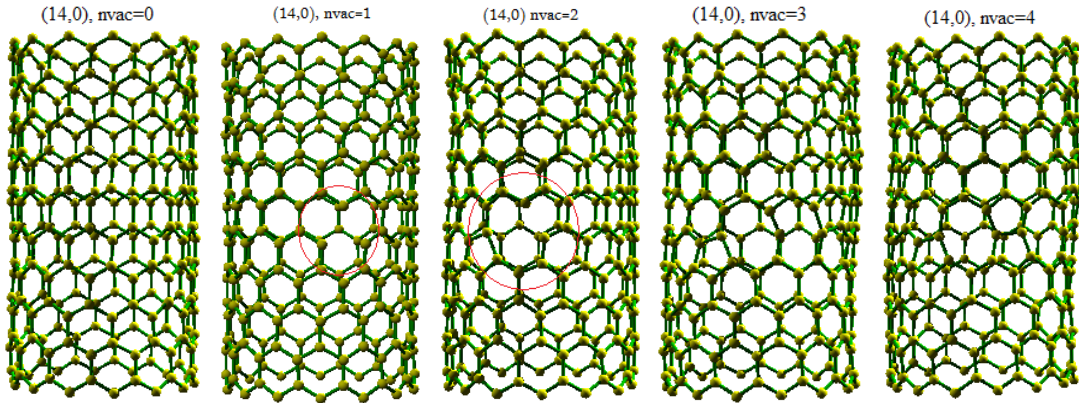


Şekil 4. 76 (13,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının değişim grafikleri

Kusursuz (13,0) TDKNT'ün, sırası ile 1,40Å, 2,43Å ve 2,85Å olan 1., 2. ve 3. komşu mesafeleri, TDKNT eksen doğrultusunda oluşturulan boşluk kusurlarına bağlı olarak değişim göstermemiştir. Benzer şekilde 1,42 Å olan bağ uzunluğu, 119,4° olan bağ açısı dağılım değerlerinde boşluk kusurlarına bağlı olarak değişmemiştir. Kusur (12,0) TDKNT'ün 3 olan atomik koordinasyon sayısı, boşluk kusurlarında 2 değeri içinde dağılım vermiştir. Bu değer, boşluk civarındaki bazı atomların koşulları ile 2 bağ yaptığını göstermektedir.

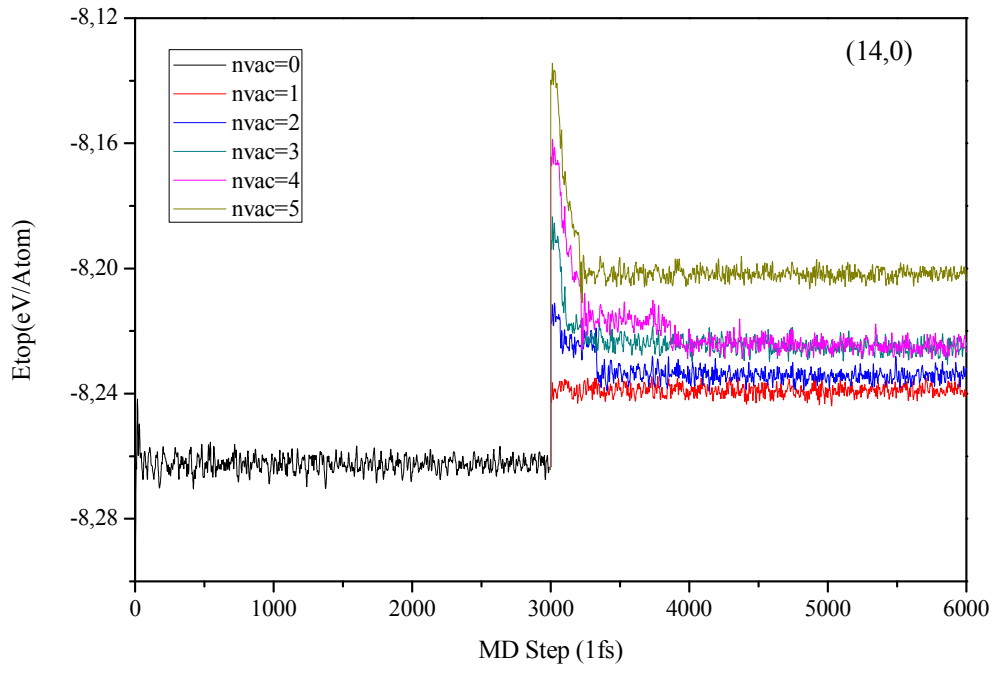
4.3.2.3 (14,0) TDKNT

(14,0) TDKNT'ün yarıçapı 5,1Å dır. Kusursuz (14,0) TDKNT, yarıiletken özellik göstermektedir. Enerji bant aralığı 0,55eV olarak ölçülmüştür. 3000MD adımı boyunca dengeye getirildikten sonra sırasıyla 1,2,3,4 ve 5 adet karbon (C) atomu çıkartılarak 3000MD adımı boyunca simülasyon uygulanarak yeniden dengeye getirilmiştir. Dengedeki kusursuz (nvac=0) ve kusurlu (nvac=1,2,3,4,5) (14,0) TDKNT resimleri Şekil 4.77'de verilmiştir.



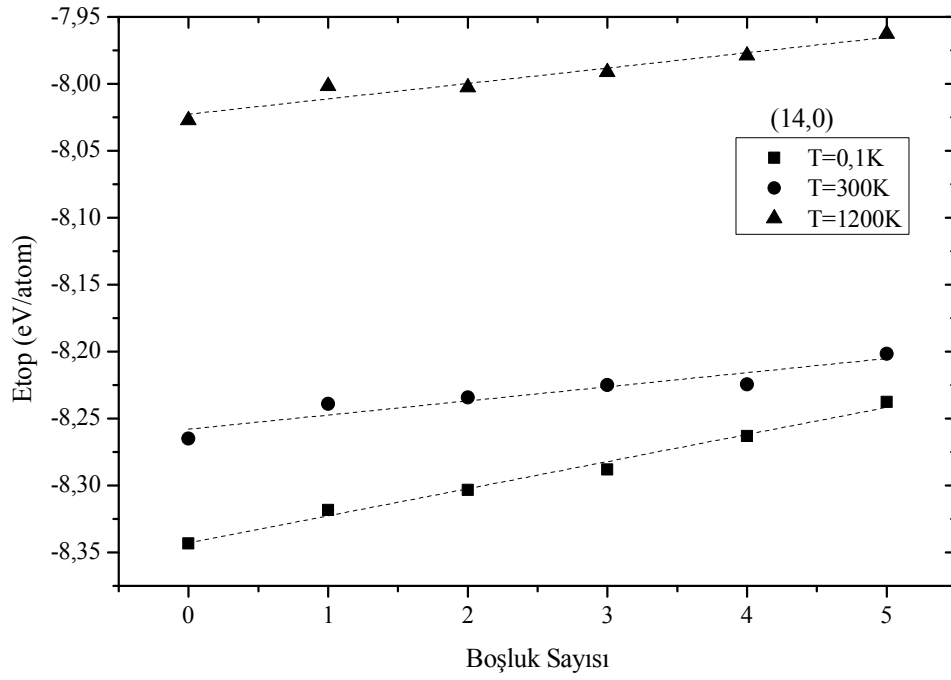
Şekil 4. 77 Kusursuz ve boşluk kusurlu (14,0) TDKNT görüntüleri

Denge ve denge üzerine boşluk simülasyonları boyunca atom başına toplam enerji (Etot) değerlerinin değişimleri grafikler ile tespit edilmiştir (Şekil 4.78).



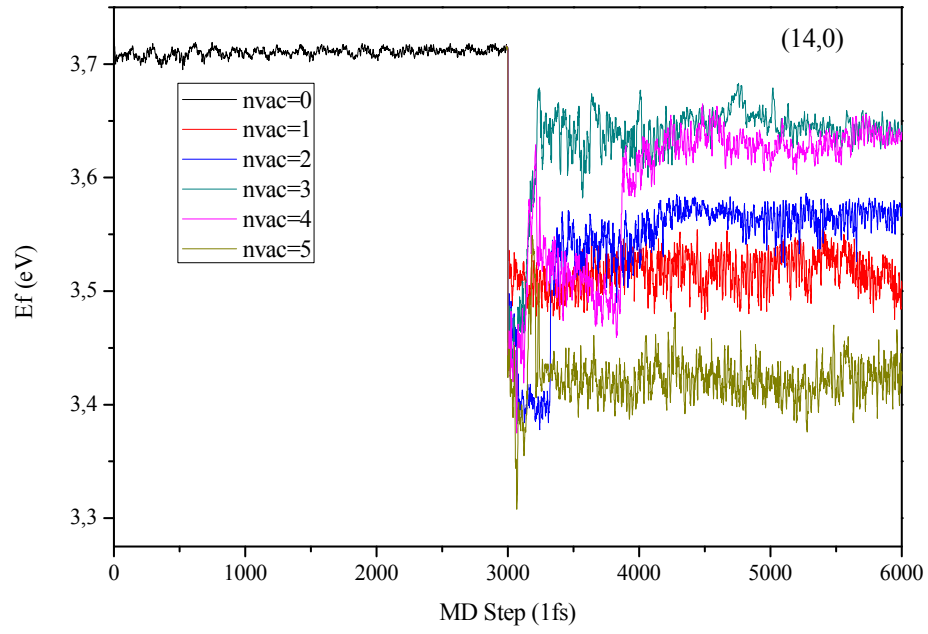
Şekil 4. 78 (14,0) TDKNT'nün boşluk deformasyonlarında, atom başına toplam enerjisinin (E_{tot}), MD adımına bağlı olarak değişimi

Atom başına toplam enerjinin tüm boşluk deformasyonlarında dengelendiği belirlenmiştir. Boşluk sayısının artışına bağlı olarak ortalama enerji değerleri artmaktadır. Ortalama toplam enerjinin, boşluk sayısına bağlı olarak değişimi Şekil 4. 79 'de verilmiştir.

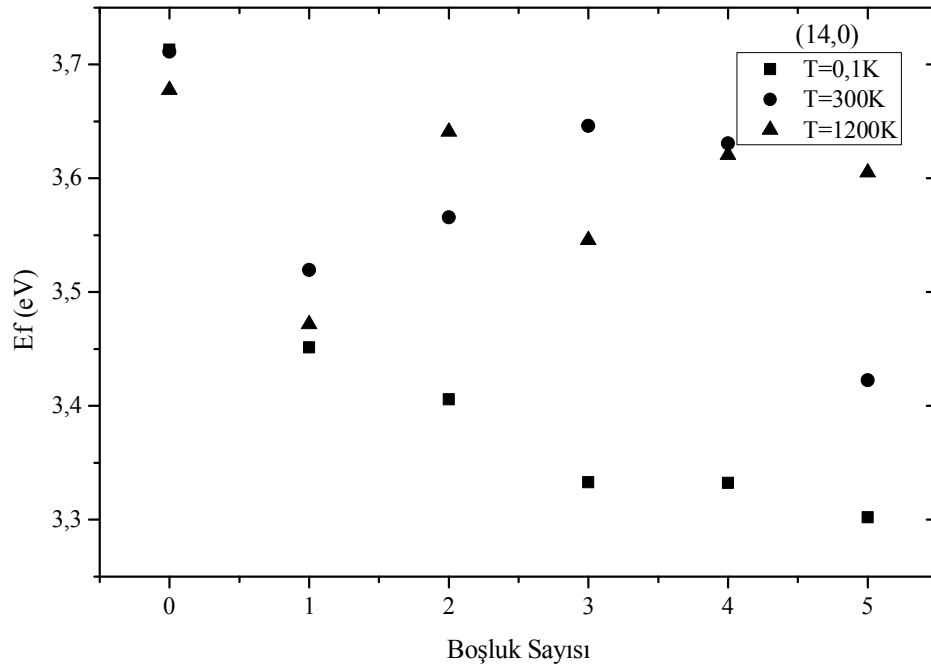


Şekil 4. 79 (14,0) TDKNT Atom başına toplam enerjisinin (E_{top}), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

Şekil 4.80’de Fermi enerji seviyesinin (E_f) değişik boşluk deformasyonlarda, MD adımına bağlı olarak değişimi verilmiştir. Kusursuz (14,0) TDKNT’lerin Fermi enerji seviyesi 3,71eV olarak tespit edilmiştir. Boşluk deformasyonuna bağlı olarak Fermi enerji seviyesinin bir boşluk deformasyonunda 3,52eV değerine düştüğü, üç boşluk deformasyonunda ise 3,64eV değerine yükseldiği ve bundan sonra dört ve beş boşluk deformasyonunda tekrar azaldığı görülmektedir (Şekil 4. 81).

