

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

NANOMALZEMELERİN BİLGİSAYAR SİMÜLASYONU

NECATİ VARDAR

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
FİZİK PROGRAMI**

**DANIŞMAN
PROF. DR. GÜLAY DERELİ**

İSTANBUL, 2012

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

NANOMALZEMELERİN BİLGİSAYAR SİMULASYONU

Necati VARDAR tarafından hazırlanan tez çalışması 27/12/2012 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. Kubilay KUTLU
Yıldız Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Nurten ÖNCAN
İstanbul Üniversitesi

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR
Yıldız Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Alper KİRAZ
Koç Üniversitesi

Bu alıřma, Yıldız Teknik Üniversitesi Bilimsel Arařtırma Projeleri Koordinatörlüğü' nün **YTÜ BAPK 2009-01-01-KAP01** ve **YTÜ BAPK 2010-01-01-DOP01** numaralı projeleri ile desteklenmiřtir.

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesi (YTÜ) Fen Bilimleri Enstitüsü (FBE) Fizik Anabilim dalında doktora tezi olarak hazırlanmış olup, “Gerinim Altındaki Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapılarındaki Değişim: Paralel $O(N)$ Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyonu” başlık ve 2010-01-01-DOP01 numaralı YTÜ BAPK Projesinin bitirme raporu olma özelliğini taşımaktadır.

Doktora tezi çalışmalarım, Yıldız Teknik Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nde 2003 yılında Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından kurulan yüksek başarılı hesaplama yapan “Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarında” gerçekleştirilmiştir.

Her şeyden önce, bu çalışmanın yapılmasında bana her zaman destek olan, çalışmalarımı yönlendiren, araştırmalarımın her aşamasında bilgi, birikim ve deneyimleriyle bana rehber ve yardımcı olan, “Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarında” çalışma fırsatı veren danışman hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ’ye teşekkür ederim.

Tez çalışmalarım sırasında yardımlarını benden esirgemeyen başta Dr. Önder EYECİOĞLU olmak üzere Dr. Banu SÜNGÜ MISIRLIOĞLU’na, bu dönem içerisinde laboratuvardaki çalışma arkadaşlarıma teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Benden her türlü maddi, manevi desteklerini esirgemeyen, sonsuz sevgi ve destekleriyle yanımda olan sevgili babam Atilla VARDAR’a, bugünleri göremesede her zaman yanımda olduğunu bildiğim rahmetli annem Sebahat VARDAR’a teşekkür ederim.

Son olarak çalışmalarımın her aşamasında bana inanan ve motivasyonumu kaybettiğim zamanlarda beni motive ederek yol almamı sağlayan biricik hayat arkadaşım Deniz ÖZKAN VARDAR’a en derin teşekkürlerimi sunarım.

Aralık, 2012

Necati VARDAR

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	viii
KISALTMA LİSTESİ	x
ŞEKİL LİSTESİ.....	xi
ÇİZELGE LİSTESİ	xix
ÖZET	xx
ABSTRACT	xxii
BÖLÜM 1	1
GİRİŞ	1
1.1 Literatür Özeti.....	1
1.2 Tezin Amacı.....	6
1.3 Bulgular	8
BÖLÜM 2	10
KARBON NANOTÜPLER	10
2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler	12
2.2 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması	13
2.2.1 Karbon Nanotüplerin Vektör Notasyonu	13
2.2.1.1 Kiral Vektör.....	13
2.2.1.2 Öteleme Vektörü.....	16
2.2.1.3 Simetri Vektörü	17
2.2.2 Karbon Nanotüplerin Birim Hücre ve Brillouin Bölgesi.....	19
2.2.2.1 Birim Hücre	19
2.2.2.2 Ters Örgü ve Brillouin Bölgesi	20

BÖLÜM 3	22
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISI	22
3.1 Tek Elektron Dağılım Bağlantıları	22
3.1.1 Enerji Dağılım Bağlantılarının Bölge Katlanması	22
3.1.2 Koltuksu (Armchair) Karbon Nanotüplerin Enerji Dağılımları	26
3.1.3 Zigzag Karbon Nanotüplerin Enerji Dağılımları	28
3.2 Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunlukları ve Enerji Bant Aralıkları	29
BÖLÜM 4	31
SİMÜLASYON YÖNTEMİ	31
4.1 Moleküler Dinamik Metot	31
4.2 Verlet Algoritması	33
4.3 Kanonik (NVT) Moleküler Dinamik	38
4.4 Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi	40
4.5 N-Mertebe (O(N)) Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) Yöntemi	43
4.6 Simülasyon Parametrelerinin Belirlenmesi	44
BÖLÜM 5	52
BİLGİSAYAR SİMÜLASYON SONUÇLARI	52
5.1 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları	52
5.1.1 300K Sıcaklığında Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları	53
5.1.1.1 (18,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı...	54
5.1.1.2 (19,0) - (22,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı.....	61
5.1.1.3 (20,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı...	74
5.1.1.4 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel Yapısı	81
5.1.1.5 Sonuçlar.....	91
5.1.2 0.1K, 900K, 1200K ve 1500K Sıcaklıklarda Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları.....	96
5.1.2.1 (18,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı...	96
5.1.2.2 (19,0) - (22,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı.....	99
5.1.2.3 (20,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı.	104
5.1.2.4 Sonuçlar.....	107
5.2 Farklı Boylardaki Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları	110
5.2.1 Sonuçlar.....	119
5.3 Düşük – Yüksek Sıcaklıklarda Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri	121
5.3.1 (18,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Fiziksel ve Elektronik Özellikleri.....	129

5.3.2	(19,0) ve (22,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri	139
5.3.3	(20,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri.....	157
5.3.4	Sonuçlar.....	167
5.4	Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Dayanıklılıkları	169
5.4.1	Yüksek Sıcaklıklarda Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler	169
5.4.2	300K Sıcaklığında Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler.....	182
5.4.3	Yüksek Sıcaklıklarda Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler.....	191
BÖLÜM 6		198
SONUÇLAR ve ÖNERİLER.....		198
KAYNAKLAR.....		210
EK-A.....		218
Δt PARAMETRESİNİN BELİRLENMESİ		218
EK-B.....		219
(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) ZİGZAG TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN 0.1K GRAFİKLERİ.....		219
EK-C.....		224
TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN 80 KATMAN SİMÜLASYON GÖRÜNTÜLERİ ...		224
EK-D.....		225
YÜKSEK SICAKLIKLARDA GERME - SIKIŞTIRMA ETKİSİ ALTINDAKİ TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN SİMÜLASYON GÖRÜNTÜLERİ		225
ÖZGEÇMİŞ.....		228

SİMGE LİSTESİ

$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	Altıgen örgü birim vektörleri
$\vec{a}(t)$	t anındaki ivme
$\vec{b}_1, \vec{b}_2$	Altıgen örgü ters örgü vektörleri
$\vec{C}_h$	Kiral Vektör
$C_{l\alpha}^n$	Doluluk katsayısı
d_R	$(2m+n)$ ve $(2n+m)$ sayılarının en büyük ortak böleni
d_t	KNT'nin çapı
E_{bs}	Bant yapısı enerjisi
E_f	Fermi Enerji Seviyesi
E_g	Enerji Bant Aralığı
$E_{g2D}(\vec{k})$	Grafen için enerji dağılım bağıntısı
$E_g^a(k)$	Koltuksu KNT için enerji dağılım bağıntısı
$E_g^z(k)$	Zigzag KNT için enerji dağılım bağıntısı
$\bar{E}_k$	Ortalama kinetik enerji
E_{kin}	Kinetik enerji
E_{top}	Toplam enerji
f_{FD}	Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu
$f_{ll'}(\vec{R}_{\gamma\beta})$	Ölçeklendirme fonksiyonu
$\vec{f}_{top,i}(t)$	Toplam kuvvet
$\vec{F}_\alpha$	Atomlar arası kuvvet
$\hbar$	Tek parçacık hamiltoniyeni
H	Transfer Matrisi
H_{top}	Toplam hamiltoniyen
k_B	Boltzmann sabiti
$\vec{K}_1, \vec{K}_2$	TDKNT'nin ters örgü vektörleri
N	KNT'nin birim hücresindeki hegzagon sayısı
$N(E_F)$	Birim uzunluk başına durum yoğunluğu
$\vec{r}(t)$	t anındaki konum
$\vec{R}$	Simetri Vektörü

S	Overlap Matrisi
$\vec{T}$	Öteleme Vektörü
T_e	Elektronların kinetik enerjisi
T_i	İyonların kinetik enerjisi
U_{ee}	Elektron-elektron etkileşimleri potansiyel enerjisi
U_{ei}	Elektron-iyon etkileşimleri potansiyel enerjisi
U_{ii}	İyon-iyon etkileşimleri potansiyel enerjisi
U_{rep}	İtici potansiyel
$\vec{v}(t)$	t anındaki hız
$\text{\AA}$	Angstrom
β	Ölçeklendirme sabiti
θ	Kiral Açısı
$\rho(\epsilon)$	Elektronik durum yoğunluğu
$\Phi_{l\alpha}$	Löwdin orbitalleri
ϵ_n	Sistemin n . <i>inci</i> durum enerji özdeğeri
$ \psi_n\rangle$	Sistemin n . <i>inci</i> durum öz fonksiyonu

KISALTMA LİSTESİ

aKNT	Koltuksu (Armchair) Karbon Nanotüp
AKS	Atomik Koordinasyon Sayısı
BADF	Bağ-Açısı Dağılım Fonksiyonu
BAPK	Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü
BUDF	Bağ Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu
cKNT	Kiral (Chiral) Karbon Nanotüp
ÇDKNT	Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
DAC	Divide and Conquer
eDOS	Elektronik Durum Yoğunluğu
GSP	Goodwin-Skinner-Pettifor
KNT	Karbon Nanotüp
LJ	Lennard-Jones
MD	Moleküler Dinamik
O(N)	N-Mertebeli
O(N ³)	N ³ -Mertebeli
OBEB	Ortak Bölenlerin En Büyüğü
PAW	Projector-Augmented Wave
PSK	Periyodik Sınır Koşulları
PVM	Parallel Virtual Machine
RDF	Radyal Dağılım Fonksiyonu
REBO	Reactive Empirical Bond Order
SB	Sıkı-Bağ
SBMD	Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik
SESAM	Yarı iletken Doyabilen Soğurucu Ayna
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
TEM	Geçirimli Elektron Mikroskobu
VASP	Vienna Ab-initio Simulation Package
YFT	Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi
zKNT	Zigzag Karbon Nanotüp

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 2. 1	(a) Tek duvarlı karbon nanotüp, (b) Çok duvarlı karbon nanotüp 10
Şekil 2. 2	Birim hücre gösteren altıgen (Bernal) grafit yapısı [32-33]..... 11
Şekil 2. 3	Elektron ve bunların görelî spin düzenlemesi (a) karbon elementi, (b) grafen, (c) orbitallerin gösterimi [33]. 12
Şekil 2. 4	İki boyutlu grafen bütün boyutlarıyla karbon allotroplarının yapı taşı olarak kabul edilebilir, örneğin 0-boyut (0B) buckyballs, 1-boyut (1B) nanotüp ve 3-boyut (3B) grafit [35]. 12
Şekil 2. 5	(a) Koltuksu (Armchair), (b) Zigzag ve (c) Kiral Karbon Nanotüp 13
Şekil 2. 6	İki boyutlu grafenin altıgen örgü birim vektörlerine bağılı olarak kiralite vektörünün tanımlanması, (a) (6,0) Zigzag TDKNT (b) (4,4) Koltuksu TDKNT 14
Şekil 2. 7	$\vec{C}_h = (3,3)$ vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim baz vektörleri ile kiral açısının gösterimi..... 15
Şekil 2. 8	Grafenin karbon nanotüpe dönüşmesi için vektör tanımı. Sırasıyla, $\vec{T}$ öteleme vektörü, $\vec{R}$ simetri vektörü ve $\vec{C}_h$ kiral vektörü (şekildeki gösterim (3,3) TDKNT içindir) 16
Şekil 2. 9	Uzay grup simetri operasyonu $\vec{R} = (\Psi, \tau)$, Ψ nanotüp eksenî etrafındaki dönmenin açısı. τ , $\vec{T}$ vektörü doğrultusundaki geçiş..... 17
Şekil 2. 10	Sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklığında birim hücrelerinin anlık simülasyon görüntüleri 19
Şekil 2. 11	(a) Grafen levhanın altıgen örgüleri. Birim hücre, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ tarafından tanımlanan kesikli çizgilerle gösterilen alan. (b) $\vec{b}_1$ ve $\vec{b}_2$ vektörleri altıgen örgünün ters örgü vektörleri olup, renkli taralı alan birinci Brillouin bölgesi olarak tanımlanır. Yüksek simetri noktaları Γ K M, bu bölge üzerinde kesikli çizgilerle gösterilmektedir [34]. 20
Şekil 2. 12	(n,n) koltuksu ve (n,0) Zigzag TDKNT'lerin birinci Brillouin bölgeleri [36] 21
Şekil 3. 1	(a) İki boyutlu grafitin enerji dağılımı [37], (b) Yüksek simetri noktaları Γ , K ve M'nin gösterimi [34] 23
Şekil 3. 2	Metalik Enerji Bandı Şartı [34] 24
Şekil 3. 3	Metalik ve Yarı iletken Karbon Nanotüpler [38] 25
Şekil 3. 4	Koltuksu TDKNT'nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi..... 26

Şekil 3. 5	(a) (5,5) Koltuksu, (b) (9,0) Zigzag ve (c) (10,0) Zigzag TDKNT'lerin bir boyutlu enerji dağılım bağıntıları [34]	27
Şekil 3. 6	Zigzag TDKNT'nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi	28
Şekil 3. 7	(9,6) ve (7,4) kiral karbon nanotüplerin enerji bantları [40]	29
Şekil 3. 8	(8,8), (9,9), (10,10) ve (11,11) koltuksu karbon nanotüplerin SB modeli ile hesaplanan elektronik durum yoğunlukları [40]	30
Şekil 4. 1	Periyodik Sınır Koşulları	31
Şekil 4. 2	Moleküler Dinamik Akış Diyagramı	32
Şekil 4. 3	Verlet Akış Diyagramı [43]	36
Şekil 4. 4	Velocity Verlet Akış Diyagramı [43]	37
Şekil 4. 5	Kanonik (NVT) Küme	38
Şekil 4. 6	Sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ simülasyon görüntüleri.....	45
Şekil 4. 7	$\Delta t = 0.02$ fs (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişimi	46
Şekil 4. 8	$\Delta t = 0.02$ fs (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişim	47
Şekil 4. 9	$\Delta t = 1$ fs (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişimi	48
Şekil 4. 10	$\Delta t = 1$ fs (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişimi	49
Şekil 4. 11	(18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'lerin "Buffer Skin Size" parametresine bağlı olarak $O(N^3)$ - $O(N)$ toplam enerji fark grafikleri.....	50
Şekil 4. 12	(20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin "Buffer Skin Size" parametresine bağlı olarak $O(N^3)$ - $O(N)$ toplam enerji fark grafikleri.....	51
Şekil 5. 1	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri	54
Şekil 5. 2	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %4 germe etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....	55
Şekil 5. 3	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	56
Şekil 5. 4	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi	57
Şekil 5. 5	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi	58
Şekil 5. 6	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi	58
Şekil 5. 7	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri	59
Şekil 5. 8	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim	60
Şekil 5. 9	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri	61
Şekil 5. 10	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri	61