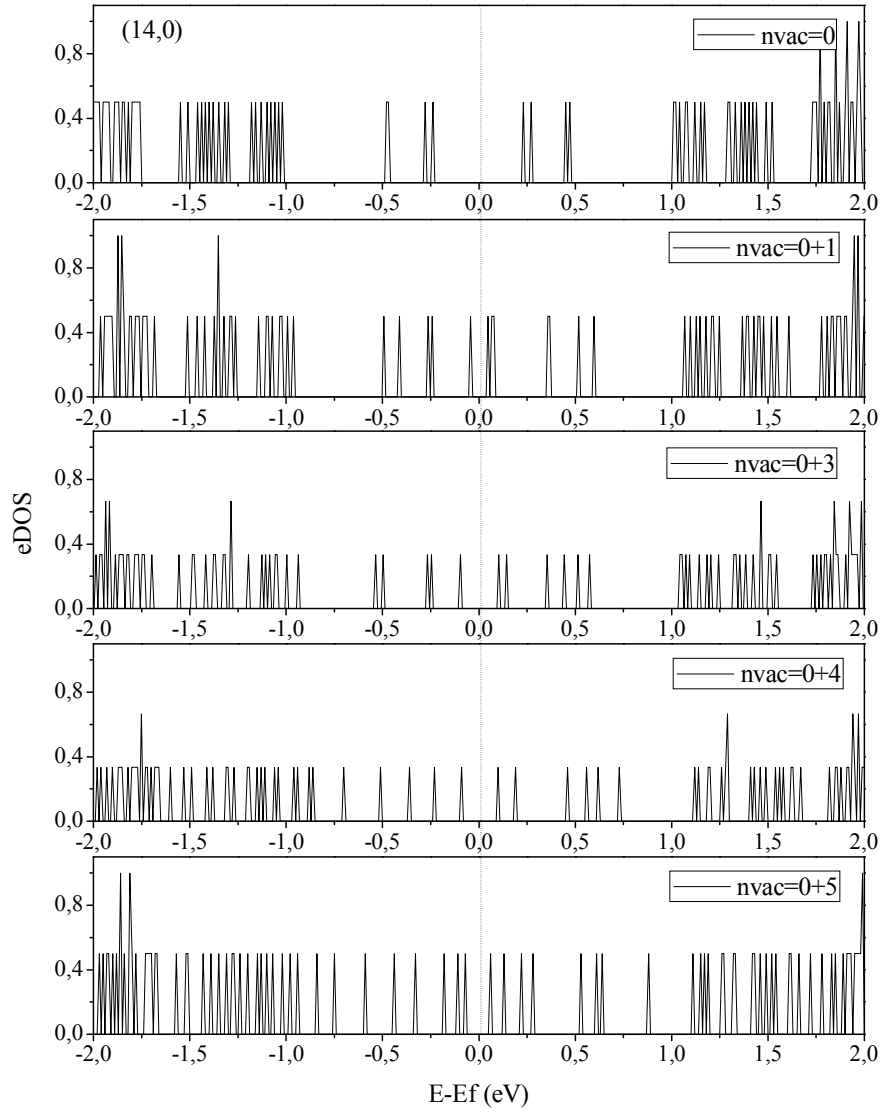


Şekil 4. 80 (14,0) TDKNTün boşluk deformasyonlarında, Fermi enerji seviyesinin(E_f), MD adımına bağlı olarak değişimi

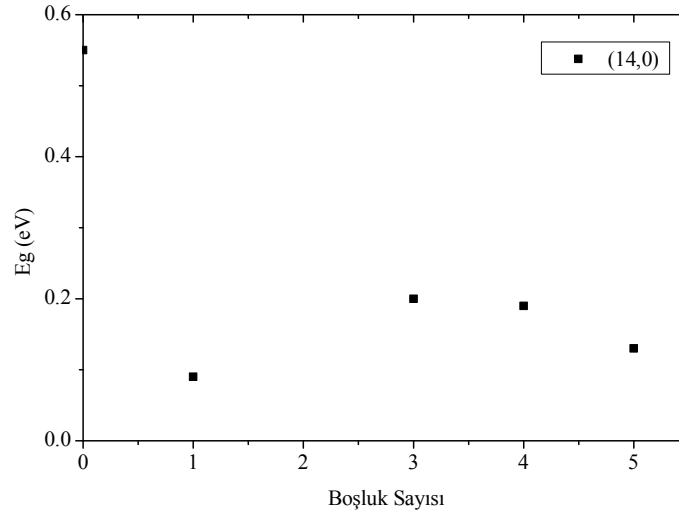


Şekil 4. 81 (14,0) TDKNT Fermi enerji seviyesinin (E_f) boşluk sayısına bağlı olarak değişimi.

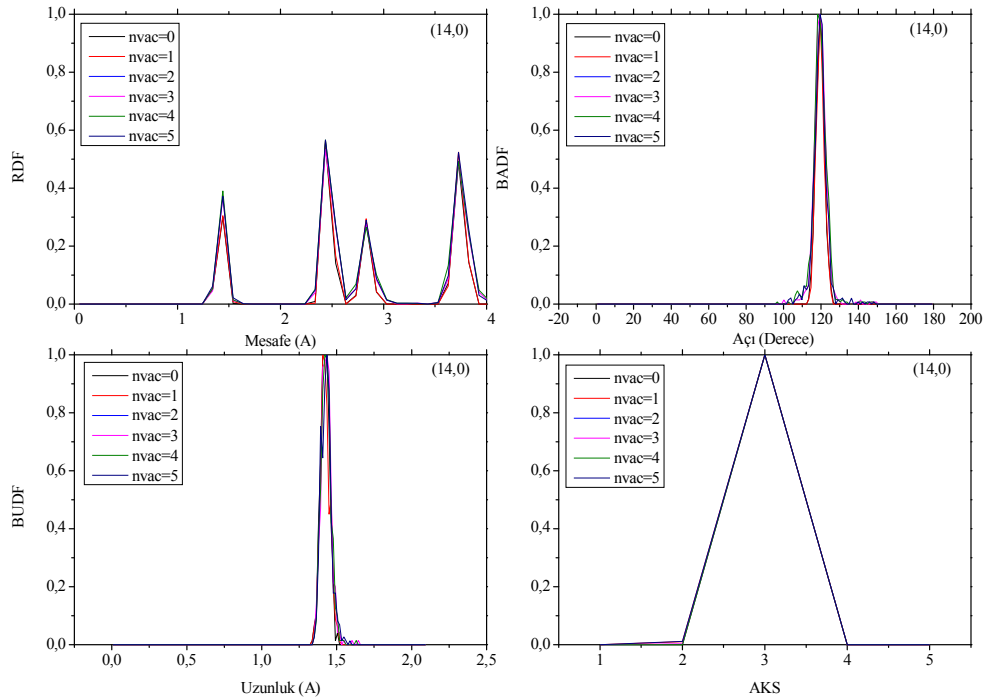
Değişik boşluk deformasyonlarında, elektronik durum yoğunlukları (eDOS) grafikleri oluşturulmuştur (Şekil 4. 82). Elektronik durum yoğunluklarının boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değiştiği tespit edilmiştir. Elektronik durum yoğunluklarının Fermi enerji seviyesi (E_f) civarındaki davranışından enerji bant aralıkları (E_g) belirlenmiştir (Şekil 4. 83)



Şekil 4. 82 (14,0) TDKNT'ün değişik boşluk deformasyonlarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri



Şekil 4. 83 (14,0) TDKNT enerji bant aralığının (E_g), boşluk sayısına bağlı olarak değişimi. Kusursuz (14,0) TDKNT'ün enerji bant aralığı 0,55eV olarak tespit edilmiştir. Buna bağlı olarak (14,0) TDKNT, yarıiletken özellik göstermektedir. Boşluk deformasyonlarına bağlı olarak enerji bent aralığı değerleri azalmaktadır. Bir boşluk deformasyonunda enerji bant aralığı 0,09eV değerine düşmektedir ve tek boşluk deformasyonunda yarıiletken metal geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 4. 84 (12,0) (14,0) TDKNT'ün boşluk sayısına bağlı olarak (a) RDF, (b) BADF ve (c) BUDDF ve (d) Atomik koordinasyon sayısının grafikleri

Kusursuz (14,0) TDKNT'ün, sırası ile 1,40Å, 2,43Å ve 2,85Å olan 1., 2. ve 3. komşu mesafeleri, TDKNT eksen doğrultusunda oluşturulan boşluk kusurlarına bağlı olarak değişim göstermemiştir. Benzer şekilde 1,42 Å olan bağ uzunluğu, 119,4° olan bağ açısı dağılım değerlerinde boşluk kusurlarına bağlı olarak değişmemiştir. Kusur (12,0) TDKNT'ün 3 olan atomik koordinasyon sayısı, boşluk kusurlarında 2 değeri içinde dağılım vermiştir. Bu değer, boşluk civarındaki bazı atomların koşulları ile 2 bağ yaptığını göstermektedir.

4.3.3 Yorum

Çalışmada (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin ortalama toplam enerjileri, Fermi enerji seviyeleri, elektronik durum yoğunlukları ve enerji bant aralıklarının, boşluk deformasyonlarına bağlı değişimleri incelenmiştir.

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin, atom başına toplam enerjilerinin, boşluk deformasyonlarında yeni enerji seviyelerinde dengelendiği belirlenmiştir. Simülasyon süresince, boşluk bölgesi civarında, altıgenden farklı olarak beşgen ve sekizgen örgüler meydana gelmektedir. Bu yeni örgüler bağlı olarak TDKNT'ler yeni enerji seviyelerinde dengelenmektedir. Bu enerji seviyelerinin MD adıma göre ortalamaları alınarak bulunan atom başına ortalama toplam enerjinin boşluk sayısının artışına bağlı olarak arttığı tespit edilmiştir (Çizelge 4.6).

Çizelge 4.6 Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin ortalama atom başına toplam enerji değerleri

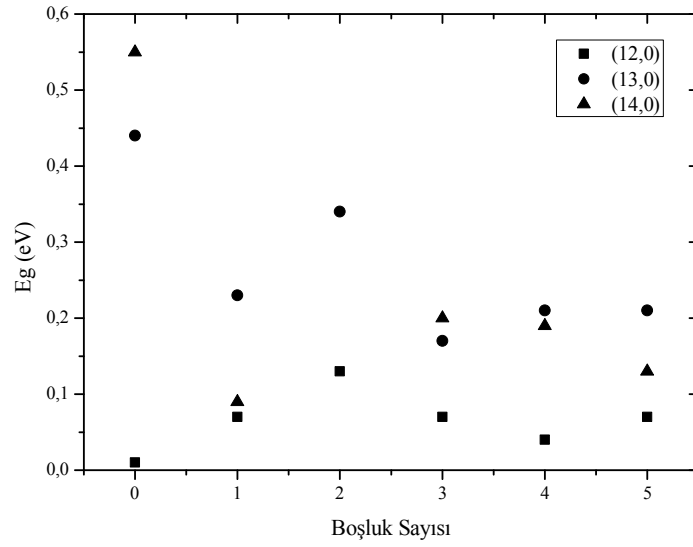
Boşluk Sayısı	Ortalama Toplam Enerji (eV/Atom)		
	(12,0)	(13,0)	(14,0)
0	-8,24293	-8,25567	-8,26493
1	-8,21353	-8,2294	-8,23903
2	-8,20879	-8,2139	-8,23427
3	-8,20347	-8,21754	-8,22494
4	-8,17378	-8,19189	-8,22441
5	-8,18134	-8,18936	-8,20172

Fermi enerji seviyelerinin genel olarak azaldığı görülmüştür (Çizelge 4. 7). Fakat Fermi enerji seviyesindeki değişimin, boşluk sayısına bağlı olarak fonksiyonel bir değişim gösterdiği belirlenememiştir.

Çizelge 4.7 Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Fermi enerji seviyesi değerleri

Boşluk Sayısı	Fermi Enerjisi (eV)		
	(12,0)	(13,0)	(14,0)
0	3,71031	3,71112	3,71124
1	3,51533	3,48835	3,51958
2	3,53952	3,27072	3,56556
3	3,52243	3,58706	3,64611
4	3,32613	3,51592	3,63067
5	3,57271	3,33223	3,42264

Elektronik durum yoğunluklarının boşluk deformasyonlarından belirgin bir şekilde etkilendiği belirlenmiştir. Elektronik durum yoğunluklarının Fermi enerji seviyesi civarında ki davranışından enerji bant aralıkları belirlenmiştir. Metalik davranış gösteren (12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının boşluk sayısına bağlı olarak arttığı tespit edilmiştir. İki boşluk deformasyonunda enerji bant aralığı 0,13 eV değerine ulaşmaktadır. Yarıiletken davranış gösteren (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin enerji bant aralıkları boşluk sayısına bağlı olarak azalmaktadır. (13,0) TDKNT'de enerji bant aralığı, üç boşluk deformasyonunda 0,44eV dan 0,17 eV değerine kadar azalmaktadır. (14,0) TDKNT'de enerji bant aralığı, bir boşluk deformasyonunda 0,55eV değerinden 0,09eV değerine düşmektedir ve bir boşluk deformasyonunda yarıiletken metal geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 4. 85 (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin KNT eksenine dik doğrultuda meydana getirilen boşluk kusurlarına bağlı olarak enerji bant aralıklarının değişimi

Çizelge 4.8 Boşluk deformasyonuna bağlı olarak (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Enerji bant aralığı değerleri

Boşluk Sayısı	Enerji Bant Aralığı (eV)		
	(12,0)	(13,0)	(14,0)
0	0,01	0,44	0,55
1	0,07	0,23	0,09
2	0,13	0,34	--
3	0,07	0,17	0,2
4	0,04	0,21	0,19
5	0,07	0,21	0,13

(12,0), (13,0) ve (14,0) Zigzag TDKNT'lerin RDF dağılımları, TDKNT ekvator düzlemi üzerinde oluşturulan boşluk kusurlarına bağlı olarak değişim göstermemektedir. Bağ uzunluğu ve dağılımlarında benzer olarak boşluk kusurlarından etkilenmemektedir. Ancak AKS dağılımı, boşluk kusurlarına bağlı olarak değişmektedir ve 3 değerinden başka, 2 değeri içinde dağılım meydana gelmektedir. Bu dağılım değeri, boşluk kusuru civarındaki atomların, koşulları ile 2 bağ yaptığını göstermektedir.

4.4 Düşük /Yüksek Sıcaklıklarda Burulma Kusurlarına Bağlı Olarak TDKNT'lerin Elektronik Yapısı

Çalışmada, burulma etkisinde ki (12,0) ve (13,0) TDKNT'lerin atom başına toplam enerjileri (E_{top}), bağ yapısı enerjileri (E_{bs}), itici potansiyel enerjileri (E_{rep}), Fermi enerji seviyeleri (E_f), ve enerji bant aralıkları (E_g) incelenmiştir. Ayrıca bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları (BUDF), bağ açısı dağılım fonksiyonları (BADF) ve radyal dağılım fonksiyonları (RDF) grafikleri oluşturulmuştur. Burulma, 0° ile 180° arasında uygulanmıştır. Simülasyonlar T=0,1K T=300K ve T=1200K sıcaklıkları için gerçekleştirilmiştir.

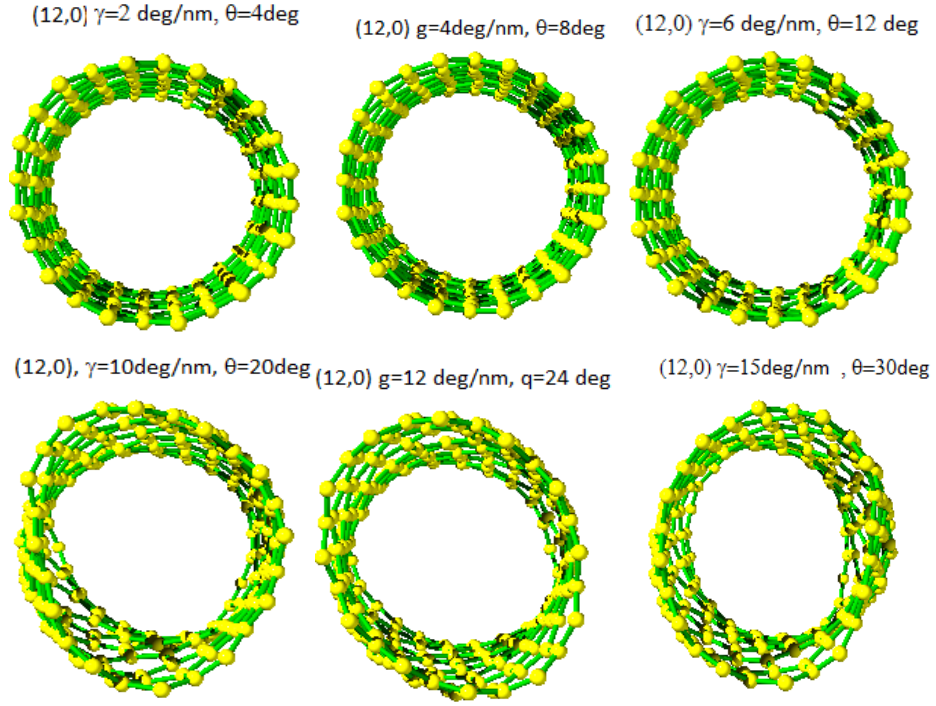
TDKNT'ler, 3000MD adımı (1MD adımı=1fs) boyunca simülasyon uygulanarak dengeye getirilmişlerdir. Daha sonra 2000MD adımı boyunca belirli açılarda (θ) burulma deformasyonuna maruz bırakılmışlardır. Açı değerleri $\gamma = \theta / L_T$ (L_T ; TDKNT boyu) ile ifade edilen burulma oranı (γ) ile ölçeklendirilmiştir (Çizelge 4.9).

Çizelge 4.9 TDKNT'lerin fiziksel parametreleri

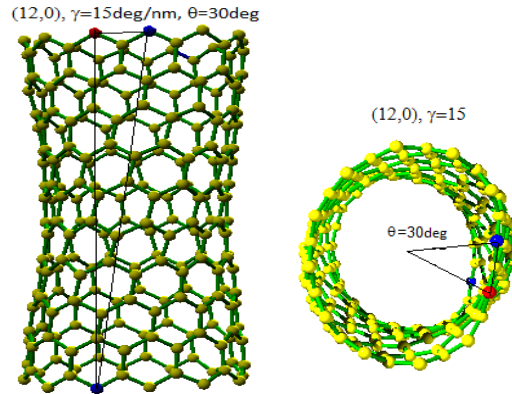
γ (der./nm)	θ (der.)
2	4
4	8
6	12
7,5	15
10	20
12	24
15	30

4.4.1 (12,0) TDKNT

Burulma etkisinde ki (12,0) TDKNT'ün atom başına toplam enerjileri, Fermi enerji seviyeleri, ve enerji bant aralıkları (E_g) incelenmiştir. (12,0) TDKNT, 3000MD adımı (1MD adımı=1fs) boyunca simülasyon uygulanarak dengeye getirilmişlerdir. Daha sonra 2000MD adımı boyunca belirli açılarda (θ) burulma deformasyonuna maruz bırakılmışlardır (Şekil 4.86).



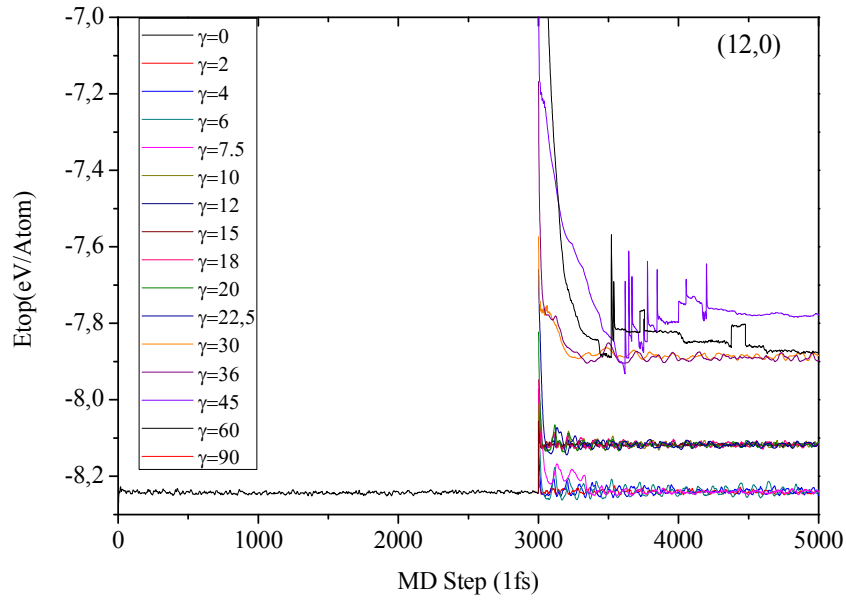
Şekil 4. 86 Burulma etkisindeki (12,0) TDKNT simülasyon görüntüleri



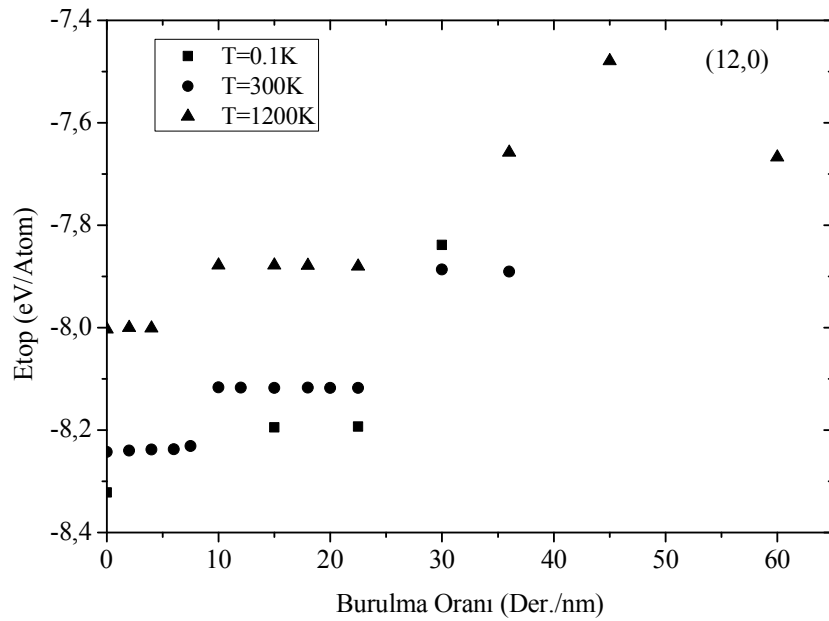
Şekil 4. 87 $\theta=30^\circ$ için burulma açısının testi

Değişik burulma oranlarında, atom başına toplam enerjinin MD adımına bağlı olarak değişimi incelenmiştir (Şekil 4.88). Bu grafiklerden, ortalama toplam enerji değerleri belirlenmiştir. Şekil 4. 89'de ortalama toplam enerjinin, burulma oranına bağlı değişimleri $T=0,1K$, $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklık değerleri için verilmiştir. $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ değerine kadar ortalama toplam enerjide belirgin bir artış görülmemiş, fakat $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ değerinde ortalama toplam enerji, $-8,243\text{eV}$ değerinden $-8,117\text{eV}$ değerine artmıştır. Daha yüksek burulma oranı ($\gamma = 12 \text{ ve } 15 \text{ der./nm}$) değerlerinde bu değerde kalmıştır. Ortalama toplam enerji $\gamma = 30 \text{ der./nm}$ değerinde

tekrar artmıştır. Ortalama toplam enerji değerlerindeki benzer davranış $T=0,1K$ ve $T=1200K$ sıcaklıklarında da meydana gelmiştir.