Şekil 5. 11	(19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta sırasıyla %2 ve %-3 gerinim etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	63
Şekil 5. 12	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	64
Şekil 5. 13	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	65
Şekil 5. 14	(19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	66
Şekil 5. 15	(19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi.....	68
Şekil 5. 16	(19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi	69
Şekil 5. 17	(19,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri	70
Şekil 5. 18	(22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %2 germe %5 sıkıştırma etkisinde eDOS grafikleri.....	71
Şekil 5. 19	(19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim	73
Şekil 5. 20	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri	74
Şekil 5. 21	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %4 sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	75
Şekil 5. 22	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi	76
Şekil 5. 23	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi	77
Şekil 5. 24	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi	78
Şekil 5. 25	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi	78
Şekil 5. 26	(20,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri	79
Şekil 5. 27	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim	80
Şekil 5. 28	(18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	83
Şekil 5. 29	(18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	83
Şekil 5. 30	(18,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime	84
Şekil 5. 31	(18,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi	84
Şekil 5. 32	(19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	85
Şekil 5. 33	(19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	85

Şekil 5. 34	(19,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime	86
Şekil 5. 35	(19,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi	86
Şekil 5. 36	(20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	87
Şekil 5. 37	(20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	87
Şekil 5. 38	(20,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime	88
Şekil 5. 39	(20,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi	88
Şekil 5. 40	(22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	89
Şekil 5. 41	(22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi	89
Şekil 5. 42	(22,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime	90
Şekil 5. 43	(22,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi	90
Şekil 5. 44	$(n-m) = 3q$, $(n-m) = 3q + 1$ ve $(n-m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralıklarındaki değişim	92
Şekil 5. 45	(a) Germe, (b) Sıkıştırma etkisi ile Zigzag TDKNT'lerin bağ- açılarındaki değişim	94
Şekil 5. 46	$(n-m) = 3q$, $(n-m) = 3q + 1$ ve $(n-m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin bağ-açısı dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi .	95
Şekil 5. 47	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi	97
Şekil 5. 48	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	97
Şekil 5. 49	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi	98
Şekil 5. 50	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi	100
Şekil 5. 51	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi	100
Şekil 5. 52	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	101
Şekil 5. 53	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	101
Şekil 5. 54	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi	103
Şekil 5. 55	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi	103

Şekil 5. 56	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi 105
Şekil 5. 57	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi..... 105
Şekil 5. 58	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K – 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi 106
Şekil 5. 59	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 0.1K – 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının gerinime bağlı değişimi ... 109
Şekil 5. 60	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta 5 – 8 – 20 ve 80 katman sayısında enerjilerindeki değişim 112
Şekil 5. 61	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta nanokuşak, 8 ve 20 katman simülasyon görüntüleri 113
Şekil 5. 62	(18,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim..... 115
Şekil 5. 63	(19,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim..... 116
Şekil 5. 64	(20,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim..... 117
Şekil 5. 65	(22,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim..... 118
Şekil 5. 66	(n,0) Zigzag TDKNT'lerin yarıçaplarının karşılaştırılması 122
Şekil 5. 67	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi 125
Şekil 5. 68	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi 126
Şekil 5. 69	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi 127
Şekil 5. 70	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi 128
Şekil 5. 71	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 100, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri..... 129
Şekil 5. 72	Simülasyon süresince (18,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi 130
Şekil 5. 73	(18,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi 131
Şekil 5. 74	(18,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi 132
Şekil 5. 75	(18,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi 133
Şekil 5. 76	(18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi 135
Şekil 5. 77	(18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi 136
Şekil 5. 78	(18,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi 137
Şekil 5. 79	(18,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi 138

Şekil 5. 80	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 100, 300 ve 900K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri.....	139
Şekil 5. 81	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 40, 200, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri.....	139
Şekil 5. 82	Simülasyon süresince (19,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi	142
Şekil 5. 83	(19,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	143
Şekil 5. 84	(19,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	144
Şekil 5. 85	(19,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi	144
Şekil 5. 86	Simülasyon süresince (22,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi	145
Şekil 5. 87	(22,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	146
Şekil 5. 88	(22,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	147
Şekil 5. 89	(22,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi	147
Şekil 5. 90	(19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	149
Şekil 5. 91	(22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	150
Şekil 5. 92	(19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	151
Şekil 5. 93	(22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	152
Şekil 5. 94	(19,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	153
Şekil 5. 95	(22,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	154
Şekil 5. 96	(19,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi	155
Şekil 5. 97	(22,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi	156
Şekil 5. 98	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 200, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri.....	157
Şekil 5. 99	Simülasyon süresince (20,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi	159
Şekil 5. 100	(20,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	160
Şekil 5. 101	(20,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi	161
Şekil 5. 102	(20,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi	161
Şekil 5. 103	(20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	163

Şekil 5. 104	(20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	164
Şekil 5. 105	(20,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi	165
Şekil 5. 106	(20,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi	166
Şekil 5. 107	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi	171
Şekil 5. 108	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi	172
Şekil 5. 109	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi	173
Şekil 5. 110	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi	174
Şekil 5. 111	(18,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi	175
Şekil 5. 112	(18,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri	175
Şekil 5. 113	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 3000K'de yapısal kararlılığının bozulduğu simülasyon görüntüsü	176
Şekil 5. 114	(19,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi	177
Şekil 5. 115	(19,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri	178
Şekil 5. 116	(20,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi	179
Şekil 5. 117	(20,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri	180
Şekil 5. 118	(22,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi	180
Şekil 5. 119	(22,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri	181
Şekil 5. 120	(18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....	183
Şekil 5. 121	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü	184
Şekil 5. 122	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....	185
Şekil 5. 123	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü	186
Şekil 5. 124	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....	187
Şekil 5. 125	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%21$ değerinde simülasyon görüntüsü	188
Şekil 5. 126	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi.....	189

Şekil 5. 127	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü	190
Şekil 5. 128	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 900K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	192
Şekil 5. 129	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 1200K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	193
Şekil 5. 130	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	194
Şekil 5. 131	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%21$ değerinde simülasyon görüntüsü	195
Şekil 5. 132	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerinde simülasyon görüntüsü	195
Şekil 5. 133	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerinde simülasyon görüntüsü	196
Şekil 5. 134	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerinde simülasyon görüntüsü	196
Şekil 5. 135	(n-m) = 3q, (n-m) = 3q + 1 ve (n-m) = 3q + 2 grubundaki Zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi.....	200
Şekil 5. 136	(n-m) = 3q, (n-m) = 3q + 1 ve (n-m) = 3q + 2 grubundaki Zigzag TDKNT'lerin bağ – açısı dağılım fonksiyonlarının gerinime bağlı değişimi	201
Şekil 5. 137	(18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	220
Şekil 5. 138	(20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi.....	221
Şekil 5. 139	(18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi	222
Şekil 5. 140	(20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi	223
Şekil 5. 141	(a)(18,0), (b)(19,0) ve (c) (20,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta 80 katman simülasyon görüntüleri	224
Şekil 5. 142	(18,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü	225
Şekil 5. 143	(19,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü	226
Şekil 5. 144	(20,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü	226
Şekil 5. 145	(22,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerindeki simülasyon görüntüsü	227

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 2. 1	Grafenin allotropları [33] 11
Çizelge 2. 2	Karbon nanotüplerin sınıflandırılması 15
Çizelge 2. 3	Karbon nanotüplerle ilgili denklem ve parametreler [33] 18
Çizelge 5. 1	300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ortalama toplam enerjileri ve Fermi enerji seviyeleri..... 91
Çizelge 5. 2	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin 300K de farklı gerinim değerlerinde bağ açıları..... 93
Çizelge 5. 3	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin denge durumunda 0.1, 300, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde Fermi enerjisindeki değişim 107
Çizelge 5. 4	300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin fiziksel özellikleri 111
Çizelge 5. 5	300K sıcaklıkta Zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre ortalama enerjileri 111
Çizelge 5. 6	300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre Fermi enerjilerindeki değişim..... 114
Çizelge 5. 7	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta enerji bant aralığının TDKNT'nin boyuna göre değişimi 120
Çizelge 5. 8	Çalışan düşük – yüksek sıcaklık aralıkları..... 123
Çizelge 5. 9	Zigzag TDKNT'lerin gruplandırılması 123
Çizelge 6. 1	Farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ sıcaklıkta atom sayısı ve boy değerleri..... 203
Çizelge 6. 2	Farklı Boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ sıcaklıkta enerji bant aralıkları 204
Çizelge 6. 3	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ilk atom kopmalarının başladığı ($T_1(K)$) ve yapısal kararlılıklarının bozulduğu ($T_2(K)$) sıcaklık değerleri, parantez içindeki değerler MD adıma karşılık gelmektedir.. 207
Çizelge 6. 4	(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda gerinime bağlı dayanıklılık (%) değerleri ilk atom kopmalarını göstermektedir..... 209

NANOMALZEMELERİN BİLGİSAYAR SİMÜLASYONU

Necati VARDAR

Fizik Anabilim Dalı

Doktora Tezi

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Gülay DERELİ

Tek duvarlı karbon nanotüpler (TDKNT), 1-10 nm çapına ve bu çapa kıyasla daha uzun bir boya sahip, karbondan üretilen içi boş silindir şeklindeki yapılardır. TDKNT'lerin yapısı kiral vektörüyle tanımlanır. TDKNT'ler yapısal parametrelerine bağlı olarak metalik veya yarı iletken olabilirler.

Tezin ilk bölümünde, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altında elektronik (Fermi enerji seviyesi, elektronik durum yoğunluğu, enerji bant aralığı) ve fiziksel özellikleri (atomik koordinasyon sayısı, bağ-açısı, bağ-uzunluğu ve radyal dağılım fonksiyonu) Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) simülasyon yöntemi kullanılarak gerçek uzayda sıcaklık etkisini içerecek şekilde incelendi. Germe – sıkıştırma etkisi altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik özelliklerinde metal – yarıiletken, yarıiletken – metal geçişleri gözlemlendi.

İkinci bölümde, 300K sıcaklık değerinde farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik özellikleri incelendi. Bu çalışmada, TDKNT'ler nanokuşak (5 katman), 8, 20 ve 80 katmanlı yapılar olarak seçildi.

Üçüncü bölümde, düşük – yüksek sıcaklıklarda (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özelliklerinin değişimi incelendi.

Tezin son bölümünde, yüksek sıcaklıklarda, germe – sıkıştırma etkisi altında, yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin dayanıklılıkları incelendi.

Çalışmalarımnda, Tek duvarlı karbon nanotüp simülasyonu için Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilen Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik programı kullanıldı.

Anahtar Kelimeler: Karbon Nanotüp, Tek Duvarlı Karbon Nanotüp, Nanokuşak, Moleküler Dinamik, N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi, Elektronik Durum Yoğunluğu, Enerji Bant Aralığı, Fermi Enerji Seviyesi, Düşük – Yüksek Sıcaklık, Germe – Sıkıştırma, Yarı iletken – Metal Geçişleri, Radyal Dağılım Fonksiyonu, Bağ Açısı Dağılım Fonksiyonu, Bağ Uzunluğu Dağılım Fonksiyonu, Dayanıklılık Çalışmaları.

COMPUTER SIMULATION OF NANOMATERIALS

Necati VARDAR

Department of Physics

Ph.D. Thesis

Advisor: Prof. Dr. Gülay DERELİ

A single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) are a hollow cylindrical structure of carbon atoms with a diameter that ranges from 1 to 10 nm and having a length longer than this diameter. The structure of single-walled carbon nanotubes is clearly described by a chiral vector. Depending on the structural parameters, single-walled carbon nanotubes can be either metallic or semiconducting.

In the first part of this thesis, the electronic properties (Fermi energy level, electronic density of states, energy band gap) and physical properties (atomic coordination number, bond-angle, bond-length and radial distribution function) under various uniaxial strain values at elevated temperatures are investigated. During simulations, Order (N) Tight-Binding Molecular Dynamics technique in parallel environment which is improved and successfully applied to SWCNT simulations by G. Dereli was used. We studied (18,0), (19,0), (20,0) and (22,0) zigzag SWCNTs. Depending on the applied uniaxial strain, metal – semiconductor and semiconductor – metal transitions are observed.

In the second part, the electronic properties of different sizes (18,0), (19,0), (20,0) and (22,0) zigzag SWCNTs at 300K are investigated. In this study, nanoribbon, 8, 20, and 80 layered structures were chosen.

In the third part of the thesis, the electronic and physical properties of (18,0), (19,0), (20,0) and (22,0) zigzag SWCNTs at low and high temperature are investigated.

In the last part of the thesis, durability of (18,0), (19,0), (20,0) and (22,0) zigzag SWCNTs are investigated. Deformations due to uniaxial strain and heating are studied.

Order (N), parallel tight-binding molecular dynamics program which is improved and written by Prof. Dr. Gülay Dereli is used in SWCNT simulations.

Keywords: Carbon Nanotubes, Single Wall Carbon Nanotube, Nanoribbon, Molecular Dynamics, Order N Tight - Binding Molecular Dynamics Method, Electronic Density of States, Energy Band Gap, Fermi Energy Level, Low - High Temperature, Stress – Strain, Semiconductor – Metal Transitions, Radial Distribution Function, Bond-Angle Distribution Function, Bond-Length Distribution Function, Durability Studies.

1.1 Literatür Özeti

Nanoteknoloji, maddenin atom ve moleküler düzeyde düzenlenmesi ve kontrol edilmesi yoluyla gerçekleştirilen işlemlere verilen genel addır. Nano kelimesi Yunanca “nannos” (küçük yaşlı adam veya cüce), Latince ise “nanus” kelimelerinden türetilmiştir. Türkçe de sözcük olarak, bir fiziksel büyüklüğün bir milyarda biri anlamına gelmektedir. Örnek vermek gerekirse; insan tırnağı her saniyede bir nanometre (nm) uzamakta ve insan saç teli çapının yaklaşık olarak 100.000 nm olduğu bilinmektedir. Başka bir deyişle, nanometre yanyana dizilmiş 3-5 atomun uzunluğuna denk gelmektedir.

Karbon nanotüplerin (KNT) ilk defa 1991 yılında Iijima [1] tarafından sentezlenmesiyle birlikte, nano-boyuttaki yapıların ne kadar farklı davranabilecekleri ve bu davranışlarından doğan çok farklı işlevlerin elde edilebileceği anlaşılmıştır. Karbon nanotüpler, grafitin tek bir katmanının yani grafen levhasının hiçbir kusur oluşturmada bir silindir çevresinde sarılmış hali olarak düşünülebilir. KNT’ler, yapıyı oluşturan kiral vektörü tanımlayan n ve m tam sayılarıyla tanımlanmaktadır. (n, m) tam sayılarının değerine bağlı olarak KNT’lerin elektronik, mekanik ve fiziksel özellikleri değişmektedir.

Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler (TDKNT), sağlamlıkları, önemli mekanik ve elektronik özellikleri nedeniyle nanoteknoloji araştırmalarında ön sıralarda yer almaktadır. Katkılamaya gerek olmadan sadece geometrik parametrelerinin değiştirilmesi ile elektronik özelliklerinin değiştirilebilir olması, TDKNT’lere elektronik uygulamalarda

önemli bir yer verir. Geometrik yapılarına bağlı olarak metal veya farklı enerji bant aralıklarına sahip yarı iletken özelliği gösterirler. Germe ve sıkıştırma (gerinim) etkisi, yarı iletken zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıklarını değiştirebilmekte, metal – yarı iletken ve yarı iletken – metal geçişlerine neden olmaktadır.