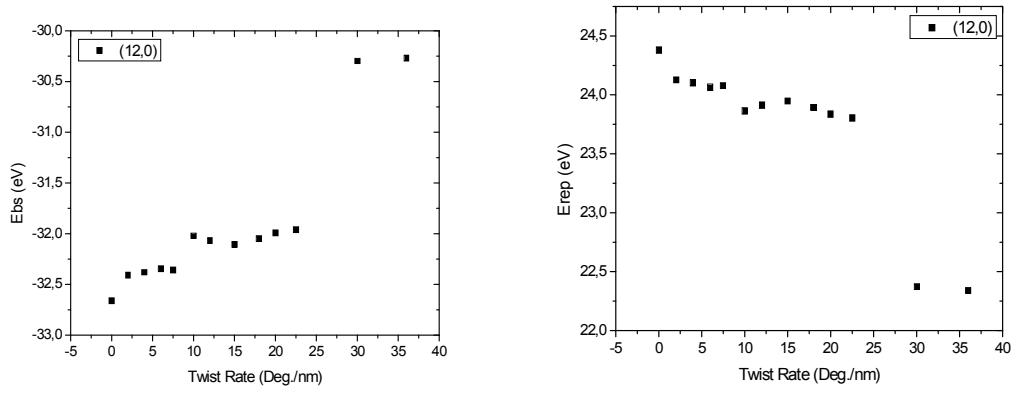


Şekil 4. 88 (12,0) TDKNT'ün değişik burulma oranlarında (γ) atom başına toplam enerjisinin, MD adımı göre değişimi.



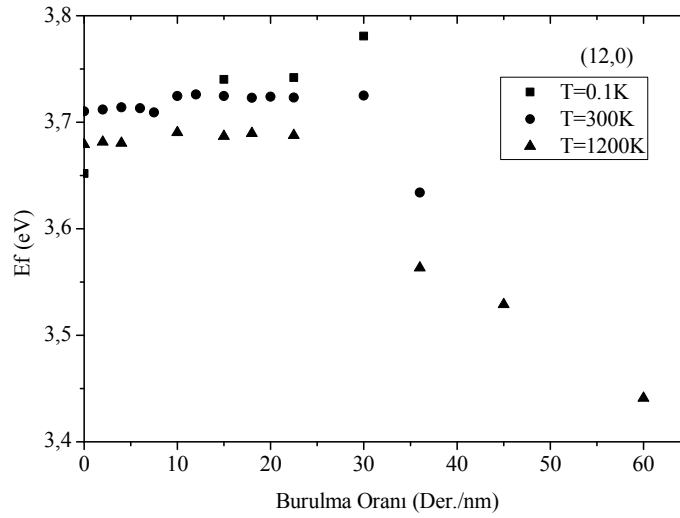
Şekil 4. 89 (12,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji değerinin, burulma oranına bağlı olarak değişimi.

Bağ yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin burulma oranına bağlı değişimleri incelenmiştir (Şekil 4. 90).

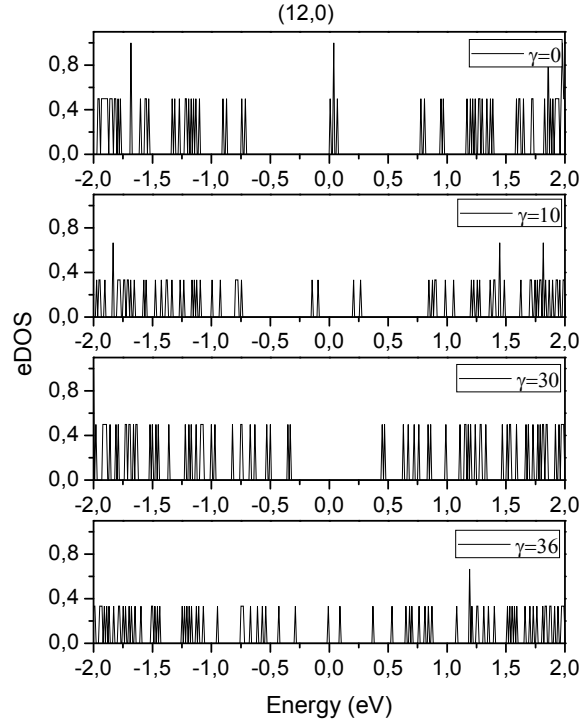


Şekil 4. 90 (12,0) TDKNT'ün bağ yapısı enerjisinin (E_{bs})ve itici potansiyel enerjinin (E_{rep}), burulma oranına bağlı olarak değişimi.

Toplam enerjide ki değişime uygun olarak, bağ yapısı enerjisi artmaktadır. İtici potansiyel enerji ise azalmaktadır. Şekil 4. 91'de $T=0,1K$, $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıklarda Fermi enerji seviyesinin burulma oranına bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Fermi enerji seviyesi de, ortalama toplam enerji değerine benzer olarak $\gamma = 30 \text{ der./nm}$ değerine kadar artış göstermektedir.

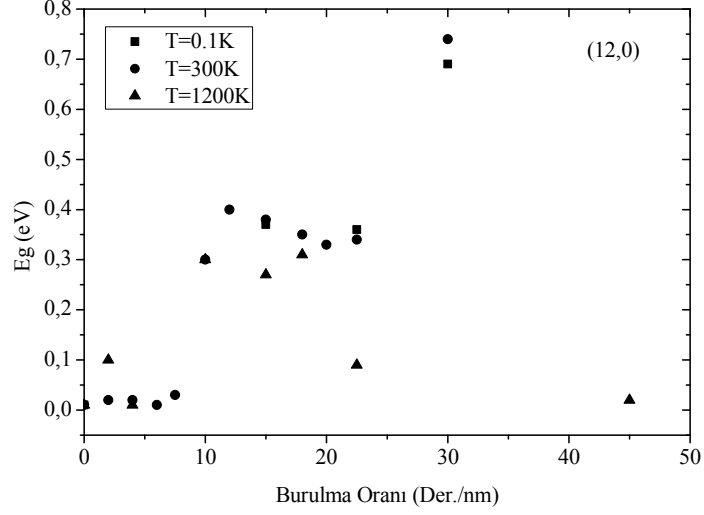


Şekil 4. 91 TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi



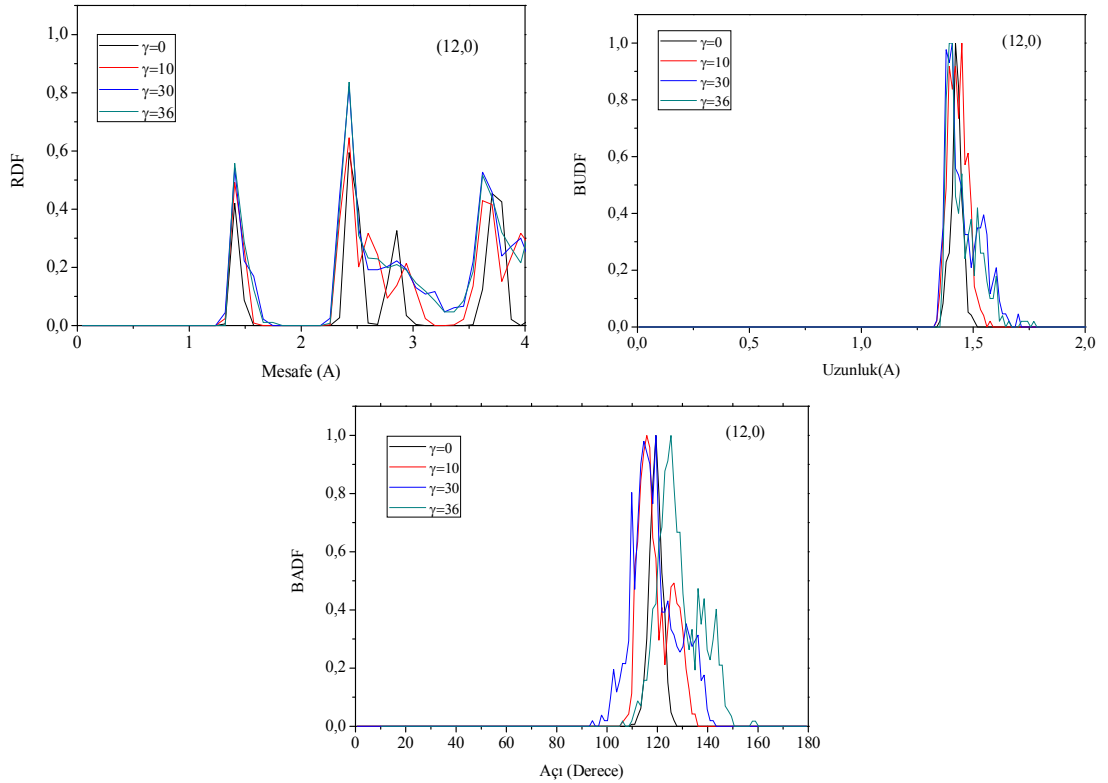
Şekil 4. 92 (12,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunluğu (DOS)grafikleri

(12,0) TDKN'ün, farklı burulma oranlarında elektronik durum yoğunluğu grafikleri oluşturulmuştur (şekil 4. 92). Kusursuz (12,0) TDKNT'ün, enerji bant aralığı 0,01eV dur ve metalik davranış göstermektedir. Şekil 4. 93'de enerji bant aralığının, burulma oranına bağlı olarak değişimi verilmiştir. $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ Burulma oranı değerine kadar enerji bant aralığı değeri değişmemektedir. Bu burulma oranı değerinde enerji bant aralığı değeri 0,01eV değerinden 0,3eV değerine, $\gamma = 30 \text{ der./nm}$ burulma oranında ise 0,74eV değerine artmaktadır. Bu değerde, (12,0) TDKNT, yarıiletken davranış göstermektedir. Burulma deformasyonuna bağlı olarak, metal yarı iletken geçişi meydana gelmektedir.



Şekil 4. 93 (12,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının (E_g) burulma oranına bağlı olarak değişimi

Burulma deformasyonlarında, (12,0) TDKNT'ün, bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları, bağ açısı dağılım fonksiyonları ve radyal dağılım fonksiyonları belirlenmiştir (Şekil 4.94).