Germe – sıkıştırma etkisi altında TDKNT'ler ile ilgili literatürde yapılan çalışmalarda, Yoshitaka Umeno [2] vd. sıkı-bağ (SB) yarı-ampirik bant hesaplamaları ve *ab initio* yöntemlerini kullanarak, TDKNT'lerin elektronik özelliklerinin gerinime bağlı olarak değişimini incelemişlerdir. Çalışmalarında, (8,8), (9,0), (10,0) ve (14,0) TDKNT'leri simüle etmişlerdir. Karbon nanotüpleri tanımlayan “ n ” ve “ m ” parametrelerine bağlı olarak, eksenel gerinim altındaki çeşitli kiraliteye sahip KNT'leri $m - n = 3q$, $m - n = 3q + 1$ ve $m - n = 3q + 2$ (q tam sayı olmak üzere) olmak üzere üç sınıfta toplamışlardır. $m - n = 3q$ grubundaki TDKNT'ler $\varepsilon = 0$ başlangıç durumunda sıfır enerji bant aralığına (E_g) sahiptir. Üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak metal – yarı iletken geçişinin olduğunu göstermişlerdir. Diğer taraftan, $m - n = 3q + 1$ ve $m - n = 3q + 2$ grubundaki TDKNT'ler $\varepsilon = 0$ başlangıç durumunda enerji bant aralıkları sıfırdan farklıdır ($E_g \neq 0$). Her iki gruptaki TDKNT'ler içinde yarı iletken – metal geçişlerini göstermişlerdir. S. Sreekala [3] vd. ilk prensipler yoğunluk fonksiyonu teorisini kullanarak (YFT) zigzag TDKNT'lerin efektif kütle ve enerji bant aralığına gerinin etkisini incelemişlerdir. (10,0), (11,0), (12,0), (13,0), (14,0) ve (15,0) zigzag TDKNT'ler üzerine %-6'dan %8'e kadar gerinim uygulamışlardır. Zigzag TDKNT'lerde kiral vektörünün tanımı gereği $m = 0$ dır. Buna göre, “ n ” indisine bağlı olarak $n = 3q$, $n = 3q + 1$ ve $n = 3q + 2$ (q tamsayı olmak üzere) olarak üç sınıfta toplamışlardır. $n = 3q$ grubundaki metalik özellik gösteren zigzag TDKNT'ler, üzerlerine uygulanan germe ve sıkıştırma gerinime bağlı olarak enerji bant aralıklarının arttığını, $n = 3q + 1$ grubundaki yarı iletken zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının germe etkisi ile arttığını, sıkıştırma gerinimine bağlı olarak azaldığını göstermişlerdir. Son olarak, $n = 3q + 2$ grubundaki yarı iletken zigzag TDKNT'lerin germe gerinimine bağlı olarak enerji bant aralığının azaldığını, sıkıştırma gerinimine bağlı olarakta enerji bant aralığının arttığını göstermişlerdir. Jian-Min Zhang [4] vd. benzeri çalışmaları düzlem dalga baz seti ve projector-augmented wave (PAW) potansiyeli kullanan Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) paket programı kullanarak, eksenel gerinim altındaki

zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının değişimini incelemişlerdir. Yong Zhang, Mei Han [5], yaptıkları çalışmada SB modeli kullanarak zigzag KNT'lerin enerji bant aralığına aksel gerininin ve burulmanın etkisini incelemişlerdir. Germe ve sıkıştırmanın enerji bant aralığının değişimine kuvvetli etkisi olduğunu göstermişlerdir. Germe ve sıkıştırma etkisi altındaki zigzag KNT'lerin koltuksu KNT'lere oranla daha çok etkilendiğini göstermişlerdir. Simüle edilen KNT'lerde metal – yarı iletken, yarı iletken – metal geçişlerinin olduğunu göstermişlerdir. Takanori Ito [6] ve arkadaşları düzlem dalga baz seti ile ultrasoft pseudopotential ilk prensipler metodunu kullanarak (10,0) KNT'nin aksel gerinin altındaki bant yapısını incelemişlerdir. Çalışmalarında, (10,0) TDKNT üzerine aksel olarak %-4 sıkıştırma ve %4 germe uygulamışlardır. Aksel gerinin etkisi altında (10,0) TDKNT'de meydana gelen yarı iletken – metal geçişlerini incelemişlerdir. Pavan K. Valavala [7] vd. $(n, 0)$ zigzag TDKNT'ler üzerine çalışmalarını yürütmüşlerdir. İlk prensipler YFT kullanarak $(n, 0)$ zigzag TDKNT'lerin elektronik yapılarını, enerji bant aralıklarını hesaplamışlardır. Pavan K. Valavala vd. çalışmalarında simüle ettikleri $(n, 0)$ zigzag TDKNT'leri $n \pmod{3} = 1$ ve $n \pmod{3} = 2$ olacak şekilde gruplandırmışlardır. A. Pullen [8] vd. tarafından yapılan çalışmada, aksel gerinin altındaki (10,0), (8,4) ve (10,10) TDKNT'lerin yapısal, elastik ve elektronik özelliklerini YFT kullanarak hesaplamışlardır. TDKNT'lerin özellikleri, simetri özelliklerini belirleyen kiral vektörüne $(\vec{C}_h = (n, m))$ bağlı olarak değişmektedir. Doktora tezi ilk çalışmalarımda, bu saptanan özelliklerin diğer tüplerde de sergilenip sergilenmediğini incelemek amacıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler seçilmiştir. $(n - m) = 3q$ grubuna örnek olarak (18,0) zigzag TDKNT, $(n - m) = 3q + 1$ grubuna örnek olarak (19,0) - (22,0) zigzag TDKNT'ler ve son olarak $(n - m) = 3q + 2$ grubuna örnek (20,0) zigzag TDKNT simüle edilmiştir. Çalışmalar N-Mertebe SBMD simülasyon yöntemi kullanılarak gerçek uzayda sıcaklık etkisini içerecek şekilde gerçekleştirilmiştir. Simülasyon yöntemi çok atomlu sistemleri çalışmaya elverişli olduğundan çalışılan zigzag TDKNT'ler bu özellik göz önünde bulundurularak seçilmiştir. Çalışmalarda simüle edilen (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler 7.05 - 8.62 Å yarıçap aralığında olup, sırasıyla 360, 380, 400 ve 440 atoma sahiptirler.

Nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından sıcaklık ve gerinin TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkileyen

kritik parametrelerdir. TDKNT'ler teknolojiadaki kullanım alanlarına bağılı olarak bu etkilere maruz kalmaktadırlar. Bu nedenle sıcaklık ve gerinime bağılı olarak TDKNT'lerin dayanıklılık çalışmaları teknolojik açıdan önem kazanmaktadır. Sıcaklık ve gerinim deformasyonu etkisinde kalan nano-yapıların dayanıklılık çalışmalarını deneysel olarak çalışmak zor ve pahalı olduğundan dolayı bu özellikleri incelemenin en iyi yollarından birisi bilgisayar simülasyon yöntemidir. K.M. Liew [9] vd. yaptıkları çalışmada tek ve çok duvarlı KNT'lerin ısısal dayanıklılığını MD simülasyonu kullanarak incelemişlerdir. Yapılan çalışmalarda, ÇDKNT'lerin ısısal dayanıklılığının TDKNT'lere oranla daha düşük olduğu, kısa olan TDKNT'lerin uzun olanlara oranla daha fazla ısısal dayanıklılığa sahip olduğu hesaplanmıştır. K. Metenier [10] vd. elektrik ark-deşarj yöntemiyle sentezlenen TDKNT'leri 1600-2800°C'de argon gazı altında tavlayarak dayanıklılıkları incelemişlerdir. TDKNT'lerin dayanıklılıklarına geçirimli elektron mikroskobu (TEM), X-ışını kırınımı ve Raman spektroskopisi yöntemleriyle bakmışlardır. TDKNT'lerin yaklaşık olarak 1600°C'ye kadar yapısal kararlılığını koruduğunu, yüksek sıcaklıklara gidildikçe yapısal kararlılığın bozularak ÇDKNT'lere dönüştüğü gözlenmiştir. M. Yudasaka [11,12] vd. katkılı TDKNT'lerin dayanıklılık çalışmalarını deneysel olarak yaparak benzer sonuçlar elde etmişlerdir. Maria J. Lopez [13] vd. tarafından yapılan yüksek sıcaklık dayanıklılık çalışmalarında, demet halindeki TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda (2200 – 2400°C) bozularak ÇDKNT'leri oluşturduğu belirlenmiştir. Literatürdeki bu çalışmalara ek olarak, Maria J. Lopez [14] vd. moleküler dinamik simülasyonu kullanarak, dar ve kısa yapıya sahip karbon nanotüplerin yapısal ve ısısal dayanıklılıklarını inceleyerek karbon nanotüplerin dayanıklılığının kritik çapa ve boya olan bağımlılığını araştırmışlardır. Y. Y. Zang [15] vd. sıcaklık etkisinden farklı olarak gerinim etkisinin TDKNT ve ÇDKNT üzerindeki burulma etkisini "Reactive Empirical Bond Order (REBO) [16]" ve "Lennard-Jones (LJ)" potansiyellerinin kullanıldığı MD simülasyon yöntemi ile incelemişlerdir. Deneysel olarak uniform (standart) zigzag TDKNT sentezlemek zor olduğundan dolayı deneysel dayanıklılık çalışmaları KNT demetleri ve ÇDKNT'ler üzerinde yapılmaktadır. Paralel N-Mertebe SBMD yöntemi TDKNT üzerine etkiyen deformasyonları gerçek uzayda hesapladığı için elde edilen sonuçlar deneysel sonuçlarla kolaylıkla kıyaslanabilmektedir. Çalışmalarında, seçilen $(n, 0)$ zigzag TDKNT'ler üzerine sıcaklık, germe – sıkıştırma ve sıcaklığa bağılı olarak germe – sıkıştırma deformasyonları

uygulanarak dayanıklılık çalışmaları çalışıldı. Böylelikle (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sıcaklık ve gerinime karşı gösterdikleri davranış ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir.

Aaron D. Franklin [17] , A. R. Ranjbartoreh [18], Xueshen Wang [19] vd. farklı kiraliteye sahip karbon nanotüplerin boyları üzerine deneysel çalışmalar yapmışlardır. N-Mertebe SBMD yöntemi farklı boylardaki TDKNT'lerin elektronik yapısını çalışmaya elverişli olduğundan, çalışmalarımda farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik yapıları incelenmiştir. Simülasyon çalışmalarımda TDKNT'lerin boyunu, katman sayısı (n_{layer}) parametresi belirlemektedir. Bu çalışmada, katman sayısı nanokuşak (5 layer), 8, 20 ve 80 alınarak TDKNT'ler simüle edilmiştir.

TDKNT'ler kullanıldıkları elektronik devrelerde ani olarak yerel sıcaklık artışlarına uğramaktadır. Sıcaklık, TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik ve elektronik özelliklerini etkilediğinden nanotüplere dayalı aygıtların performansları açısından kritik bir parametredir. Bu yüzden TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda mekanik ve elektronik özelliklerinin incelenmesi önem kazanmaktadır.

Karbon nanotüplerin enerji bant aralıkları (E_g), yapıya uygulanan sıcaklık, germe-sıkıştırma, burkma vs. deformasyonlar ile değişmektedir. Enerji bant aralığının (E_g) sıcaklık bağımlılığı, yarı iletken malzemelerin özelliklerinden biridir. Genellikle, $E_g(T)$ eğrileri sıcaklıkla birlikte; düşük sıcaklıklarda nonlineer ve yeterince yüksek sıcaklıklarda da doğrusal olan tekdüze bir azalma gösterir. Literatürde, yarı iletken karbon nanotüplerin enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı değişimi Rodrigo B. Capaz [20] vd. tarafından ortogonal olmayan sıkı-bağ metodu kullanılarak hesaplanmıştır. Grup çalışmalarında 7.6 – 13.5 Å çap aralığındaki yarı iletken TDKNT'leri inceleyerek, $E_g(T)$ 'nin çap ve kiraliteye olan bağımlılığını elde etmişlerdir. Bazı tüplerin tekdüze olmayan farklı bir davranış sergilediği gözlemlenmiştir. Doktora tezimde bu saptanan özelliklerin diğer tüpler için geçerli olup olmadığını incelemek amacıyla, yarıçapları sırasıyla, 7.05, 7.45, 7.84 ve 8.62 Å olan (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemi ($O(N)$ SBMD) kullanılarak gerçek uzayda incelendi.

1.2 Tezin Amacı

Doktora tez çalışmalarım, YTÜ Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvar'ında [21], bu laboratuvarın kurucusu değerli hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ danışmanlığında gerçekleştirildi. Simülasyon çalışmalarında, Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilen ve karbon nanotüplere başarıyla uygulanan Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemi kullanılmıştır [22-31].

Doktora tez çalışmalarım iki ana başlık altında toplandı :

- i. Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı
- ii. Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Dayanıklılık Çalışmaları

Sıcaklık ve gerinim TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkilediğinden nanotüplere dayalı aygıtların performansları açısından kritik birer parametredir. Bu nedenle TDKNT'lerin elektronik yapı çalışmalarında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler simüle edilerek;

- a) Germe – Sıkıştırma etkisi altında elektronik yapılarının,
- b) Sıcaklık değişimi altında germe – sıkıştırma etkisinde elektronik yapılarının,
- c) Germe – Sıkıştırma etkisi altında KNT'lerde, nano-boyutta oluşan metal – yarı iletken, yarı iletken – metal geçişlerinin,
- d) Düşük – Yüksek sıcaklıklarda TDKNT'lerin elektronik yapılarının,
- e) Farklı boylardaki TDKNT'lerin elektronik yapılarının

incelenmesi hedeflenmiştir.

TDKNT'ler teknolojiye kullanım alanlarına bağlı olarak sıcaklık ve gerinim deformasyonlarına maruz kalmaktadırlar. Bu nedenle sıcaklık ve gerinime bağlı olarak TDKNT'lerin dayanıklılık çalışmaları teknolojik açıdan önem kazanmaktadır. Sıcaklık ve gerinim deformasyonu etkisinde kalan nano-yapıların dayanıklılık çalışmalarını deneysel olarak çalışmak zor ve pahalı olduğundan dolayı bu özellikleri incelemenin en iyi yollarından birisi bilgisayar simülasyon yöntemidir. Bu nedenle tek duvarlı karbon nanotüplerin dayanıklılık çalışmalarında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler simüle edilerek;

- a) Yüksek sıcaklıklarda,
- b) Germe – sıkıştırma etkisi,
- c) Yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi

altında TDKNT'lerin nano-boyuttan ileri gelen dayanıklılıklarının incelenmesi hedeflenmiştir.

Doktora tezim, Yıldız Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü'nün YTÜ BAPK 2009-01-01-KAP01 ve YTÜ BAPK 2010-01-01-DOP01 numaralı projeleri ile desteklenmiştir.