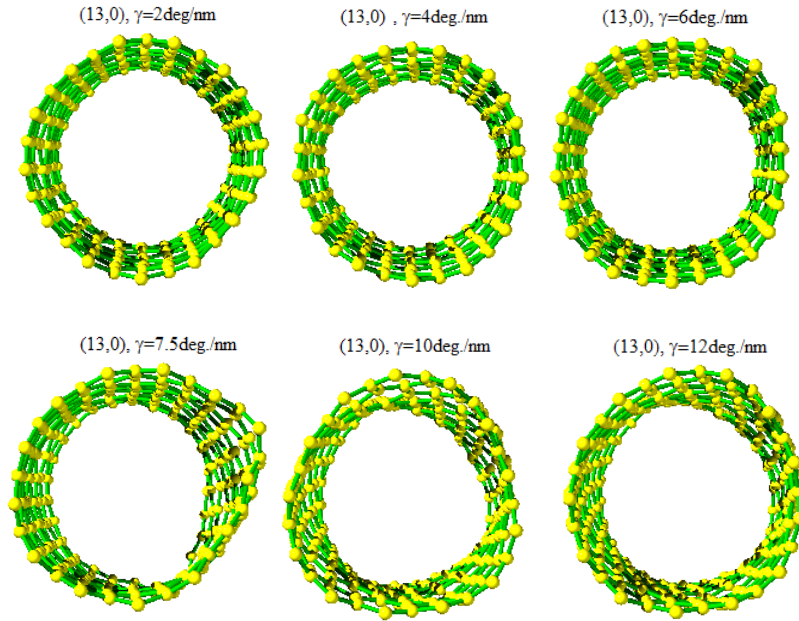
Şekil 4. 94 (12,0) TDKNT'ün (a) RDF,(b) BUDF ve (c) BADF dağılım grafikleri

RDF grafiğinden bütün burulma değerlerinde 1. ve 2. komşu mesafelerinin değişmediği (1,41Å ve 2.41Å) görülmektedir. 3. Komşu mesafesi ise değişiklik göstermektedir. Bağ

uzunluğu, $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ eğerinde artarken, $\gamma = 30$ ve $\gamma = 36 \text{ der./nm}$ değerlerinde azalmaktadır. Buna karşı olarak, bağ açısı, $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ eğerinde azalırken, $\gamma = 30 \text{ der./nm}$ ve $\gamma = 36 \text{ der./nm}$ değerlerinde artmaktadır. Burada bağ uzunluğu ve bağ açısındaki değişimler uygulanan burulma değerine bağlı olarak değişmektedir. Fonksiyonel bir davranış yoktur.

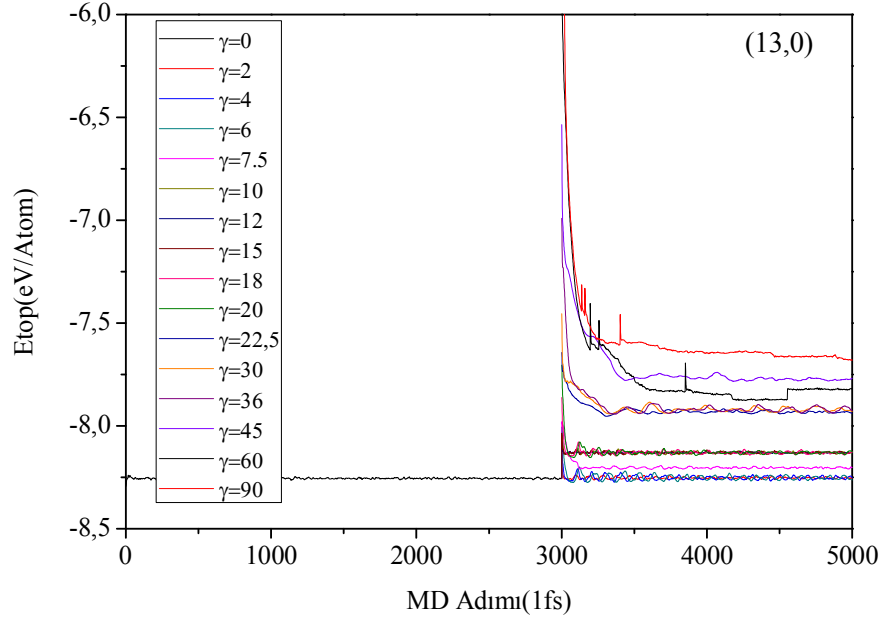
4.4.2 (13,0) TDKNT

(13,0) TDKNT, 3000MD adımı (1MD adımı=1fs) boyunca simülasyon uygulanarak dengeye getirilmişlerdir. Daha sonra 2000MD adımı boyunca belirli açılarda (θ) burulma deformasyonuna maruz bırakılmışlardır (Şekil 4. 95).

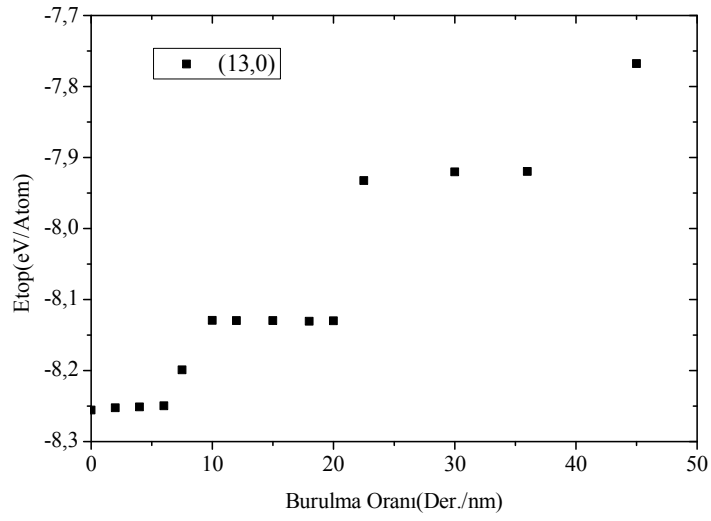


Şekil 4. 95 Burulma etkisindeki (12,0) TDKNT simülasyon görüntüleri

Değişik burulma oranlarında, atom başına toplam enerjinin MD adımına bağlı olarak değişimi incelenmiştir (Şekil 4. 96). Bu grafiklerden, ortalama toplam enerji değerleri belirlenmiştir. Şekil 4. 97’de ortalama toplam enerjinin, burulma oranına bağlı değişimi verilmiştir.



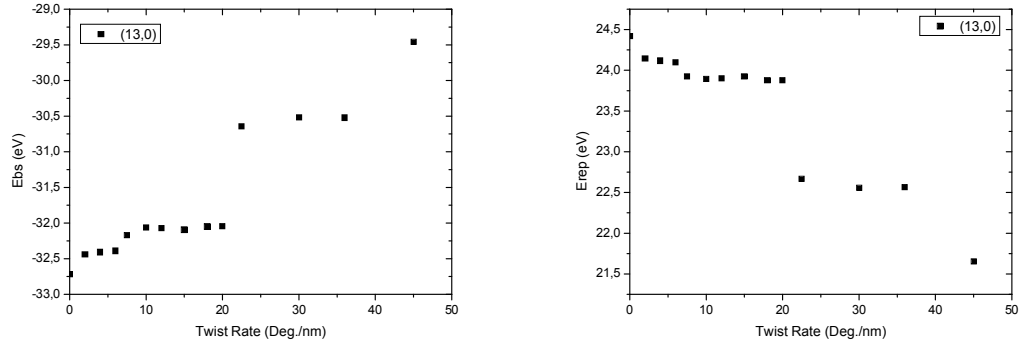
Şekil 4. 96 (13,0) TDKNT'ün değişik burulma oranlarında (γ) atom başına toplam enerjisinin, MD adıma göre değişimi.



Şekil 4. 97 (13,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji değerinin, burulma oranına bağlı olarak değişimi.

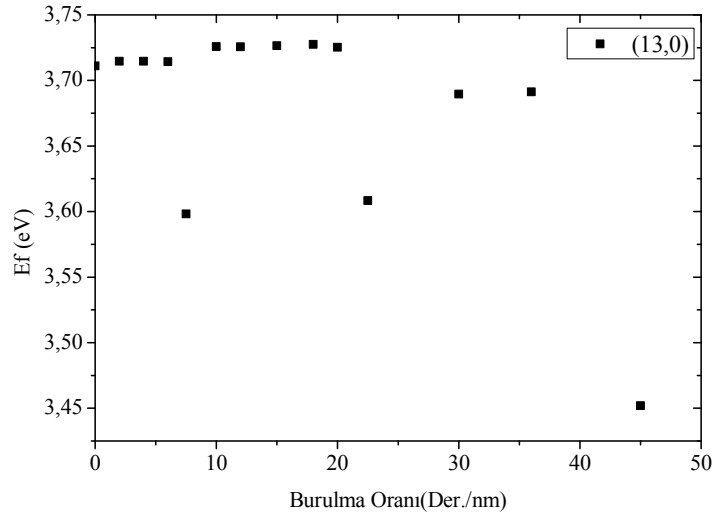
Ortalama toplam enerji değeri, $\gamma = 6 \text{ der./nm}$ burulma oranı değerine kadar çok az değişmiştir. Fakat bu noktadan sonra artmış ve $\gamma = 10 \text{ der./nm}$ noktasında, ortalama toplam enerji değeri, $-8,256 \text{ eV}$ değerinden $-8,130 \text{ eV}$ değerine artmıştır. Bundan sonra, $\gamma = 12 \text{ der./nm}$ ve 15 der./nm burulma oranlarında değişmemiştir.

Bağ yapısı enerjisinin ve itici potansiyel enerjinin burulma oranına bağlı değişimleri incelenmiştir (Şekil 4. 98).

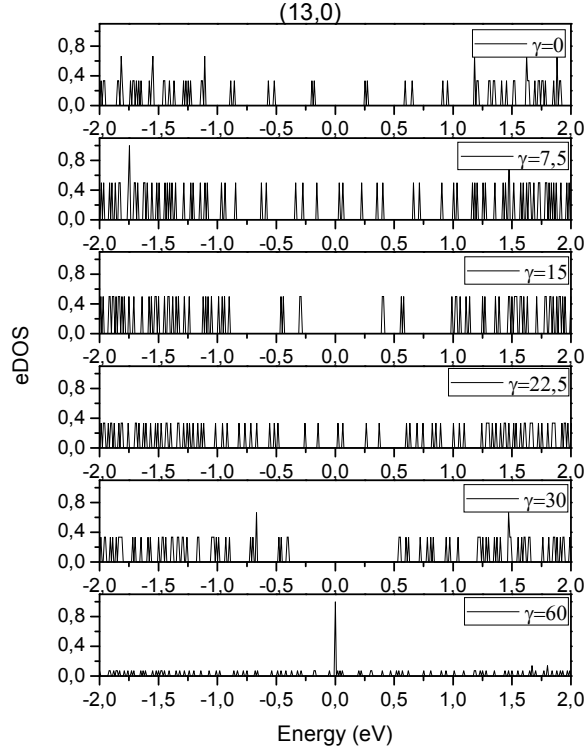


Şekil 4. 98 (13,0) TDKNT'ün bağ yapısı enerjisinin (E_{bs}) ve itici potansiyel enerjisinin (E_{rep}), burulma oranına bağlı olarak değişimi.

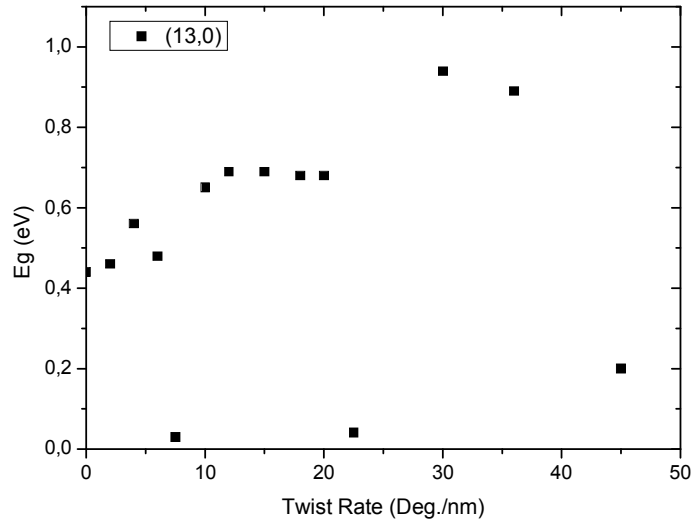
Şekil 4.99'de Fermi enerji seviyesinin burulma oranına bağlı olarak değişimi gösterilmiştir.