1.3 Bulgular

Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi KNT'lerin simülasyonlarında kullanılmak üzere Prof. Dr. Gülay DERELİ tarafından geliştirilen bir metottur. Geleneksel SB yöntemi, Schrödinger denklemini ters uzayda, Hamilton matrisinin köşegenleştirmesiyle çözer. Bu da atom sayısı ile kübik orantılı bir simülasyon zamanı gerektirir. $O(N)$ SBMD metodu ise, bant enerjisini gerçek uzayda çözer ve sadece lokal bölgeyi bağa ve bağlanma enerjisi hesaplarına kattığından atom sayısı ile lineer orantılı bir çözüm zamanı gerektirir. Doktora tezimde kullanılan simülasyon metodu simülasyon zamanının sistemdeki atom sayısı ile doğru orantılı olarak değişmesi nedeniyle zamandan büyük ölçüde kazanç sağlayan, hesapların gerçek uzayda yapıldığı ve simülasyonlarda sıcaklık parametresinin değişmesine olanak sağlayan bir yöntemdir. Simülasyon program ile;

- i. Düşük – yüksek sıcaklıklarda TDKNT'ler oluşturulabilmekte,
- ii. TDKNT'lerin fiziksel, mekanik ve elektronik özellikleri elde edilebilmekte,
- iii. Fiziksel, mekanik ve elektronik özelliklerin sıcaklık etkisi altındaki değişimlerini hesaplanabilmekte,
- iv. İstenilen çap ve boylarda TDKNT'ler simüle edilebilmekte, böylelikle çok atomlu sistemlerle çalışmalar yapılabilme,
- v. Hesaplar gerçek uzayda yapılabilir.

Doktora tezi kapsamında, germe – sıkıştırma etkisi altındaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik yapıları incelenerek literatürde bu kiralitede az sayıda bulunan germe – sıkıştırma araştırmaları yapılmıştır. Sıcaklık değişimi germe – sıkıştırma etkisindeki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere uygulanarak farklı sıcaklık değerlerinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki zigzag TDKNT'lerin elektronik yapıları incelenmiştir. KNT'lerde nano-boyuttan oluşan metal – yarı iletken, yarı iletken – metal geçişleri incelenmiştir. Farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik yapıları incelenerek, KNT'lerin boyunun enerji bant aralığına etkisi incelenmiştir. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda elektronik yapıları incelenmiştir.

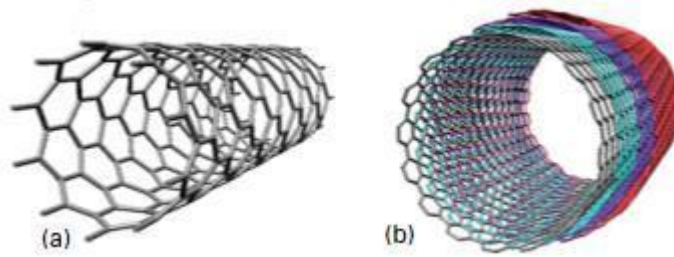
Çalışılan zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklardaki fiziksel özellikleri ele alınmıştır. Ayrıca, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda, germe – sıkıştırma etkisi altında ve yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi altında dayanıklılıkları incelenmiştir.

Doktora Tezimin 2.Bölümünde Karbon Nanotüpler, Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler ve Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılmasından, 3.Bölümde Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısından, 4.Bölümde Simülasyon Yönteminden ve Simülasyon Parametrelerinin Belirlenmesinden bahsedilmiştir. 5.Bölümde, Bilgisayar Simülasyon Sonuçlarından, 6.Bölümde ise Bilgisayar Simülasyon Sonuçlarıyla ilgili olarak tartışma ve sonuçlar verilmiştir.

BÖLÜM 2

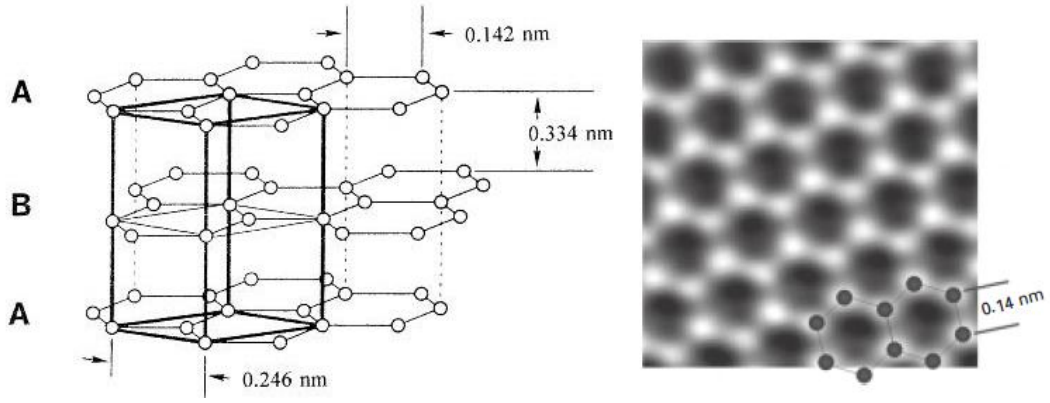
KARBON NANOTÜPLER

Grafen levhanın bir silindir etrafında sarılmış hali olarak düşünebileceğimiz karbon nanotüpler, farklı boy ve çaplara sahip olabilecekleri gibi, tek ve eş merkezli iç içe geçmiş birden fazla katmandan da oluşabilir. Buna göre karbon nanotüpler, Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler (TDKNT) ve Çok Duvarlı Karbon Nanotüpler (ÇDKNT) olmak üzere iki sınıfa ayrılırlar (Şekil 2.1).



Şekil 2. 1 (a) Tek duvarlı karbon nanotüp, (b) Çok duvarlı karbon nanotüp

TDKNT'ler, 1-10 nm çapına ve bu çapa kıyasla daha uzun bir boya (mikrometreden santimetreye kadar) sahip, karbondan üretilen içi boş silindir şeklindeki yapılardır. ÇDKNT'lerde TDKNT'lere benzer bir yapıya sahiptir fakat birden çok iç içe geçmiş veya eş merkezli silindirik duvarlar mevcuttur. Silindirik duvarlar arasındaki boşluk grafitin katmanları arasındaki boşlukla ($\sim 0.334nm$) kıyaslanabilir ölçüdedir (Şekil 2.2).



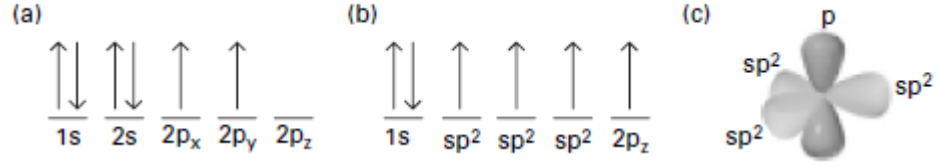
Şekil 2. 2 Birim hücre gösteren altıgen (Bernal) grafit yapısı [32-33]

Çizelge 2. 1 Grafenin allotropları¹ [33]

Boyut	0B	1B	2B	3B
Allotrop	C_{60} buckyball	Karbon Nanotüp	Grafen	Grafit
Yapı	Küresel	Silindir	Düzlem	İstiflenmiş Düzlem
Hibritleşme	sp^2	sp^2 (sp)	sp^2	sp^2
Elektronik Özellik	Yarı iletken	Metal veya YI	Metalimsi	Metal

KNT'ler bir boyutlu malzemeler olarak kabul edilir. Karbonun elektronik konfigürasyonu (yapılandırılması) $1s^2 2s^2 2p^2$ şeklindedir. $1s$ yörüngesindeki elektronlar iç elektronlardır, güçlü bağ yaparlar. $2s$ ve $2p$ yörüngesindeki elektronlara valans elektronları denir, bunlar çekirdeğe zayıf bağlıdır. $2s$ ve $2p$ orbitalleri özdeş değildir. Kristal oluştuğu zaman valans orbitalleri $2s 2p_x 2p_y 2p_z$ şeklini alır. $2s$ ve $2p$ orbitalleri arasındaki enerji farkı bağlanma enerjisine kıyasla düşük olduğundan dört tane orbital birbirleriyle kaynaşarak dört tane özdeş orbitale dönüşür. Bu orbital değişimi karbon atomunun komşu atomla bağlanma enerjisini artırır. Bu olaya “hibritleşme” denir. Karbon atomunda sp , sp^2 , sp^3 hibritleşmeleri vardır (Çizelge 2.1 ve Şekil 2.3).

¹ Allotrop, aynı elementin uzayda farklı şekilde dizilerek farklı geometrik şeklindeki kristalleri.

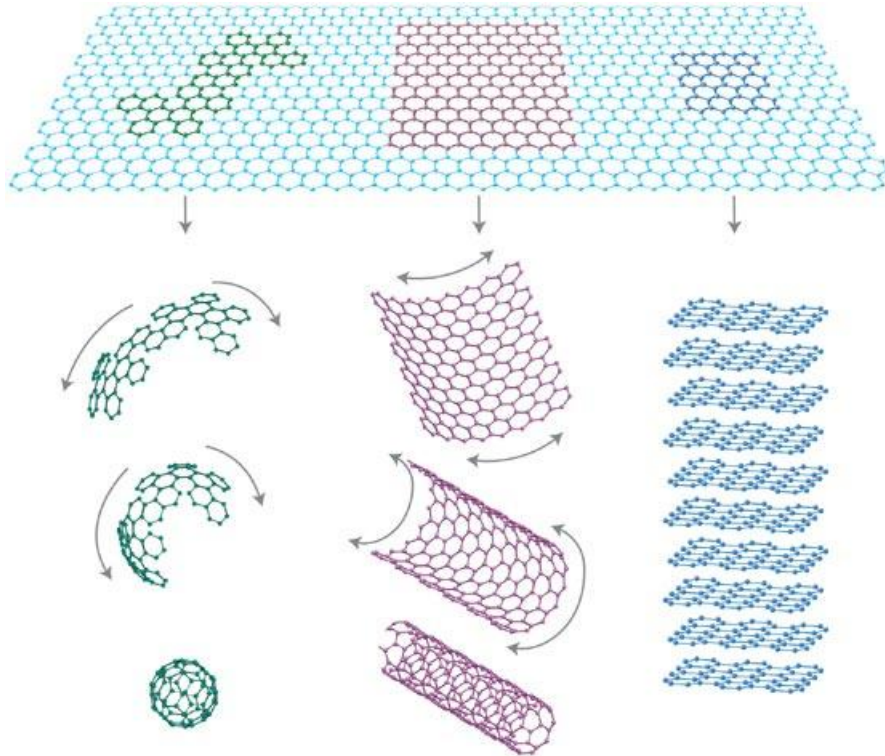


Şekil 2. 3 Elektron ve bunların göreceli spin düzenlemesi (a) karbon elementi, (b) grafen, (c) orbitalerin gösterimi [33].

Doktora tezimde farklı kiraliteye sahip zigzag TDKNT'ler çalışılmıştır. Bölüm 2.1 ve 2.2'de TDKNT'lerin terminolojisi hakkında detaylı bilgi verilecektir.

2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler

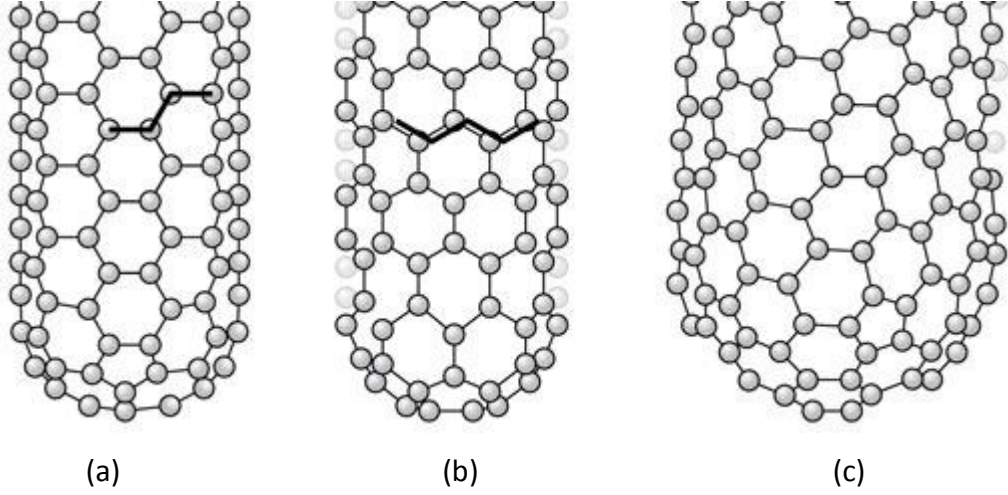
TDKNT'leri, grafen levhanın bir silindir etrafında sarılmış hali olarak düşünebiliriz (Şekil 2.4). Yapısı bir boyutlu olup (*uzunluk/çap* oranı $10^4 - 10^5$ 'den büyüktür), eksenel simetriye sahiptir ve genellikle spiral bir yapı göstermektedir. Grafen levhası, karbon atomlarından oluşan balpeteği yapılarından meydana gelmiştir [34].



Şekil 2. 4 İki boyutlu grafen bütün boyutlarıyla karbon allotroplarının yapı taşı olarak kabul edilebilir, örneğin 0-boyut (0B) buckyballs, 1-boyut (1B) nanotüp ve 3-boyut (3B) grafit [35].

2.2 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması

KNT'lerin simetri sınıflandırılmasına göre KNT'ler, akiral (symmorphic) ve kiral (non-symmorphic) olmak üzere iki ana sınıfa ayrılır. Akiral karbon nanotüpler simetrik bir yapıya sahip iken kiral karbon nanotüpler spiral simetriye sahiptir. Altıgen örgünün tek duvarlı karbon nanotüp eksenini doğrultusundaki görüntüsüne göre akiral karbon nanotüpler koltuksu (armchair) ve zigzag yapı olarak ikiye ayrılır.



Şekil 2. 5 (a) Koltuksu (Armchair), (b) Zigzag ve (c) Kiral Karbon Nanotüp

2.2.1 Karbon Nanotüplerin Vektör Notasyonu

2.2.1.1 Kiral Vektör

Nanotüp eksenine dik doğrultudaki (ekvator düzleminde yer alan) kiral vektörü ($\vec{C}_h$), tek duvarlı karbon nanotüpün yapısını belirlememize olanak sağlar. $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleri aralarında 60° açı bulunan, ortogonal olmayan altıgen gerçek uzay baz vektörleri olmak üzere ($a = \sqrt{3}a_{c-c} = 2.49 \text{ \AA}$);

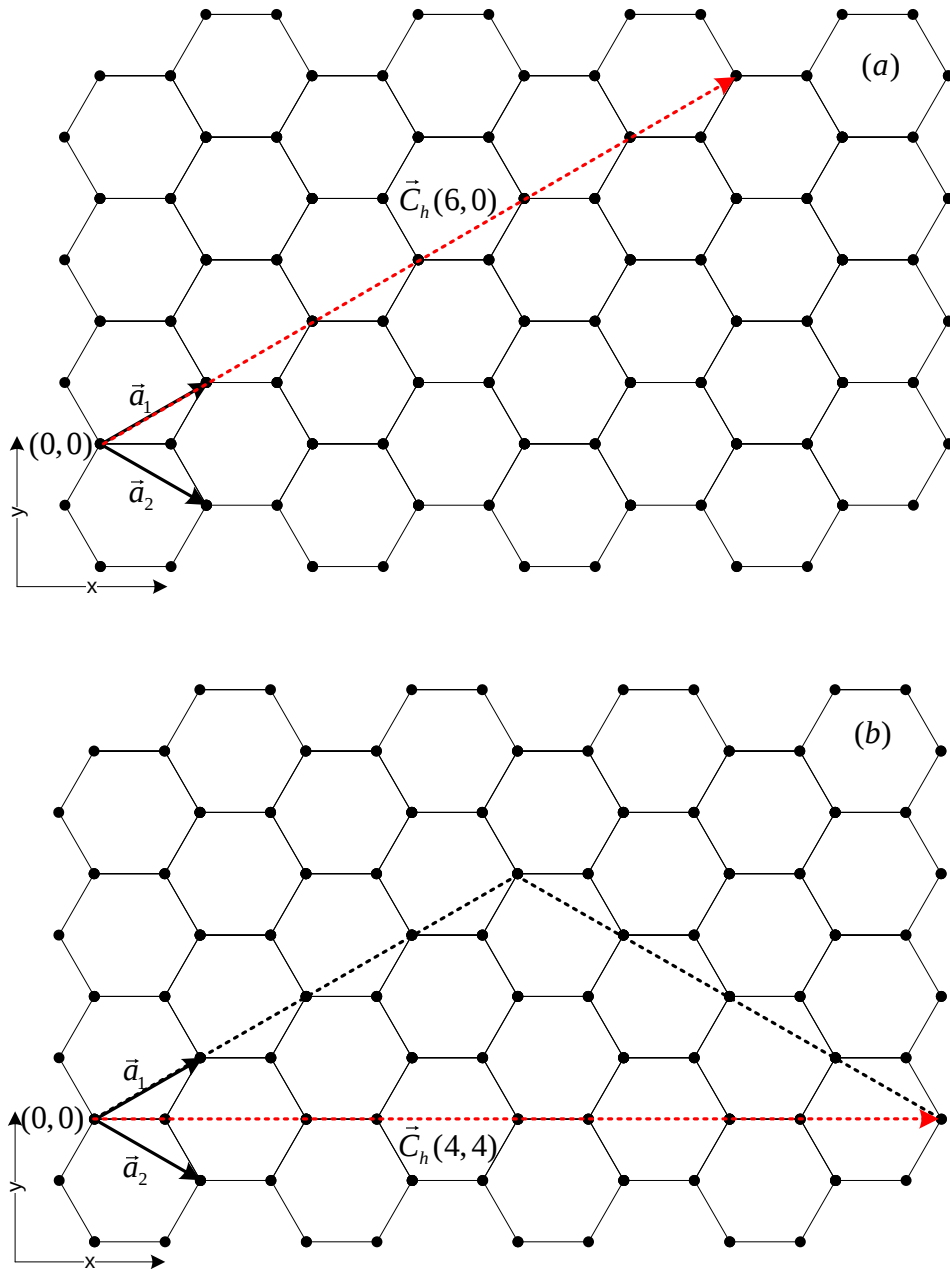
$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (2.1)$$

$$\vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right) \quad (2.2)$$

olarak tanımlanır. $\vec{C}_h$ vektör, altıgen örgünün gerçek uzaydaki $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleriyle,

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (n \text{ ve } m \text{ tam sayı olmak üzere, } (0 \leq |m| \leq n)) \quad (2.3)$$

şeklinde tanımlanır. “n” ve “m” katsayıları sırasıyla $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleri doğrultusundaki tam sayılardır (Şekil 2.6). Hegzagonal simetriden dolayı $(0 \leq |m| \leq n)$ olur.



Şekil 2. 6 iki boyutlu grafenin altıgen örgü birim vektörlerine bağlı olarak kiralite vektörünün tanımlanması, (a) (6,0) Zigzag TDKNT (b) (4,4) Koltuksu TDKNT

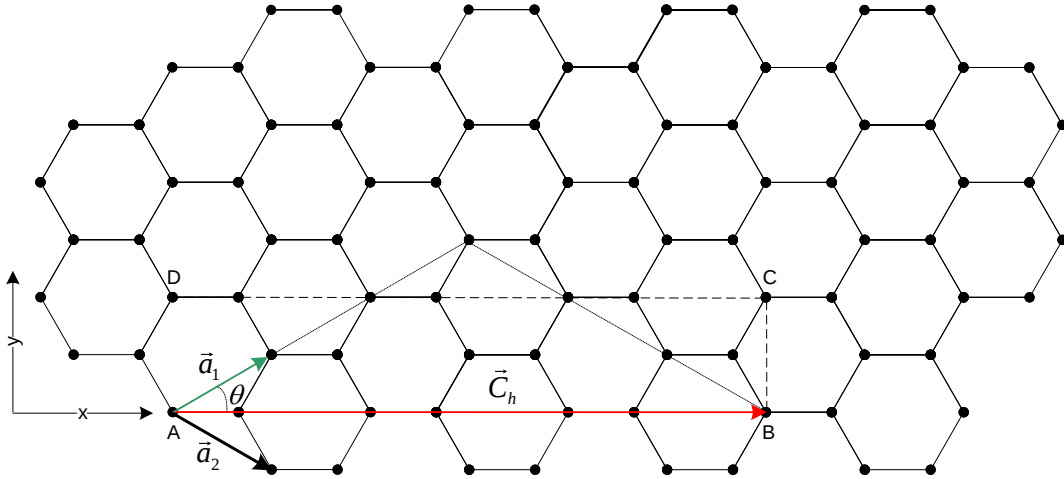
Çizelge 2. 2 Karbon nanotüplerin sınıflandırılması

<i>Yapı</i>	θ	$\vec{C}_h$
<i>Koltuksu</i>	30°	(n, n)
<i>Zigzag</i>	0°	$(n, 0)$
<i>Kiral</i>	$0 < \theta < 30^\circ$	(n, m)

a , n ve m parametrelerine bağlı olarak karbon nanotüp çapı,

$$d_t = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} = \frac{a\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \quad (2.4)$$

şeklinde tanımlanır. Kiral vektörün büyüklüğü ($|\vec{C}_h|$), karbon nanotüpün çevre uzunluğunu verir. Kiral açısı (θ), kiral vektör ($\vec{C}_h$) ile $\vec{a}_1$ vektörü arasındaki açı olarak tanımlanır (Şekil 2.7). Kiral açısı, nanotüp eksenin doğrultusuna göre altıgenlerin eğim açısını ve spiral simetriyi belirler (Çizelge 2.2).



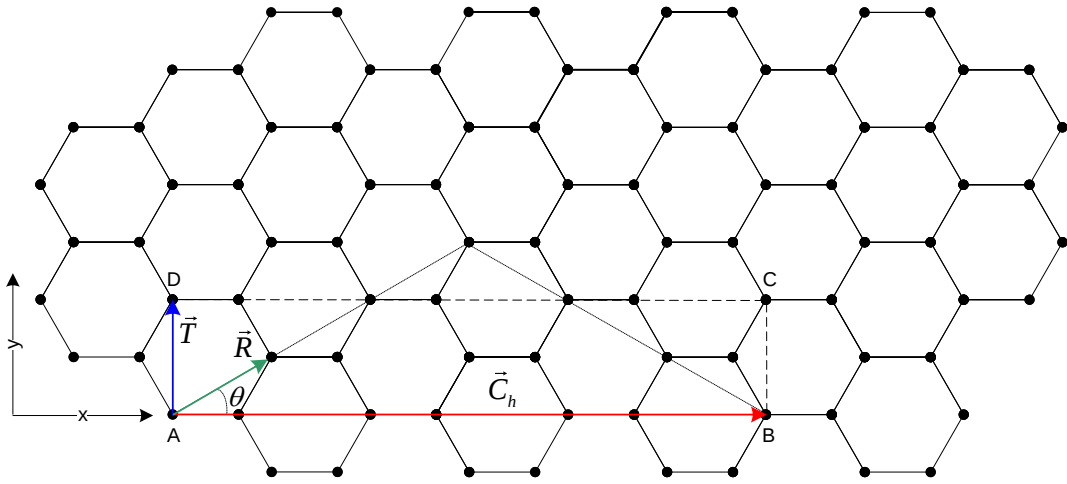
Şekil 2. 7 $\vec{C}_h = (3,3)$ vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim baz vektörleri ile kiral açısının gösterimi

2.2.1.2 Öteleme Vektörü

Tüp eksenini boyunca öteleme periyodu, nanotüp eksenine paralel ve kiral vektörüne dik olan öteleme vektörü ($\vec{T}$) ile sağlanır. t_1 ve t_2 tam sayı olmak üzere, $\vec{T}$ vektörü, altıgen örgünün gerçek uzaydaki $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleriyle,

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (2.5)$$

şeklinde tanımlanır (Şekil 2.8).



Şekil 2. 8 Grafenin karbon nanotüpe dönüşmesi için vektör tanımı. Sırasıyla, $\vec{T}$ öteleme vektörü, $\vec{R}$ simetri vektörü ve $\vec{C}_h$ kiral vektörü (şekildeki gösterim (3,3) TDKNT içindir)

Burada t_1 ve t_2 ;

$$t_1 = \frac{2m + n}{d_R} \quad (2.6)$$

$$t_2 = -\frac{2n + m}{d_R} \quad (2.7)$$

olarak yazılır. Burada $d_R = OBEB(2m + n), (2n + m)$ olarak tanımlanır ve d_R aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$d_R = \begin{cases} 3d, & (n - m) \text{ } 3d' \text{nin katı ise} \\ d, & (n - m) \text{ } 3d' \text{nin katı değilse} \end{cases} \quad (d = OBEB(n, m)) \quad (2.8)$$

Öteleme vektörünün büyüklüğü,

$$|\vec{T}| = \frac{\sqrt{3}|\vec{C}_h|}{d_R} \quad (2.9)$$

olarak tanımlanır.

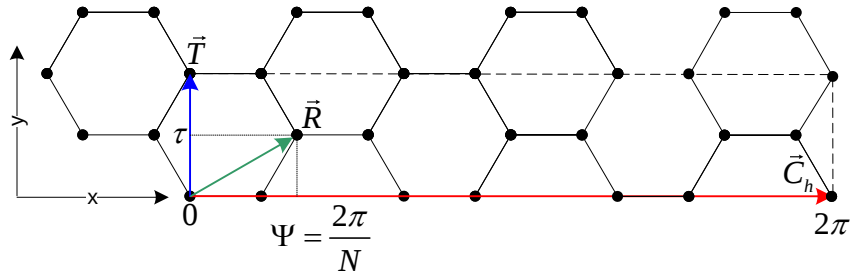
2.2.1.3 Simetri Vektörü

Simetri vektörü ($\vec{R}$), karbon nanotüp içindeki karbon atomlarının koordinatlarını belirlemek için kullanılır. Simetri vektörü, birim hücre dışına çıktığı zaman periyodik sınır koşullarını (PSK) kullanarak birim hücre içinde kalacak şekilde ayarlanır. Simetri vektörü, karbon nanotüpün birim hücresinin ($|\vec{C}_h \times \vec{T}|$) $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ ortogonal vektörleri üzerindeki izdüşümüne göre açıklamak uygundur. Simetri vektörü konum vektörüdür ve kiral vektörü yönündeki en düşük bileşene sahiptir. p ve q birden başka ortak böleni olmayan tam sayılar olmak üzere, $\vec{R}$ vektörü, altıgen örgünün gerçek uzaydaki $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleriyle,

$$\vec{R} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 \quad (2.10)$$

olarak yazılır (Şekil 2.9).

Karbon nanotüplerle ilgili denklem ve parametreler Çizelge 3’de gösterilmiştir.



Şekil 2. 9 Uzay grup simetri operasyonu $\vec{R} = (\Psi, \tau)$, Ψ nanotüp eksenini etrafındaki dönmenin açısı. $\tau, \vec{T}$ vektörü doğrultusundaki geçiş

Çizelge 2. 3 Karbon nanotüplerle¹ ilgili denklem ve parametreler [33]

Sembol	İsim	cKNT ²	aKNT ³	zKNT ⁴
$\vec{C}_h$	Kiral Vektör	$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n, m)$	$\vec{C}_h = (n, m)$	$C_h = (n, 0)$
C_h	Kiral Vektörünün Büyüklüğü	$C_h = \vec{C}_h = a\sqrt{n^2 + nm + m^2}$	$C_h = a\sqrt{3}n$	$C_h = an$
d_t	Çap	$d_t = \frac{a}{\pi}\sqrt{n^2 + nm + m^2}$	$d_t = \frac{an}{\pi}\sqrt{3}$	$d_t = \frac{an}{\pi}$
θ	Kiral Açısı	$\cos\theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$	$\theta = 30^\circ$	$\theta = 0^\circ$
g_d	En Büyük Ortak Bölen (EBOB)	$g_d = \gcd(2m + n, 2n + m)$	$g_d = 3n$	$g_d = n$
$\vec{T}$	Öteleme Vektörü	$\vec{T} = \frac{2m + n}{g_d}\vec{a}_1 - \frac{2n + m}{g_d}\vec{a}_2$	$\vec{T} = \vec{a}_1 - \vec{a}_2$	$\vec{T} = \vec{a}_1 - 2\vec{a}_2$
T	Öteleme Vektörünün Büyüklüğü	$T = \vec{T} = \frac{\sqrt{3}C_h}{g_d}$	$T = a$	$T = a\sqrt{3}$
N	Hegzagon Sayısı (hücredeki)	$N = \frac{2C_h^2}{a^2g_d}$	$N = 2n$	$N = 2n$

¹ İlkel baz vektörleri $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ olarak tanımlanan karbon nanotüp.

² cKNT, kiral (chiral) karbon nanotüp.

³ aKNT, koltuksu (armchair) karbon nanotüp.

⁴ zKNT, zigzag karbon nanotüp.

2.2.2 Karbon Nanotüplerin Birim Hücre ve Brillouin Bölgesi

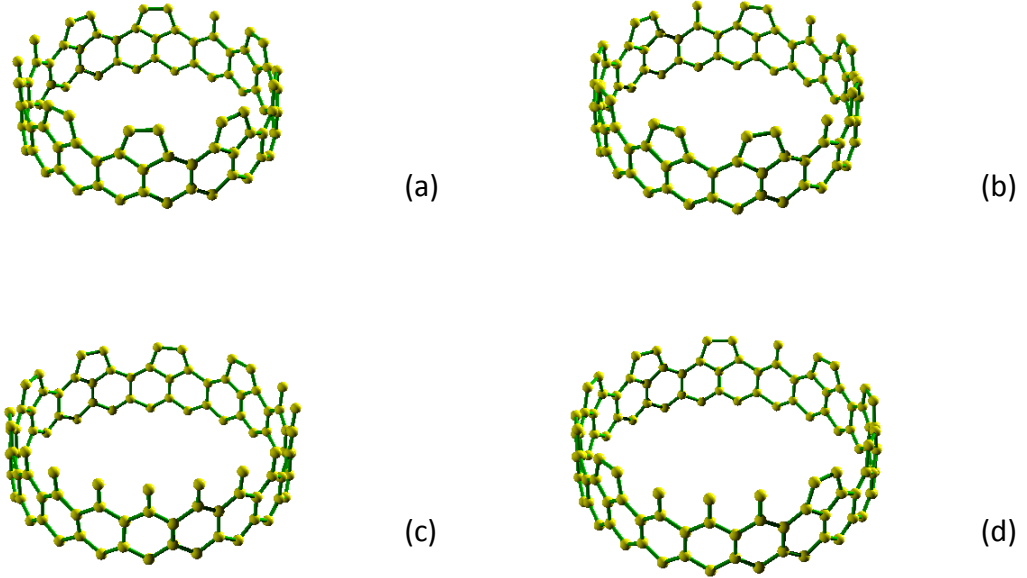
2.2.2.1 Birim Hücre

Bir boyutlu karbon nanotüpün birim hücresi, kiral ve öteleme vektörlerinin vektörel çarpımı ($|\vec{C}_h \times \vec{T}|$) yani Şekil 2.8’de kiral ve öteleme vektörlerine göre belirlenen ABCD dikdörtgeninin alanı olarak tanımlanır.