Şekil 4. 99 (13,0) TDKNT'ün Fermi enerji seviyesinin burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi



Şekil 4. 100 (13,0) TDKNT'ün elektronik durum yoğunluğu (DOS)grafikleri

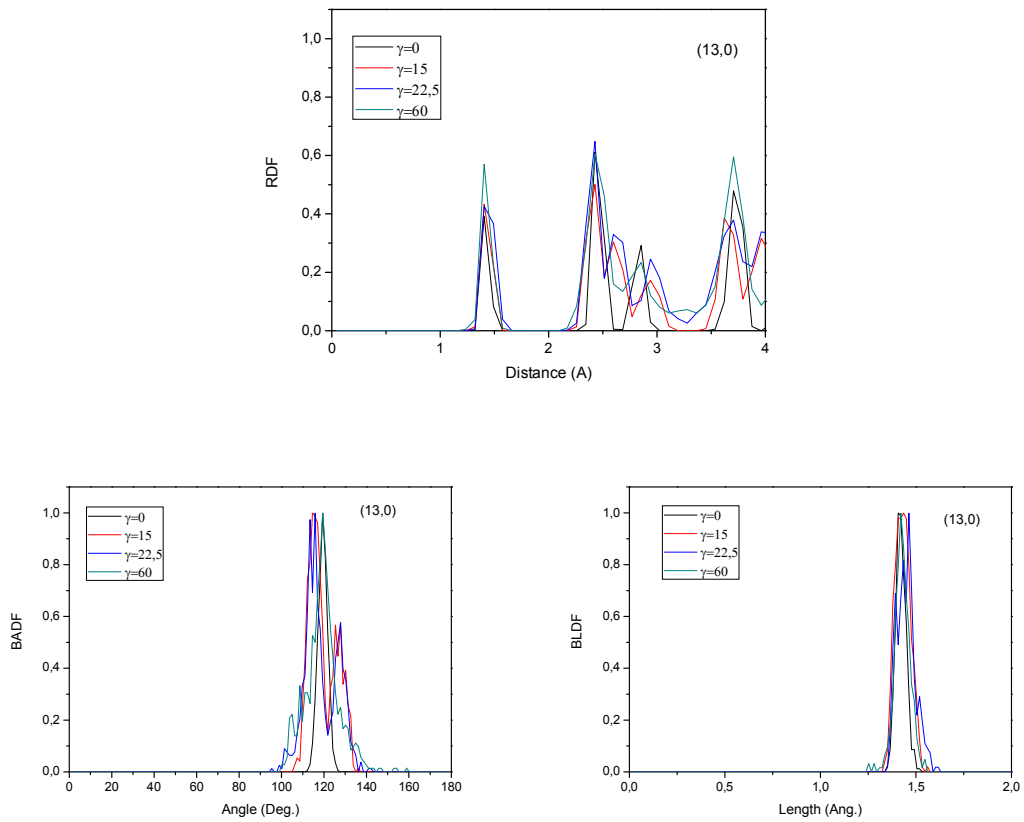


Şekil 4. 101 (13,0) TDKNT'ün enerji bant aralığının (E_g) burulma oranına (γ) bağlı olarak değişimi

(13,0) TDKN'ün, farklı burulma oranlarında elektronik durum yoğunluğu grafikleri oluşturulmuştur (Şekil 4. 100). Kusursuz (13,0) TDKNT'ün, enerji bant aralığı 0,44eV dur ve yarıiletken davranış göstermektedir. Şekil 4.101'de enerji bant aralığının, burulma

oranına (γ) bağı olarak değişimi verilmiştir. Kusursuz (13,0) TDKNT'ün, enerji bant aralığı 0,44eV dur ve yarıiletken davranış göstermektedir. Burkma oranın artışına bağı olarak enerji bant aralığı 0,44 eV değerinden 0,69 eV değerine artmaktadır ($\gamma=10deg./nm$). Burulma oranın artışına bağı olarak enerji bant aralığı artmaktadır.

Burulma deformasyonlarında, (13,0) TDKNT'ün, bağı uzunluğu dağılım fonksiyonları, bağı açısı dağılım fonksiyonları ve radyal dağılım fonksiyonları belirlenmiştir (Şekil 4.102).

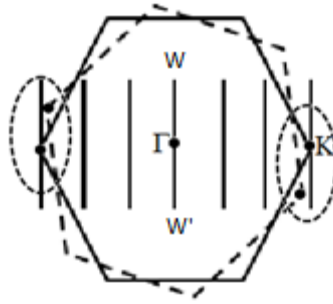


Şekil 4. 102 (13,0) TDKNT'ün (a) RDF, (b) BUDF ve (c) BADF dağılım grafikleri

RDF grafiğinden bütün burulma değerlerinde 1. ve 2. komşu mesafelerinin değişmediği (1,41Å ve 2.43Å) görülmektedir. 3. Komşu mesafesi ise değişiklik göstermektedir. Bağı uzunluğu, $\gamma = 15deg./nm$ $\gamma = 22,5$ ve değerinde artmaktadır. Buna karşı olarak, bağı açısı, $\gamma = 15deg./nm$ eğerinde azalırken, $\gamma = 60deg./nm$ değerlerinde değişmiyor. Burada bağı uzunluğu ve bağı açısındaki değişimler uygulanan burulma değerine bağı olarak değişmektedir. Fonksiyonel bir davranış yoktur.

4.4.3 Yorum

(12,0) ve (13,0) TDKNT'lerin ortalama toplam enerji deęerleri burulma oranına baęlı olarak artmaktadır. Kusursuz (12,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji deęeri -8,2429 eV iken $\gamma=10$ der./nm burulma oranında, -8,1166 eV deęerine, $\gamma=30$ der./nm burulma oranında, -7,8864 eV deęerine artmıřtır. (13,0) TDKNT'ün ortalama toplam enerji deęeri, -8,2557 eV deęerinden $\gamma=10$ der./nm burulma oranında, -8,1295 eV deęerine $\gamma=22,5$ der./nm burulma oranında -7,9324 eV, $\gamma=45$ der./nm deęerinde -7,7678 eV deęerine artmıřtır. Her iki TDKNT'de enerji bant aralıkları burulma oranına baęlı olarak artmaktadır. Bu sonu, literatür sonuları [21-23] ile uygundur. Kusursuz (12,0) TDKNT metalik zellik gsterirken, burulma etkisinde yarı iletken zellik gstermektedir ve metal - yarıiletken geiři meydana gelmektedir. (13,0) TDKNT'ün yarı iletken zellięi burulma kusuruna baęlı olarak deęiřmemektedir.



řekil 4. 103 Burulma kusuruna baęlı olarak grafenin ve TKNT'ün birinci Brillouin blgelerinin deęiřimi

Burulma deformasyonuna baęlı olarak grafenin ters uzay rgüsü ve WW' izgi segmentleri ile ifade edilen TDKNT'ün ters uzay rgüsü ile olan ynelimleri deęiřir. Buna baęlı olarak K simetri noktası ile en yakın WW' izgi segmenti arasındaki mesafe dolayısı ile enerji bant aralıęı deęiřir ve belirli gerinim deęerlerinde metal-yarıiletken ya da yarıiletken-metal geiřleri meydana gelir (řekil 4.103).

Burulma deformasyonuna baęlı olarak zigzag TDKNT'lerin RDF, BUDF ve BADF incelenmiřtir. RDF sonularında, burulma deformasyonuna baęlı olarak 1. Ve 2. Komřu mesafelerinde deęiřim gzlenmemiřtir. Buna karřın 3. Komřu mesafelerinin deęiřtięi tespit edilmiřtir. Zigzag TDKNT'lerde 1. komřular TDKNT eksen doęrusunda, 2.

Komşular ise radyal doğrultuda yer almaktadır. Bu nedenle burulmadan kaynaklanan yer değiştirmeler bu doğrultudaki atomlar arasındaki mesafeleri etkin bir şekilde değiştirmezken 3. Komşu atomlarının konumları burulmaya bağlı olarak daha fazla etkilenmektedir. Bağ uzunluklarındaki ve bağ açılarındaki değişimler zigzag TDKNT'ün geometrik yapısına ve uygulanan burulma deformasyonuna bağlı olarak etkilenmektedirler. Bu nedenle belirgin fonksiyonel bir davranış tespit edilememiştir.

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, sıcaklık, düşük / yüksek sıcaklıklarda germe / sıkıştırma, düşük / yüksek sıcaklıklarda boşluk deformasyonlarının ve düşük / yüksek sıcaklıklarda burulma deformasyonlarının (10,0), (12,0), (13,0), (14,0) ve (15,0) TDKNT'lerin enerjetik, elektronik, mekanik ve fiziksel özelliklerine etkisi incelenmiştir.

İncelemenin ilk kısmında, (10,0) yarıiletken (15,0) metalik zigzag TDKNT'lerin enerjetik (E_{top}), elektronik (E_F , DOS , E_g) ve fiziksel özelliklerine (RDF, BUDF, BADF ve AKS) sıcaklığın etkisi incelenmiştir. Sıcaklık değimi 0K ile 1500K sıcaklıkları arasında seçilmiştir. Bu sıcaklık değişiminde, TDKNT'lerin atom başına ortalama toplam enerji (E_{top}) değerleri, sıcaklık artışına bağlı olarak doğrusal artış göstermektedir. Bu artış sıcaklık artışına bağlı olarak atomların kinetik enerjilerindeki artıştan ve termal genişlemeye bağlı olarak atomlar arası bağıl mesafelerin artmasından kaynaklanan, itici potansiyel enerjine göre bant yapısı (çekici potansiyel) enerjinin baskın olmasından kaynaklanmaktadır. Fermi enerji seviyeleri (E_f), düşük sıcaklıklarda artarken, yüksek sıcaklıklara doğru doğrusal olarak azalmaktadır. Her bir sıcaklık değerinde, E_f civarında DOS grafikleri kullanılarak enerji bant aralıkları tespit edilmiştir. Enerji bant aralıklarında (E_g) sıcaklığa bağlı olarak meydana değişiklikler TDKNT'ün elektronik özelliklerine göre değişiklik göstermektedir. Metalik TDKNT'lerin, enerji bant aralıkları (E_g), sıcaklığa bağlı olarak belirgin bir değişiklik göstermemektedir. Fakat yarı iletken TDKNT'lerin enerji bant aralıkları yüksek sıcaklık bölgesinde ($T \geq 200K$) bulk yarıiletkenlerin davranışına benzer olarak doğrusal bir şekilde azalmaktadır. Düşük

sıcaklıkların etkisinde, E_g bulk yarı iletkenlerden farklı olarak artmaktadır. Düşük sıcaklık bölgesindeki bu farklı davranış TDKNT'lerin nano boyutlarından kaynaklanmaktadır. Bu sonuçlar, literatürde, Capaz vd.[1]'nin YFT kullanılarak yarıiletken TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının sıcaklığa bağlılıklarını inceledikleri çalışma sonuçları ile uyumludur. Bu tez çalışmasında, literatür sonucundan farklı olarak, sıcaklık aralığı daha geniş tutulmuş (0-1500K) ve metalik TDKNT'lerde incelenmiştir. Ayrıca çalışmada TDKNT'lerin elektronik özellikleri gerçek uzay hesaplamaları kullanılarak hesaplanmıştır. TDKNT'lerin fiziksel özellikleri (RDF, BUDF, BADF ve AKS) düşük / yüksek sıcaklıklarda incelenmiştir. Sıcaklığa bağlı olarak atomların ortalama komşu uzaklıkları değişmemekte fakat dağılımların genişliği artmaktadır. Benzer durum, BUDF ve BADF ları içinde geçerlidir. BUDF ve BADF'larında maksimum pik, bütün sıcaklık değerleri için sırası ile 1,42 Å ve 120° civarında ortaya çıkmaktadır. AKS grafiklerinden her atomun çalışılan bütün sıcaklıklarda komşuları ile 3 bağ yapmaya devam ettiği görülmektedir. Buna sonuçlar, çalışılan sıcaklık bölgesinde, sıcaklık artışına bağlı olarak TDKNT'lerin yapısal özellikleri değişmediğini ve çalışılan sıcaklıklarda TDKNT'lerin altıgen örgü yapısını koruduğunu göstermektedir. Altıgen örgü yapısından sapma ancak bağ kopmaları başladıktan sonra gerçekleşmektedir.