Tek bir hegzağının alanı ise $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörlerinin vektörel çarpımı ($|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$) ile belirlenir. Buna göre karbon nanotüp birim hücresi içinde kalan hegzağonların sayısı,

$$N = \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_R} = \frac{2L^2}{a^2 d_R} \quad (2.11)$$

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



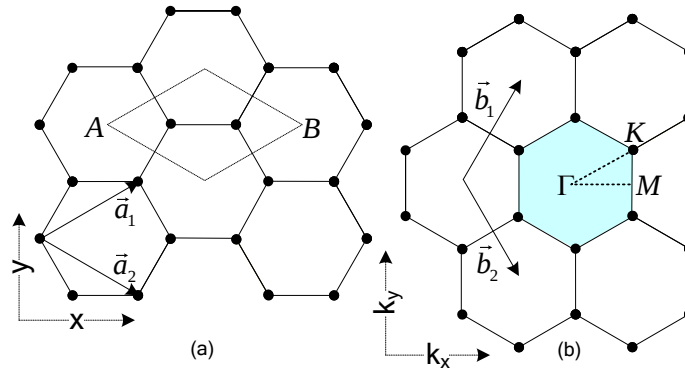
Şekil 2. 10 Sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT’lerin 300K sıcaklığında birim hücrelerinin anlık simülasyon görüntüleri

2.2.2.2 Ters Örgü ve Brillouin Bölgesi

Ters örgü $\vec{\mathcal{R}}_i \cdot \vec{K}_i = 2\pi\delta_{ij}$ şeklinde tanımlanır. Burada, $\vec{\mathcal{R}}_i$, öteleme ve kiral vektörü tarafından oluşturulan tek-boyutlu gerçek uzay baz vektörleri olarak tanımlanır. $\vec{K}_i$ ise ters örgü vektörleri olarak tanımlanır.

$$\begin{aligned}\vec{C}_h \cdot \vec{K}_1 &= 2\pi, & \vec{T} \cdot \vec{K}_1 &= 0 \\ \vec{C}_h \cdot \vec{K}_2 &= 0, & \vec{T} \cdot \vec{K}_2 &= 2\pi\end{aligned}\quad (2.12)$$

TDKNT'lerin Brillouin bölgesi (2.12) sonuç bağıntılarından hesaplanır.

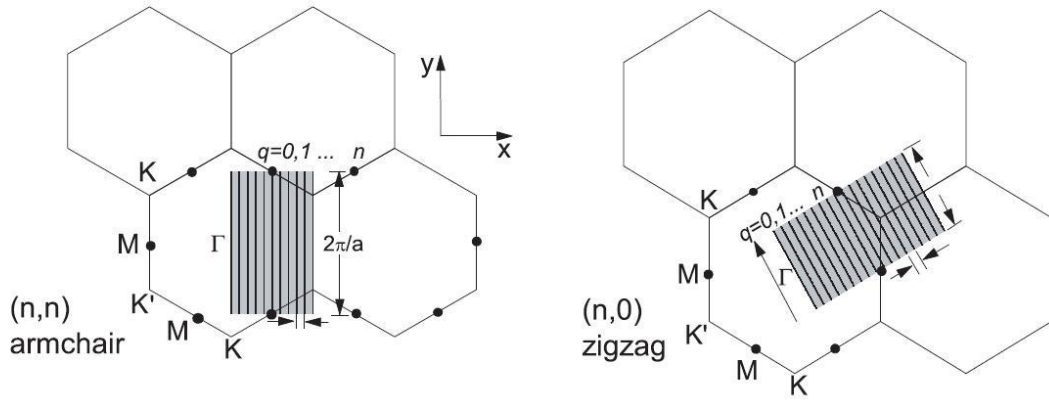


Şekil 2. 11 (a) Grafen levhanın altıgen örgüleri. Birim hücre, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ tarafından tanımlanan kesikli çizgilerle gösterilen alan. (b) $\vec{b}_1$ ve $\vec{b}_2$ vektörleri altıgen örgünün ters örgü vektörleri olup, renkli taralı alan birinci Brillouin bölgesi olarak tanımlanır. Yüksek simetri noktaları Γ KM, bu bölge üzerinde kesikli çizgilerle gösterilmektedir [34].

Şekil 2.11'de gösterilen altıgen örgünün ters örgü vektörleri $\vec{b}_1$ ve $\vec{b}_2$ ye bağlı olarak ters örgü vektörü aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$\vec{K}_1 = \frac{-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2}{N}, \quad \vec{K}_2 = \frac{m\vec{b}_1 - n\vec{b}_2}{N} \quad (2.13)$$

Elde edilen Brillouin bölgesi, $|\vec{K}_2|$ uzunluğuna sahip paralel çizgiler ile $|\vec{K}_1|$ aralığına sahip çizgilerin oluşturduğu bir sistemdir. Şekil 2.12'de zigzag ve koltuksu TDKNT'ler için iki boyutlu grafitin ters örgüsü görülmektedir. Şekilde paralel çizgilerin boyu $2\pi/|\vec{T}|$ ile tanımlanmaktadır.



Şekil 2. 12 (n,n) koltuksu ve (n,0) Zigzag TDKNT'lerin birinci Brillouin bölgeleri [36]

$N\vec{K}_1 = (-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2)$ ile birbirinden farklılaşan iki dalga vektörü birbirine eşdeğerdir çünkü bu vektör iki boyutlu grafitin ters örgü vektörüne karşılık gelir. Ters örgü vektörü aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\vec{K} = k \frac{\vec{K}_2}{|\vec{K}_2|} + \mu \vec{K}_1, \quad \mu = 0, 1, \dots, N-1 \text{ ve } -\pi/|\vec{T}| < k < \pi/|\vec{T}| \quad (2.14)$$

TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISI

3.1 Tek Elektron Dağılım Bağlıları

3.1.1 Enerji Dağılım Bağlılarının Bölge Katlanması

İki boyutta bir grafenin birim hücresinde iki farklı karbon atomu mevcuttur (Şekil 2.11a). Bunlardan birincisi, sp^2 melezleşmesi yaparak xy – düzleminde σ bağlarını, ikincisi ise, bu bağlara dik olan z – düzlemindeki π bağını oluştururlar. Bu kısımda, π bağlarının oluşturduğu elektronik enerji bantı üzerinde duracağız. Çünkü kovalent bağı oluşturan π bağları grafitin katıhal özelliklerini belirlemek için önemlidir [34].

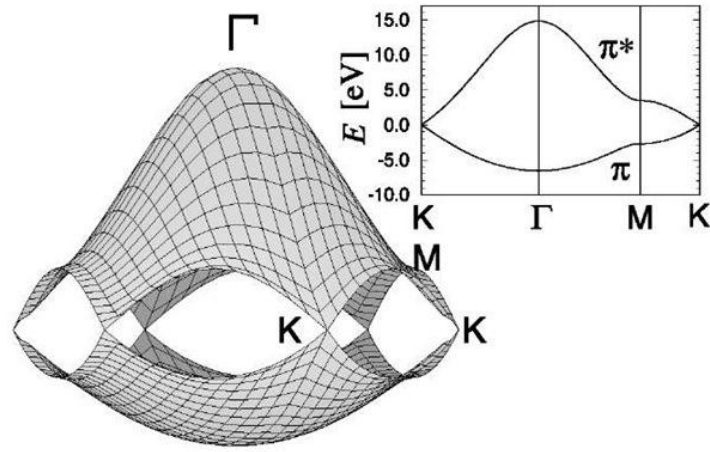
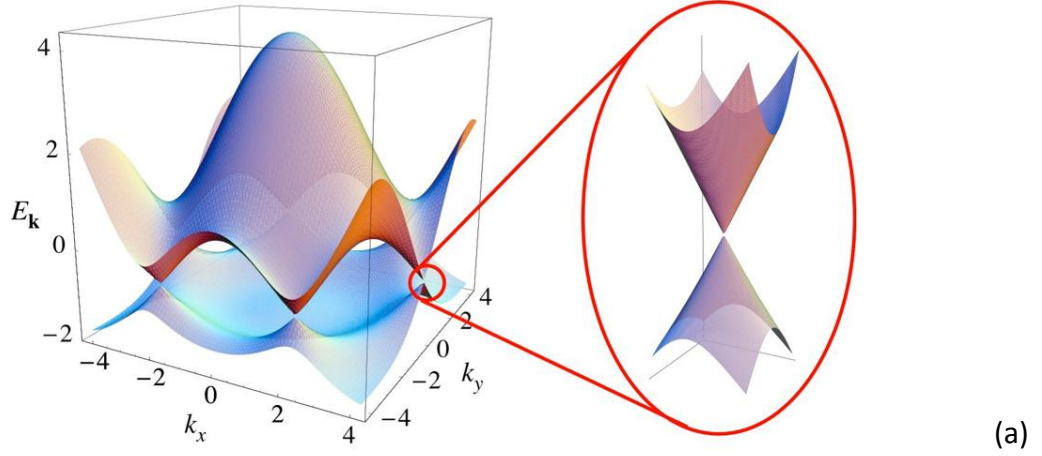
$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & tf(k) \\ tf(k)^* & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} \text{ ve } S = \begin{pmatrix} 1 & sf(k) \\ sf(k)^* & 1 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

(3.1) eşitliği yardımıyla seküler denklem çözülerek $\det(H - ES) = 0$; enerji özdeğerleri $E(\vec{k})$; $\omega(\vec{k})$, k_x ve k_y nin fonksiyonu olarak;

$$E_{g2D}(\vec{k}) = \frac{\epsilon_{2p} \pm t\omega(\vec{k})}{1 \pm s\omega(\vec{k})} \quad (3.2)$$

bulunur. Pay ve paydada bulunan, “+” işareti bonding ve π enerji bandını, “-” işareti anti-bonding π^* enerji bandını gösterir. Overlap integrali $s = 0$ olduğu zaman $E = \epsilon_{2p}$ civarında π ve π^* bantları simetrik olur. Bu iki boyutlu grafitin elektronik yapısı için iyi bir yaklaşım olur. Buna göre enerji dağılım bağıntısı eşitlik (3.3)’deki gibi olur.

$$E_{g2D}(k_x, k_y) = \pm t \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right\}^{1/2} \quad (3.3)$$



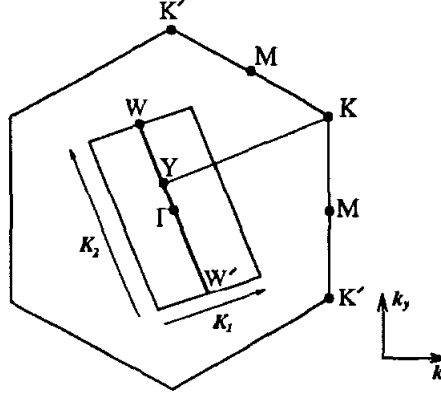
Şekil 3. 1 (a) İki boyutlu grafitin enerji dağılımı [37], (b) Yüksek simetri noktaları Γ , K ve M'nin gösterimi [34]

Şekil 3.1(b)'de Brillouin bölgesinin yüksek simetri noktaları olan Γ , K ve M noktalarında enerji değerleri sırasıyla $\pm 3t$, $\pm t$ ve 0'dır [34].

TDKNT'lerin elektronik yapısı basitçe iki boyutlu grafitin elektronik yapısından elde edilebilir. Kiral vektör ile gösterilen çevresel yöndeki periyodik sınır koşulları kullanıldığında, sonsuz uzunluktaki¹ karbon nanotüp için kiral vektörü ile ilişkili dalga vektörü kuantize olurken, öteleme vektörü (veya karbon nanotüp eksenine boyunca) ile ilişkili dalga vektörü sürekli kalır.

¹ Gerçek KNT'ler için, nanotüp uzunluğu (L_{CN}) μm mertebesinde olduğunda kesikli k vektörlerinin $\Delta k = 2\pi/L_{CN}$ olması beklenir. Düşük ısı transferi deneylerinde bu kesiklilik önemli olmaya başlar [34].

Bu nedenle enerji bantları, iki boyutlu grafitin enerji bantlarının kesiti olan bir boyutlu enerji dağılım bağıntılarından oluşur (Şekil 3.1b). WW'' 'den $\mu\vec{K}_1$ ($\mu = 0, \dots, N - 1$) ile ayrılan çizgi segmentlerinde bulunan iki boyutlu grafitin enerji dağılım bağıntıları ($E_{g2D}(\vec{k})$), katlanır. Şekil 3.2'den görüldüğü gibi, $\vec{K}_2$ ye paralel dalga vektörleri, WW' çizgi segmentleri ile aynı yerde olurlar [34].

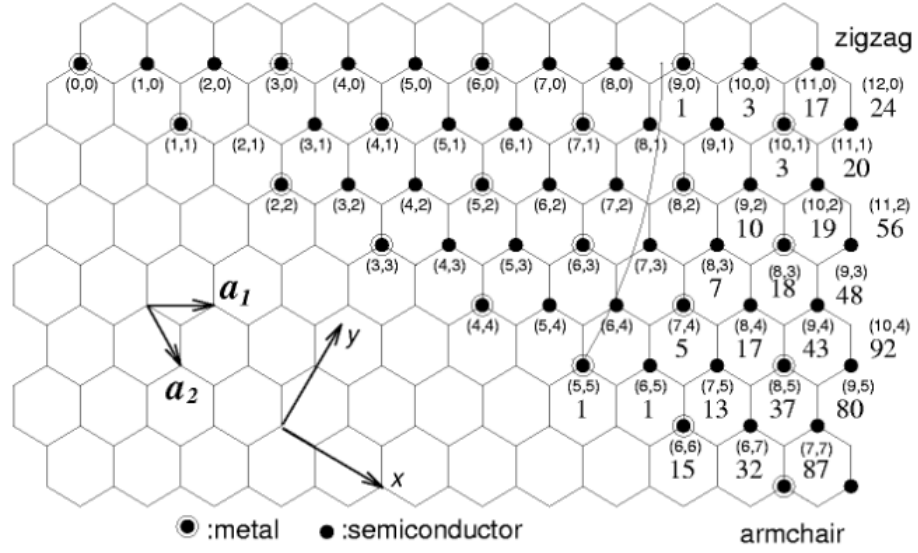


Şekil 3. 2 Metalik Enerji Bandı Şartı [34]

Bir boyutlu enerji dağılım (dispersiyon) bağıntıları eşitlik (3.4) ile verilir. Bu eşitlik TDKNT'nin enerji dağılım bağıntısına karşılık gelmektedir.

$$E_{\mu}(k) = E_{g2D}\left(k \frac{K_2}{|K_2|}\right) + \mu K_1 \quad \left(\mu = 0, \dots, N - 1 \text{ ve } -\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T}\right) \quad (3.4)$$

Belirli bir (n, m) TDKNT için kesikli çizgiler, iki boyutlu grafitin π ve π^* enerji bantlarının simetri tarafından yozlaştığı yerde, eğer iki boyutlu Brillouin bölgesinin K noktasına doğru ilerlerse, bir boyutlu enerji bantları sıfır enerji bant aralığına sahip olur. Bu TDKNT'lerin Fermi enerji seviyesi civarındaki elektronik durum yoğunlukları sonlu bir değer alır ve bu TDKNT'ler metaliktir. Kesikli çizgiler K noktasına doğru ilerlemezlerse, valans ve iletim bantları arasında sonlu bir enerji bant aralığı oluşur. Bu durumdaki TDKNT'lerin yarı iletken bir davranış göstermesi beklenir [34]. Şekil 3.3'de metalik ve yarı iletken karbon nanotüpler gösterilmiştir.