Çalışmanın ikinci kısmında, 300K ve 1200K sıcaklık değerlerinde zigzag TDKNT'lerin enerjetik (E_{top}), elektronik (E_F , DOS , E_g) ve fiziksel (RDF, BUDF, BADF ve AKS) özelliklerinin aksel gerinime bağlı değişimleri incelenmiştir ve mekanik (Young modülü ve Poisson oranı) özellikleri tespit edilmiştir. Bu tez çalışmasında, kiralite vektörüne bağlı olarak $(n,0)$ ile ifade edilen zigzag TDKNT'ler, $n \equiv 0(mod 3)$, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ olmak üzere üç sınıfta toplanmıştır. Bu sınıflandırmaya bağlı olarak sırası ile (12,0), (10,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'ler seçilmiştir. Çalışmada kullandığımız yöntem TDKNT'lerin elektronik özelliklerini gerçek uzayda hesaplamaktadır. Bu çalışmada gerininin etkisi düşük/yüksek sıcaklıklarda incelenmiştir (300K/1200K). Elektronik özellikleri bakımından $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'ler metalik özellik gösterirken, $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'ler yarı iletken özellik göstermektedirler.

(10,0), (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin 300K / 1200K sıcaklık değerlerinde uygulanan germe / sıkıştırma gerinimlerine bağlı olarak değişimleri

incelenmiştir. Bütün TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin germe / sıkıştırma gerinimleri ile kuadratik olarak arttığı görülmüştür. Bu fonksiyonel davranışa bağlı olarak uygulanan eksenel gerinim değerlerinde TDKNT'lerin Hook yasasına uydukları, yapısal kararlılıklarını ve elastik özelliklerini koruduğu tespit edilmiştir. Uygulanan iki sıcaklık değeri içinde benzer davranışlar görülmüştür.

Germe / sıkıştırma gerinimleri etkisinde TDKNT'lerin elektronik özellikleri, Fermi enerji seviyesi (E_f), elektronik durum yoğunlukları (DOS) ve enerji bant aralıkları (E_g) kullanılarak incelenmiştir. Fermi enerji seviyeleri, çalışılan bütün TDKNT'leri için uygulanan germe / sıkıştırma gerinimlerine bağlı olarak artmaktadır. Fermi enerji seviyesinin civarında DOS grafiklerinden elde edilen E_g değerlerinin germe / sıkıştırma gerinimlerine bağlı olarak değişimleri TDKNT'ün sınıfına bağlı olarak değişiklik göstermektedir. Elektronik özellikleri bakımından metalik özellik gösteren $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları germe ve sıkıştırma gerinimleri etkisinde artmakta ve metal yarıiletken geçişleri meydana gelmektedir. Yarıiletken özellik gösteren $n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları germe gerinimine bağlı olarak artmasına rağmen sıkıştırma gerinimi etkisinde azalmaktadırlar ve yarıiletken – metal geçişleri meydana gelmektedir. $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı TDKNT'ler sıfır gerinim etkisinde yarıiletken davranışı göstermektedir. Sıkıştırma gerinimi etkisinde, enerji bant aralığı artmaktadır. Buna karşılık germe gerinimi etkisinde, enerji bant aralıkları azalmakta ve yarıiletken – metal geçişi meydana gelmektedir. 300K ve 1200K sıcaklık değerlerinin her ikisinde de, enerji bant aralıklarının gerinime bağlı olarak değişimleri benzer davranışlar göstermektedir.

İki boyutlu grafenin enerji dispersiyon bağıntısı üzerinde tanımlı bir boyutlu TDKNT enerji dispersiyon eğrileri, grafenin pi (π) ve anti pi (π^*) bantlarının simetrik ve dejenere olduğu K simetri noktası üzerinden geçerlerse, durum yoğunluğu Fermi seviyesinde belirli bir değere sahip olur ve sıfır enerji bant aralığına sahip olurlar (Şekil 2.6). $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'ler bu durumu sağlamaktadırlar (Şekil 4.42 a) ve metalik özellik gösterirler. $n \equiv 1(mod 3)$ ve $n \equiv 2(mod 3)$ sınıfı zigzag TDKNT'lerin enerji dispersiyon eğrileri K simeti noktasından geçmezler (Şekil 4.42 b) ve yarı iletken özellik gösterirler (Şekil 2.7). Eksenel gerinime bağlı olarak grafenin ters uzay örgüsü ve WW' çizgi segmentleri ile ifade edilen TDKNT'ün ters uzay örgüsü ile olan yönelimleri

değişir. Eksenel gerinime bağlı olarak K simetri noktası ile en yakın WW' çizgi segmenti arasındaki mesafe dolayısı ile enerji bant aralığı değişir ve belirli gerinim değerlerinde metal-yarıiletken ya da yarıiletken-metal geçişleri meydana gelir (Şekil 4.41 c).

Bu sonuçlar, literatürdeki YFT sonuçları [4,5,7,9] ve yarı ampirik SB yaklaşımı sonuçları [2,6] ile uyumludur. Literatürdeki bu sonuçlar, ters örgü uzayında gerçekleştirilmiştir ve sıcaklık etkisi çalışmalara dahil edilmemiştir. Bu tez çalışmasında sonuçlar gerçek uzay hesaplamaları kullanılarak elde edilmiştir ve düşük yüksek sıcaklıkları içermektedir.

Eksenel gerinime bağlı olarak bütün zigzag TDKNT'lerin RDF, BUDF, BADF fiziksel özellikleri değişmektedir. Birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri uygulanan eksenel gerinim değerinde ve türünden etkilenmektedir. ZigzagTDKNT'lerin geometrik yapısına bağlı olarak, atomik bağların eksen doğrultusunda bileşenleri daha fazla olduğunda eksenel germe etkisinde bağ uzunluğu değeri ortalaması artmaktadır ve sıkıştırma etkisinde azalmaktadır. Benzer olarak zigzag TDKNT'lerde, KNT eksenine dik yönde bağ açısı sayısı daha fazla olduğundan (bir altıgen örgüdeki altı açının ikisi KNT eksen doğrultusunda, dördü KNT çevresel doğrultusunda) eksenel germe etkisinde bağ açısı artmakta iken sıkıştırma etkisinde azalmaktadır. BADF grafiklerinde, eksen doğrultusunda ki açılar yeni bir dağılım meydana getirdiklerinden, ortalama olarak 112° civarında yeni bir pik oluşmaktadır.

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta Young modülü ve Poisson oranı değerleri hesaplanmıştır. (12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin Young modülü (Y) sırası ile 363 GPa, 380 GPa ve 366 GPa olarak ve Poisson oranları sırası ile 0,247, 0,230 ve 0,241 olarak tespit edilmiştir. Bu elde edilen sonuçlar daha önce yapılan çalışmalarla uygunluk göstermektedir [27-29].

Çalışmanın üçüncü kısmında, 300K / 1200K sıcaklık değerlerinde (12,0), (13,0) ve (14,0) zigzag TDKNT'lerin enerjetik (E_{top}), elektronik (E_F , DOS , E_g) ve fiziksel (RDF, BUDF, BADF ve AKS) özelliklerinin, boşluk deformasyonlarına bağlı değişimleri incelenmiştir. Boşluk deformasyonları, KNT eksenine dik doğrultuda 1, 2, 3, 4 ve 5 boşluk olacak şekilde uygulanmıştır.

(12,0), (13,0) ve (14,0) TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin 0,1K /300K / 1200K sıcaklık değerlerinde uygulanan boşluk deformasyonlarına bağlı olarak değişimleri

incelenmiştir. TDKNT'lerin atom başına ortalama toplam enerjinin, boşluk sayısının artışına bağlı olarak arttığı tespit edilmiştir.

Boşluk deformasyonlarına bağlı olarak TDKNT'lerin elektronik özellikleri, Fermi enerji seviyesi (E_f), elektronik durum yoğunlukları (DOS) ve enerji bant aralıkları (E_g) kullanılarak incelenmiştir. Fermi enerji seviyesi, boşluk deformasyonuna bağlı olarak azalmakta fakat boşluk sayısına bağlı olarak fonksiyonel bir değişim göstermemektedir.

(12,0), (13,0) ve (14,0) zigzag TDKNT'lerin E_g değerleri, boşluk deformasyonları altında hesaplanmıştır. Metalik davranış gösteren $n \equiv 0 \pmod{3}$ sınıfı TDKNT'ün enerji bant aralığının boşluk sayısına bağlı olarak arttığı tespit edilmiştir. Yarıiletken davranış gösteren $n \equiv 1 \pmod{3}$ ve $n \equiv 2 \pmod{3}$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları boşluk sayısına bağlı olarak azalmaktadır ve bir boşluk deformasyonunda yarıiletken metal geçişi meydana gelmektedir. Literatürde, boşluk kusurları tek boşluk (TB) ve çift boşluk kusuru (ÇB) olarak sınıflandırılmıştır[14-19]. TB ve ÇB kusurlarında, TDKNT'lerin DOS grafiklerinde Fermi enerji seviyesi civarında yerleşmiş durumların meydana geldiği gösterilmiştir.

Zigzag TDKNT'lerin RDF dağılımları, TDKNT ekvator düzlemi üzerinde oluşturulan boşluk kusurlarına bağlı olarak değişim göstermemektedir. Bağ uzunluğu ve bağ açısı dağılımları da benzer olarak boşluk kusurlarından etkilenmemektedir. Ancak AKS dağılımı, boşluk kusurlarına bağlı olarak değişmektedir ve 3 değerinden başka, 2 değeri içinde dağılım meydana gelmektedir. Bu dağılım değeri, boşluk kusuru civarındaki atomların, koşulları ile 2 bağ yaptığını göstermektedir.

Çalışmanın dördüncü kısmında, burulma etkisindeki TDKNT'lerin atom başına toplam enerjileri (E_{top}), bağ yapısı enerjileri (E_{bs}), itici potansiyel enerjileri (E_{rep}), Fermi enerji seviyeleri (E_f), ve enerji bant aralıkları (E_g) incelenmiştir. Ayrıca bağ uzunluğu dağılım fonksiyonları (BLDF), bağ açısı dağılım fonksiyonları (BADF) ve radyal dağılım fonksiyonları (RDF) grafikleri oluşturulmuştur. Burulma, 0° ile 180° arasında uygulanmıştır. Simülasyonlar $T=0,1K$, $T=300K$ ve $T=1200K$ sıcaklıkları için gerçekleştirilmiştir. TDKNT'lerin ortalama toplam enerji değerleri burulma oranına bağlı olarak artmaktadır.

Burulma oranının artışına bağlı olarak $n \equiv 0(mod 3)$ ve $n \equiv 1(mod 3)$ sınıfı TDKNT'lerin enerji bant aralıkları artmaktadır. Metalik özellik gösteren $n \equiv 0(mod 3)$ sınıfı TDKNT'ler burulma etkisinde yarıiletken özellik gösterebilmektedir ve metal – yarıiletken geçişi meydana gelmektedir. Burulma deformasyonuna bağlı olarak grafenin ters uzay örgüsü ve WW' çizgi segmentleri ile ifade edilen TDKNT'ün ters uzay örgüsü ile olan yönelimleri değişir. Buna bağlı olarak K simetri noktası ile en yakın WW' çizgi segmenti arasındaki mesafe dolayısı ile enerji bant aralığı değişir ve belirli gerinim değerlerinde metal-yarıiletken ya da yarıiletken-metal geçişleri meydana gelir (Şekil 4.102).

Burulma deformasyonuna bağlı olarak RDF sonuçlarında, 1. ve 2. Komşu mesafelerinde değişim gözlenmemiştir. Buna karşın 3. Komşu mesafelerinin değiştiği tespit edilmiştir. Zigzag TDKNT'lerde 1. komşular TDKNT eksen doğrultusunda, 2. komşular ise radyal doğrultuda yer almaktadır. Bu nedenle burulmadan kaynaklanan yer değiştirmeler bu doğrultudaki atomlar arasındaki mesafeleri etkin bir şekilde değiştirmezken 3. Komşu atomlarının konumları burulmaya bağlı olarak daha fazla etkilenmektedir. Bağ uzunluklarındaki ve bağ açılarındaki değişimler zigzag TDKNT'ün geometrik yapısına ve uygulanan burulma deformasyonuna bağlı olarak etkilenmektedirler. Bu nedenle belirgin fonksiyonel bir davranış tespit edilememiştir.

Bu tezde yüksek sıcaklık, gerilim/sıkıştırma boşluk ve burulma deformasyonlarının TDKNT'lerin elektronik yapılarına etkisi incelenmiştir. TDKNT'ler kullanıldıkları elektronik devrelerde ani olarak yerel sıcaklık artışlarına uğramaktadır. Bu yüzden TDKNT'lerin düşük/yüksek sıcaklıklarda boşluk ve burulma deformasyonları etkisindemekanik ve elektronik özelliklerinin incelenmesi önemlidir. G. Dereli tarafından geliştirilen N- Mertebe Sıkı bağ moleküler dinamik simülasyon yöntemi sıcaklık etkisinde içeren sıkı-bağ algoritmaları ile bu çalışmalar için uygundur.

KAYNAKLAR

- [1] Capaz, R. B., Sapaturu, C. D., Tangney, P., Cohen, M. L. ve Louie, S. G. (2005). "Temperature Dependence of the Bant Gap of Semiconducting Carbon Nanotubes", *Physical Review Letters*, 94: 036801.
- [2] Shan, G. ve Bao, S., (2006). "The effect of deformations on electronic structures and optical properties of carbon nanotubes", *Physica E*, 35: 161-167.
- [3] Ogata, S. ve Shibutani, Y., (2003). "Ideal tensile strength and bant gap of single-walled carbon nanotubes", *Physical Review B*, 68: 165409.
- [4] Ito, T., Nishidate, K., Baba, M. ve Hasegawa, M., (2002). "First principles calculations for electronic bant structure of single-walled carbon nanotube under uniaxial strain", *Surface Science*, 514: 222–226.
- [5] Pullen, A., Zhao, G. L., Bagayoko, D. ve Yang, L., (2005). "Structural, elastic, and electronic properties of deformed carbon nanotubes under uniaxial strain", *Physical Review B*, 71: 205410.
- [6] Umeno, Y., Kitamura, T. ve Kushima, A., (2004). "Metallic–semiconducting transition of single-walled carbon nanotubes under high axial strain", *Computational Materials Science*, 31: 33-41.
- [7] Sreekala, S., Peng, X-H., Ajayan, P. M., ve Nayak, S. K., (2008). "Effect of strain on the bant gap and effective mass of zigzag single-wall carbon nanotubes: First-principles density-functional calculations", *Physical Review B*, 77: 155434.
- [8] Zhang, J-M., Liang, R-L. ve Xu, K-W., (2010). "Effect of uniaxial strain on the bant gap of zigzag carbon nanotubes", *Physica B*, 405: 1329-1334.
- [9] Valavala, P. K., Banyai, D., Seel, M. ve Pati, R., (2008). "Self-consistent calculations of strain-induced bant gap changes in semiconducting (n,0) carbon nanotubes", *Physical Review B*, 78: 235430.
- [10] Zhang, Y. ve Han, M., (2011). "Bant gap of carbon nanotubes under combined uniaxial–torsional strain", *Physica E*, 43: 1774-1778.
- [11] Leonor, C., Benedict, L. X., Steven, Louie, G. ve Cohen, M. L., (1996). "Quantum conductance of carbon nanotubes with defects", *Physical Review B*, 54: 2600.

- [12] Lu,A. J. ve Pan,B. C., (2004). "Nature of SingleVacancy in Achiral Carbon Nanotubes", Physical Review Letters, 92 (10): 105504 .
- [13] Tien,L-G.,Tsai, C-G., Li,F-Y. ve Lee,M-H., (2005). "Bant-gap modification of defective carbon nanotubes under a transverse electric field", Physical Review B, 72: 245417.
- [14] Orellana,W. ve Fuentealba, P., (2006). "Structural, electronic and magnetic properties of vacancies in single-walled carbon nanotubes", Surface Science, 600:4305–4309.
- [15] Jhi,S-H., (2007). "An ab initio study of the electronic properties of carbon nanotubes activated by hydrogen-passivated vacancies ", Carbon, 45,: 2031–2036.
- [16] Okada,S., (2007). "Energetics and electronic structures of carbon nanotubes with adatom–vacancy defects", Chemical Physics Letters, 447: 263–267.
- [17] Ishii,H., Kobayashi,N. ve Hirose, K., (2007). "Time-dependent wave-packet approach to the quantum transport of carbon nanotubes with vacancies", Surface Science, 601: 5266–5269.
- [18] Rocha,A. R., Padilha,J. E., Fazzio,A. ve da Silva,A. J. R., (2008). "Transport properties of single vacancies in nanotubes", Physical Review B, 77: 153406.
- [19] Berber,S., ve Oshiyama,A., (2008). "Atomic and electronic structure of divacancies in carbon nanotubes", Physical Review B, 77: 165405.
- [20] Faizabadi,E. ve Bagheri,A., (2009). "Effects of vacancy percentage on the energy gap of zigzag single-wall carbon nanotubes", Physica E 41: 1828–1831.
- [21] Clauss, W., Bergeron,D.J. ve Thomson, A. T., (1998). "Atomic resolution STM imaging of a twisted single-wall carbon nanotube", Physical Review B, 58 (8): R4266.
- [22] Treister, Y. ve Pozrikidis,C., (2008). "Numerical study of equilibrium shapes and deformation of single-wall carbon nanotubes ", Computational Materials Science, 41: 383.
- [23] Zhang, D-B., James,R. D. ve Dumitrica,T., (2009). "Electromechanical characterization of carbon nanotubes in torsion via symmetry adapted tight-binding objective molecular dynamics ", Physical Review B, 80: 115418.
- [24] Wang,S., Wang,R., Wu,X., ZhangH.,Lui,R., (2010). "Axial strainandtwist-inducedchangesintheelectronicstructure of carbonnanotubes", Physica E.
- [25] Özdoğan, C., Dereli, G. ve Çağın, T., (2002). "O(N) parallel tight binding molecular dynamics simulation of carbon nanotubes", Computer Physics Communications, 148: 188-205.
- [26] Dereli, G. ve Özdoğan, C.,(2003). "O(N) algortihms in TBMD simulations of the electronic structure of carbon nanotubes", Physical Review B, 67: 0354415.

- [27] Dereli, G. ve Özdoğan, C., (2003). "The Structural Stability and Energetics of Single-Walled Carbon Nanotubes under Uniaxial Strain", *Physical Review B*, 67: 0354416.
- [28] Dereli,G. ve Süngü,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.
- [29] Dereli,G., Süngü,B. ve Özdoğan,C.,(2007). "Thermal Stability of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes: an O(N) Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation Study", *Nanotechnology*, 18: 245704.
- [30] Dereli, G., Süngü, B. ve Eyecioğlu, Ö., (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.
- [31] 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.
- [32] 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.
- [33] 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 Vol. 1, Chapter 2: Carbon Nano Structures & Devices*, 292-295.
- [34] Saito, R., Dresselhaus, G. ve Dresselhaus, M., (1998). *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London.
- [35] Ghosh, K., (2005). *Electronic Band Structure of Carbon Nanotubes*, Stanford University, California.
- [36] Allen, M., P., Tildesley, D., J., (1991). *Computer Simulations of Liquids*, Oxford University Press, New York.
- [37] Rapaport, D., C., (1995). *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Second Edition, Cambridge University Press, New York.
- [38] Frenkel, D. ve Smit, B., (1996), *Understanding Molecular Simulation*, Academic Press, San Diego.
- [39] Colombo, L., (1996), "Tight-Binding Molecular Dynamics", *Annual Reviews of Computational Physics*, IV:147-183.
- [40] Colombo, L., (1998), "Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations", *Computational Materials Science*, 12:278-287.
- [41] Colombo, L. ve Rosati, M., (2000), "Parallel Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations on Symmetric Multi-Processing Platforms", *Computer Physics Communications*, 128:108-117.

- [42] Xu, C.H., Wang, C.Z., Chan, C.T. ve Ho, K.M., (1992), "A Transferable Tight-Binding Potential for Carbon", J. Phys.: Condens. Matter, 4:6047-6054.
- [43] Slater, J.C. ve Koster, G.F., (1954), "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem", Physical Review , 94(6):1498-1524.
- [44] Özdoğan, C., (2002), O(N) Parallel Tight-Binding Molecular Dynamics Computer Simulation: Application to Carbon Nanotubes, Ortadoğu Teknik Üniversitesi, Doktora Tezi.
- [45] Bowler, D.R., Aoki, M., Goringe , C.M., Horsfield, A.P. ve Pettifor, D.G., (1997), "A Comparison of Linear Scaling Tight-Binding Methods", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.,5: 199-222.
- [46] Ordejon, P., (1998), "Order-N Tight-Binding Methods for Electronic Structure and Molecular Dynamics", Computational Materials Science, 12:157-191.
- [47] Eyecioğlu, Ö., (2005), Bilgisayar Simülasyon Yöntemi İle Karbon Nanotüplerin Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Yüksek Lisans Tezi.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı :Önder EYECİOĞLU.
Doğum Tarihi ve Yeri : 10.05.1979
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta :oeyecig@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniv.	2005
Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniv.	2000
Lise	Fen-Mat.	Bolu Atatürk Lisesi	1995

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2003-2012	Yıldız Teknik Üniv.	Araştırma Görevlisi

YAYINLARI

Makale

1. G.Dereli, B.Süngü, Ö. Eyecioğlu "Vacancy Effect on the Thermal and Tensile Stability of (10,10) Single Walled Carbon Nanotube" Balkan Physics Letters 18, 181023 (2010).
2. G. Dereli, B. Süngü, Ö. Eyecioğlu, N. Vardar, "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, (2007).

Proje

- | | | | | | |
|----|---|----------------------------|-----------------------|-------------|----------|
| 1. | Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin (TDKNT) Gerinim Altında Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Bilgisayar Simülasyonu | Yıldız Teknik Üniversitesi | 15.05.2010-15.05.2012 | Araştırmacı | BAPK-KAP |
| 2 | Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin (TDKNT) Gerinim Altında Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Bilgisayar Simülasyonu | Yıldız Teknik Üniversitesi | 01.07.2004-02.04.2008 | Araştırmacı | BAPK-KAP |