Şekil 3. 3 Metalik ve Yarı iletken Karbon Nanotüpler [38]

Şekil 3.2'deki $\overrightarrow{YK}$ vektörünün uzunluğunun, $\vec{K}_1$ vektörünün uzunluğuna oranı tam sayı ise metalik enerji bandı elde edilmiş olur.

$$\overrightarrow{YK} = \frac{(2n + m)}{3} \vec{K}_1 \quad (3.5)$$

$(2n + m)$ veya buna eşdeğer $(n - m)$ değerleri 3'ün tam katı ise bu TDKNT'ler metalik özellik gösterirler. (n, n) ile tanımlanan koltuksu (armchair) TDKNT'ler metalik, $(n, 0)$ ile tanımlanan zigzag TDKNT'ler $(n \neq 3)$ yarı iletken davranış gösterirler. $(n, 0)$ ile tanımlanan zigzag TDKNT'ler n değerinin 3'ün katı olduğu durumlarda metalik davranış gösterirler [34].

3.1.2 Koltuksu (Armchair) Karbon Nanotüplerin Enerji Dağılımları

Dağılım bağıntılarının açık ifadelerini elde etmenin en basit açıklaması yüksek simetriye sahip karbon nanotüplerdir. Şekil 3.4’de yüksek simetriye sahip koltuksu TDKNT’nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi görülmektedir. Uygun periyodik sınır koşulları, (n, n) koltuksu karbon nanotüplerin enerji özdeğerlerini elde etmek için kullanılır [34].

$$n\sqrt{3}k_{x,q}a = 2\pi q \quad (q = 1, \dots, 2n) \quad (3.6)$$

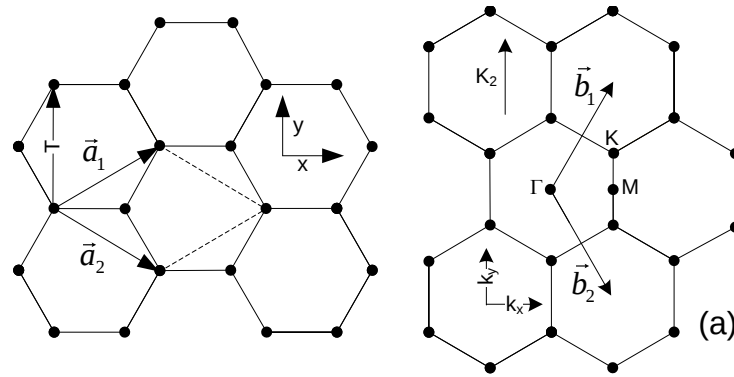
$k_{x,q}$ izinli değerleri eşitlik (3.3)’de yerine yazılırsa, koltuksu karbon nanotüpler için enerji dağılım bağıntıları $E_q^a(k)$,

$$E_q^a(k) = \pm t \left\{ 1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \right\}^{1/2} \quad (3.7)$$

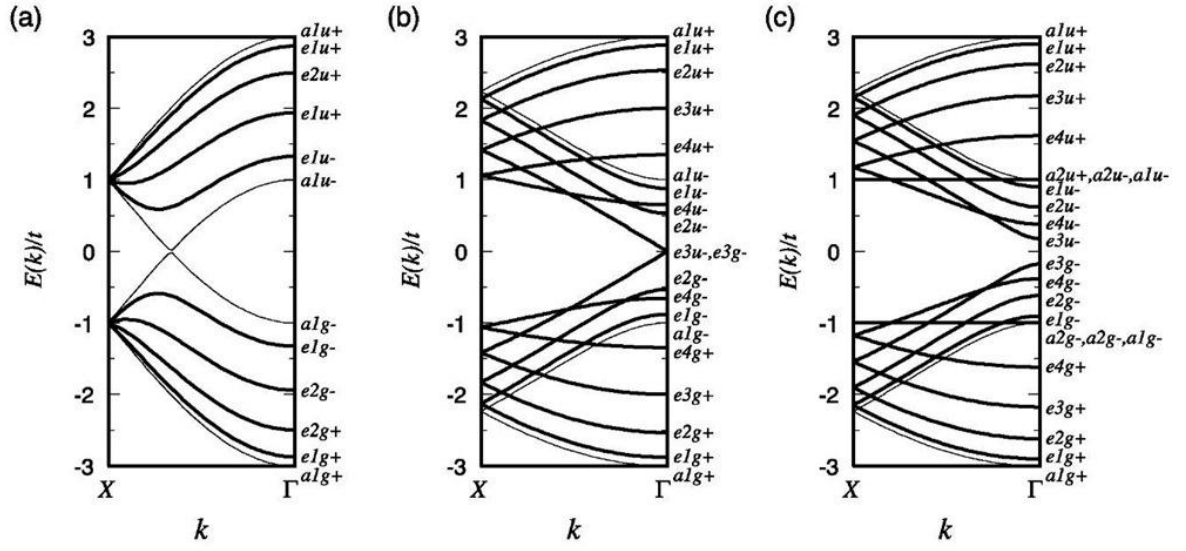
$$(-\pi < ka < \pi), (q = 1, \dots, 2n)$$

elde edilir. Eşitlik (3.7)’deki üst indis a, koltuksu (armchair) karbon nanotüp olduğunu göstermektedir. k , $K_2 = (b_1 - b_2)/2$ vektörü yönündeki bir boyutlu vektördür. Bu yön, grafitin iki boyutlu Brillouin bölgesinde Γ dan K noktasına denk gelir (Şekil 3.4) [34]. Şekil 3.5(a)’da (5,5) koltuksu karbon nanotüp için bir boyutlu (1D) dağılım bağıntısı görülmektedir. Tüm koltuksu karbon nanotüpler için $ka = \pi$ olduğunda, enerji bantları bölge sınırında yüksek bir yozlaşma gösterir ve eşitlik (3.3) aşağıdaki şekli alır.

$$E_{g2D}(k_{x,q}, \pi/a) = \pm t \quad (3.8)$$



Şekil 3. 4 Koltuksu TDKNT’nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi



Şekil 3. 5 (a) (5,5) Koltuksu, (b) (9,0) Zigzag ve (c) (10,0) Zigzag TDKNT'lerin bir boyutlu enerji dağılım bağıntıları [34]

3.1.3 Zigzag Karbon Nanotüplerin Enerji Dağılımları

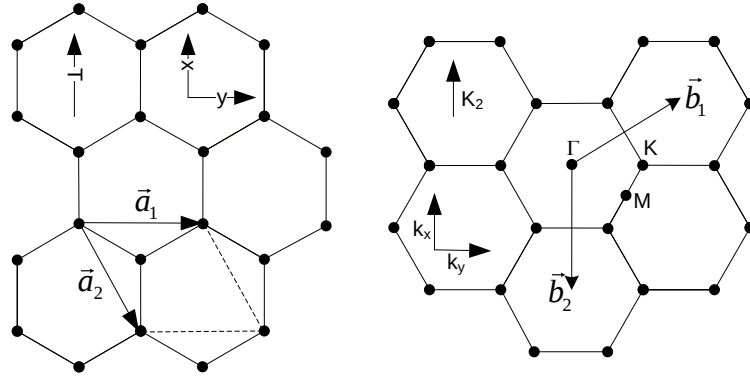
Zigzag $(n,0)$ karbon nanotüpler için enerji bantları benzer şekilde, k_y üzerinden periyodik sınır koşulları;

$$nk_{y,q}a = 2\pi q \quad (q = 1, \dots, 2n) \quad (3.9)$$

eşitlik (3.3)'de kullanılarak, zigzag karbon nanotüpler için enerji dağılım bağıntıları $E_q^z(k)$ elde edilir [34]. Şekil 3.6'da zigzag TDKNT'nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi görülmektedir.

$$E_q^z(k) = \pm t \left\{ 1 \pm 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}ka}{2} \right) \cos \left(\frac{q\pi}{n} \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{q\pi}{n} \right) \right\}^{1/2} \quad (3.10)$$

$$\left(-\frac{\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}} \right), (q = 1, \dots, 2n)$$



Şekil 3. 6 Zigzag TDKNT'nin birim hücre ve genişletilmiş Brillouin bölgesi

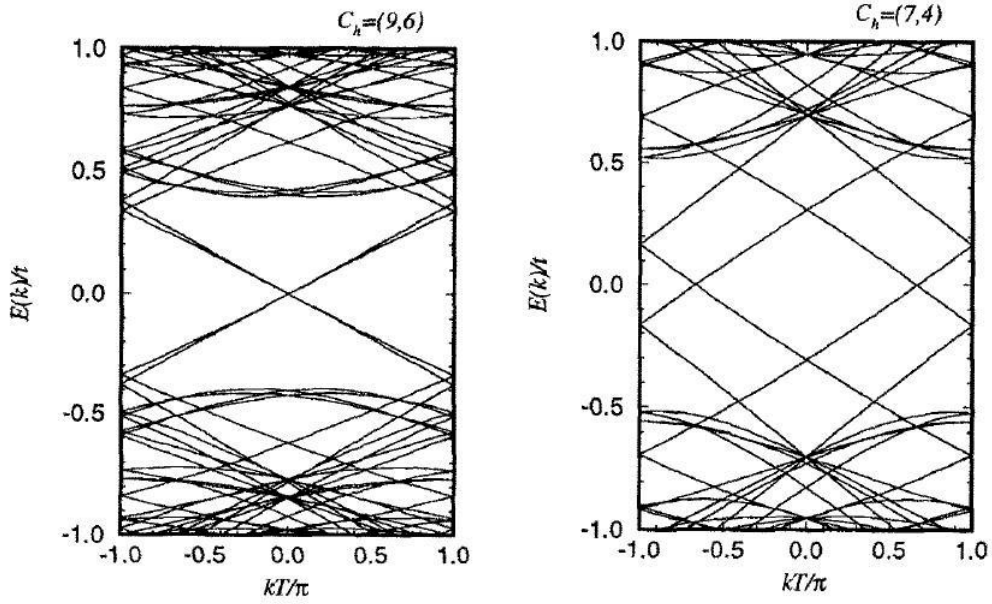
Şekil 3.5(b) ve (c)'de sırasıyla, $(9,0)$ ve $(10,0)$ zigzag KNT'ler için bir boyutlu (1D) dağılım bağıntıları görülmektedir. $(9,0)$ zigzag TDKNT için $k = 0$ da enerji bant aralığı yokken, $(10,0)$ zigzag TDKNT için enerji aralığı görülmektedir (Şekil 3.5).

3.2 Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunlukları ve Enerji Bant Aralıkları

Tüm metalik nanotüpler için, çap ve kiraliteden bağımsız olarak, nanotüp eksenî boyunca birim uzunluk başına durum yoğunluğu sabit olup;

$$N(E_F) = \frac{8}{\sqrt{3}\pi a|t|} \quad (3.11)$$

bağıntısı ile verilir. Burada a , grafen levhanın örgü sabiti, $|t|$, en yakın komşu $C - C$ bağlarının SB overlap enerjisidir (2.5 – 2.7 eV) [39]. Şekil 3.7’de (9,6) ve (7,4) metalik karbon nanotüplerin SB enerji bantları gösterilmiştir.



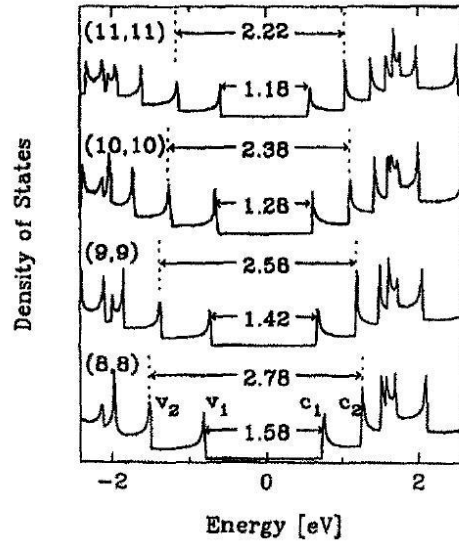
Şekil 3. 7 (9,6) ve (7,4) kiral karbon nanotüplerin enerji bantları [40]

Yarı iletken nanotüplerin enerji bant aralığı;

$$E_g = \frac{|t|a_{c-c}}{d_t} \quad (3.12)$$

(d_t , karbon nanotüp çapı, $a_{c-c} = a/\sqrt{3}$ olmak üzere) şeklinde verilir.

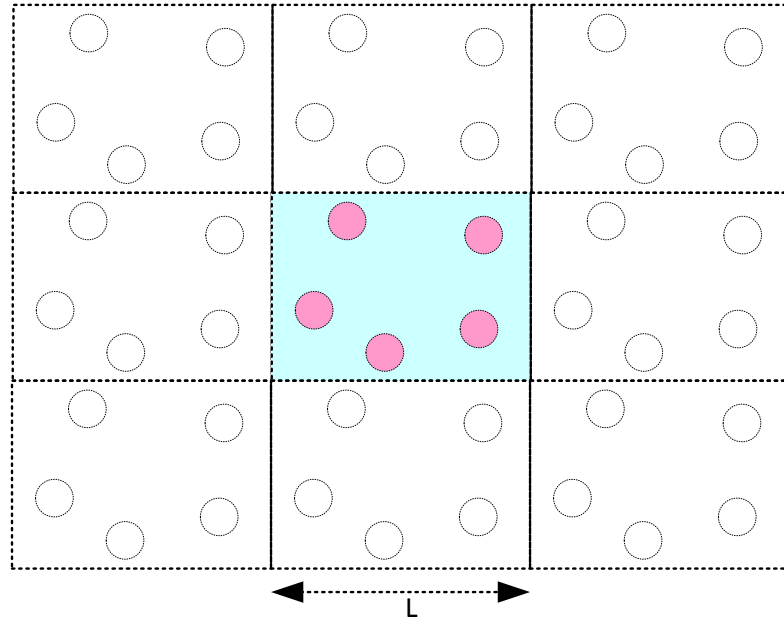
Şekil 3.8’de (8,8), (9,9), (10,10) ve (11,11) koltuksu karbon nanotüplerin SB modeli ile hesaplanan elektronik durum yoğunlukları görülmektedir.



Şekil 3. 8 (8,8), (9,9), (10,10) ve (11,11) koltuksu karbon nanotüplerin SB modeli ile hesaplanan elektronik durum yoğunlukları [40]

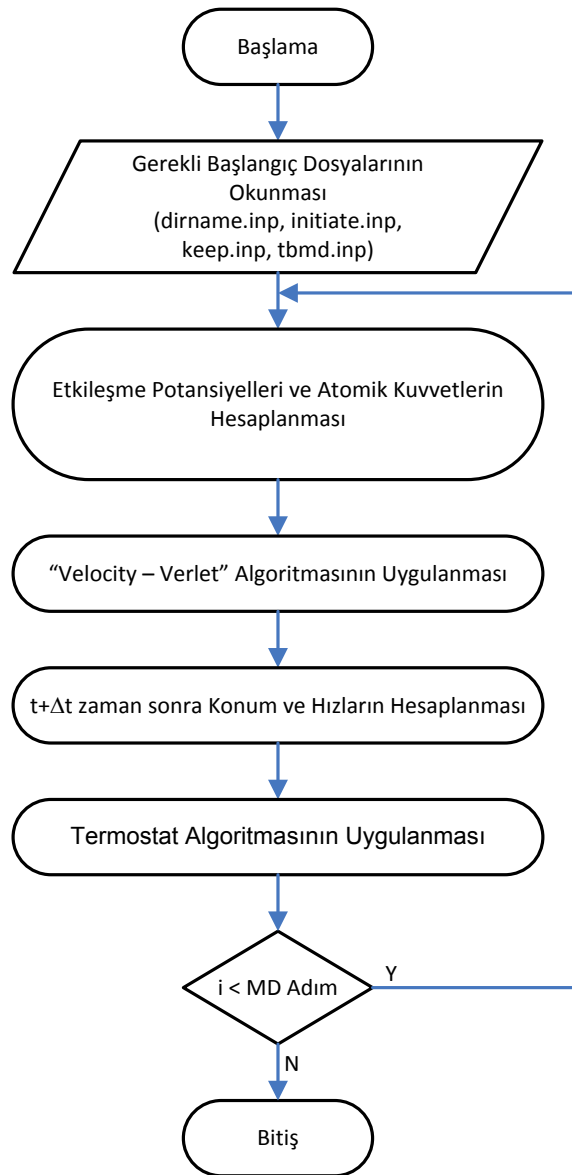
SİMÜLASYON YÖNTEMİ**4.1 Moleküler Dinamik Metot**

Moleküler dinamik metot, sistemde önceden tanımlanmış bir potansiyel enerjiye uygun olarak etkileşen ve sistemin sınırlarının (hacim, atom sayısı) periyodik sınır koşulları ile belirlendiği birkaç veya çok parçacıklı bir sistemi Hamiltoniyen, Lagrangian veya Newton hareket denklemleriyle sayısal olarak hesaplar. Yapılan simülasyonlarda hareket denklemleri iş yüküne bağlı olarak seri veya paralel bir bilgisayar kümesi yardımıyla çözülür. Periyodik sınır koşullarının uygulanması ile sistem üç koordinat doğrultusunda sonsuz yapılıdır (Şekil 4.1).



Şekil 4. 1 Periyodik Sınır Koşulları

Simülasyon çalışmalarında öncelikli olarak bir model seçilir ve bu modele uygun başlangıç parametreleri (başlangıç konumu ve hızı vs.) ve/veya dosyaları sisteme girilir [41]. Doktora çalışmalarında kullandığım programa ait başlangıç parametreleri *initiate.inp*, *keep.inp*, *dirname.inp* ve *tbmd.inp* dosyalarından okunmuştur. Parçacık sayısına bağlı olarak parçacıklara etkiyen kuvvetler etkileşme potansiyelleri yardımıyla hesaplanır. Newton hareket denklemleri yardımıyla parçacıkların ivmeleri hesaplanır [42]. “Velocity Verlet” algoritmaları kullanılarak parçacıkların $t + \Delta t$ anındaki yeni konum ve hızları hesaplanır (Şekil 4.2). “Velocity Verlet” algoritmasıyla ilgili detaylı bilgiler Bölüm 4.2 Verlet Algoritması başlığında detaylı bir şekilde anlatılmıştır.



Şekil 4. 2 Moleküler Dinamik Akış Diyagramı

4.2 Verlet Algoritması

Verlet algoritması, t anındaki sistem koşullarından $(t + \Delta t)$ anındaki durumu elde etmeyi hedefler [43]. $f(x)$ fonksiyonun a gerçel yada karmaşık bir sayı olmak üzere $(a - r, a + r)$ aralığındaki *Taylor serisi*;

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x - a) + \frac{f''(a)}{2!}(x - a)^2 + \dots + \frac{f^n(a)}{n!}(x - a)^n + \dots \quad (4.1)$$

şeklinde yazılır. Eşitlik (4.1) yardımıyla parçacığın $(t + \Delta t)$ koordinatları,

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2!}\vec{a}(t) + \frac{\Delta t^3}{3!}\vec{\ddot{r}}(t) + O(\Delta t^4) \quad (4.2)$$

Benzer açılım parçacığın $(t - \Delta t)$ koordinatları için yapılırsa;

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2!}\vec{a}(t) - \frac{\Delta t^3}{3!}\vec{\ddot{r}}(t) + O(\Delta t^4) \quad (4.3)$$

(4.2) ve (4.3) eşitlikleri birbirleriyle toplanırsa;

$$\vec{r}(t + \Delta t) + \vec{r}(t - \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \Delta t^2\vec{a}(t) + O(\Delta t^4) \quad (4.4)$$

şeklinde olur. Burada, Δt terimi simülasyonlarda kullanılan zaman adımını, $\vec{a}(t)$ ivmeyi ve $\vec{r}(t)$ de konumu göstermektedir. Eşitlik (4.2), (4.3) ve (4.4)'e bakıldığında eşitliklerin dördüncü dereceden ($O(\Delta t^4)$) hata terimi içerdikleri görülmektedir.

(4.3) eşitliği (4.2)'den çıkartılırsa;

$$\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t) = 2\vec{v}(t)\Delta t + O(\Delta t^3) \quad (4.5)$$

Bu denklemden hız terimine geçiş yapılırsa;

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (4.6)$$

elde edilir. Burada $O(\Delta t^2)$ hata terimidir. Buna göre, konum dördüncü dereceden hata terimi içerirken, hız ifadesi ikinci dereceden hata terimi içermektedir.

Verlet algoritmasının özellikleri;

- Verlet algoritması hafıza açısından oldukça hesaplıdır.
- Hassaslık açısından koordinatlarda $O(\Delta t^4)$, hızlarda $O(\Delta t^2)$ gibi hassaslık sağlar. Öte yandan Δt 'yi seçerken hız açısından mümkün oldukça büyük değerler seçilmek istenir. Ancak hassaslık açısından Δt 'yi küçük tutmak gerekir.
- Uzun zamanlarda enerji korunumu açısından Verlet algoritması çok başarılıdır.
- Verlet algoritması faz uzayında alan korunumunu sağlar. Diğer algoritmalara göre enerji korunumu açısından daha tutarlıdır.

Doktora çalışmalarımda hesaplamalarını yaptığım simülasyonlarda verlet algoritmasının bir benzeri "Velocity-Verlet" algoritması kullanılmıştır. Çok parçacıklı sürekli sistemlerde, parçacığın belli bir t anındaki konum, hız ve ivmesini biliyorsak $t + \Delta t$ anındaki konum, hız ve ivmelerine geçiş yapabiliriz. Taylor seri açılımındaki ilk üç terimi kullanarak konum, hız ve ivmeleri seriye açarsak;

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2!} \vec{a}(t) \quad (4.7)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2!} \vec{b}(t) = \vec{v}(t) + \frac{\Delta t}{2!} (2\vec{a}(t) + \vec{b}(t)\Delta t) \quad (4.8)$$

$$\vec{a}(t + \Delta t) = \vec{a}(t) + \vec{b}(t)\Delta t \quad (4.9)$$

şeklinde yazılır. $\vec{a}(t + \Delta t)$ eşitliği, $\vec{v}(t + \Delta t)$ ifadesinde yerine yazılırsa;

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{\Delta t}{2!} [\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)] \quad (4.10)$$

eşitliği elde edilir. Toplam kuvvet hesaplandıktan sonra,

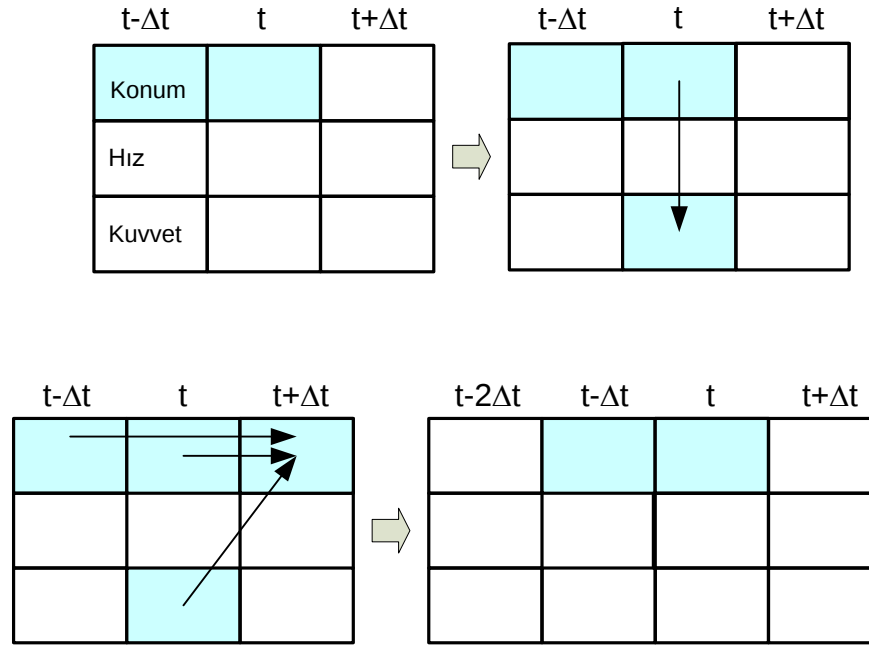
$$\vec{a}_i(t) = \frac{\vec{f}_{top,i}(t)}{m_i} \quad (4.11)$$

(4.11) eşitliğiyle ivmeler bulunur. Buradan (4.7) eşitliğine geçiş yapılarak yeni konumlar hesaplanır. Bulunan yeni konumlarla sistemdeki her bir atom için kuvvet hesaplanır.

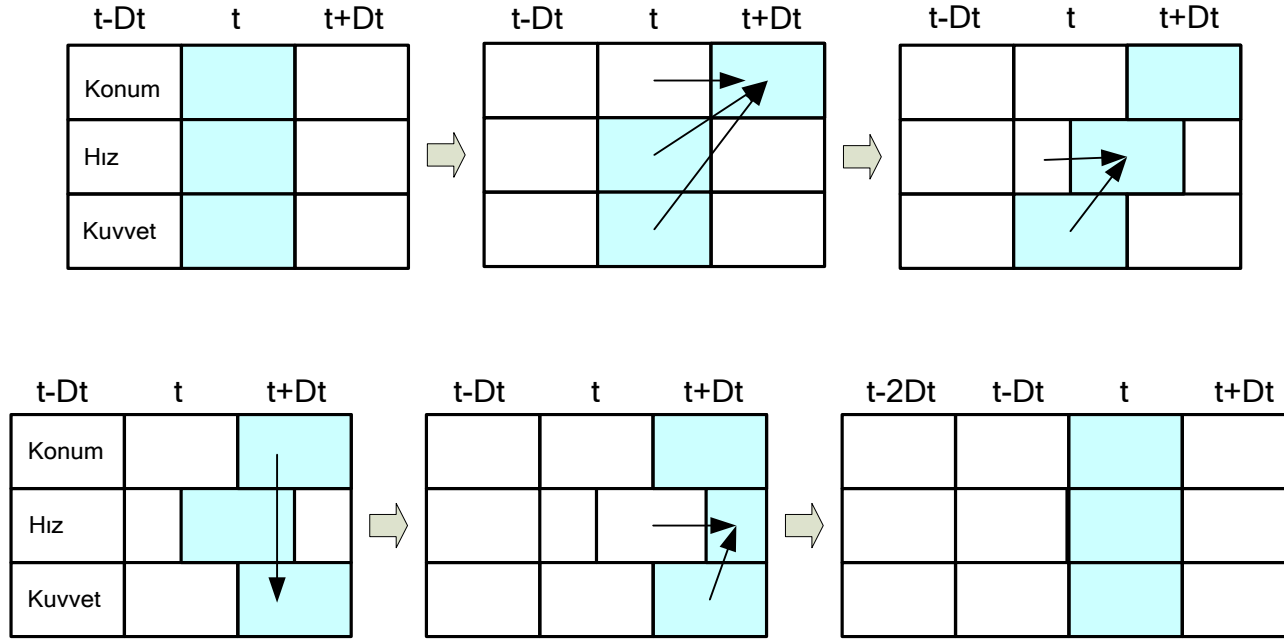
Buradan,

$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = \frac{\vec{f}_{top,i}(t + \Delta t)}{m_i} \quad (4.12)$$

eşitliğiyle yeni ivmelere geçilir. (4.10) eşitliğiyle yeni hızlar hesaplanır.



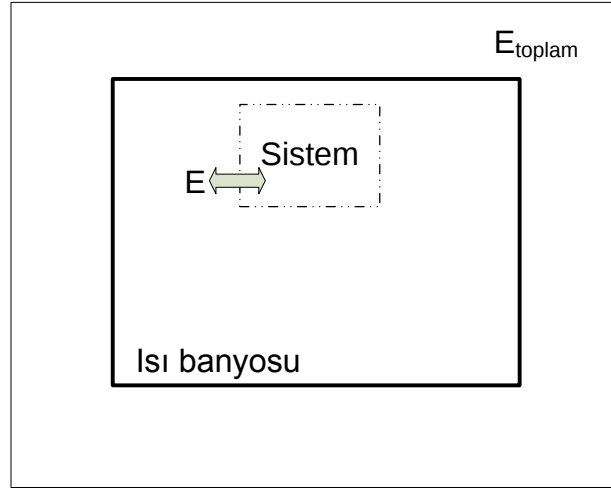
Şekil 4. 3 Verlet Akış Diyagramı [43]



Şekil 4. 4 Velocity Verlet Akış Diyagramı [43]

4.3 Kanonik (NVT) Moleküler Dinamik

Parçacık sayısı (N), hacim (V) ve sıcaklığın (T) sabit olduğu ve toplam doğrusal momentumun sıfır olduğu istatistiksel topluluğa kanonik (N,V,T) topluluk denir. Kanonik toplulukta sistemin sıcaklığını sabit tutabilmek için sistemle enerji alış-verişi içinde olan bir ısı banyosuyla birleştirilmiştir (Şekil 4.5).



Şekil 4. 5 Kanonik (NVT) Küme

Sabit sıcaklıkta toplam enerji korunmamaktadır. Bununla birlikte ortalama kinetik enerji sıcaklıkla bağlantılı olduğu için bir hareket sabitidir [44].

$$\bar{E}_k = \frac{3}{2} N k_B T \quad (4.13)$$

Sabit sıcaklık için enerji dalgalanmalarını sağlamanın bir yolu hareket denklemlerine bir kısıtlama denklemi eklemektir. Doğal olarak kısıtlama için kinetik enerji simülasyon seyri boyunca, verilen bir değerde sabitlenir. Bu izokinetik yaklaşımda sadece ortalama sıcaklık sabittir ve

$$\Lambda = \frac{1}{2} \sum_i m v_i^2 = \text{sabit} \quad (4.14)$$

olarak ifade edilir. Hızların ölçeklendirilmesi için uygun bir “ölçeklendirme çarpanı” β belirlenmelidir. Sistem 3N serbestlik derecesine sahiptir. Ancak sistemin toplam

doğrusal momentumun sıfır olması serbestlik derecesini 3 sayı azaltır, ayrıca sabit kinetik enerji de 1 sayı daha azalma getirir. Sonuç olarak ölçeklendirme çarpanı;

$$\beta = \left(\frac{(3N - 4)k_B T_{ref}}{\sum_i m v_i^2} \right)^{1/2} \quad (4.15)$$

şeklinde verilir. Ölçeklendirme adımı sonrası;

$$\frac{1}{2} \sum_i m v_i^2 = \frac{1}{2} (3N - 4) k_B T_{ref} \quad (4.16)$$

elde edilir. Genelde $(3N - 4)$ terimi, $(3N)$ olarak kullanılır [45].

4.4 Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemi

Valans elektronları ve iyonlarından oluşan sistemin toplam hamiltonyeni;

$$H_{top} = T_i + T_e + U_{ii} + U_{ie} + U_{ee} \quad (4.17)$$

şeklindedir. 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.

$$h|\psi_n\rangle = \varepsilon_n|\psi_n\rangle \quad (4.18)$$

h , tek parçacık hamiltonyeni olmak üzere;

$$h = T + U_{ie} + U_{ee} \quad (4.19)$$

şeklinde yazılır. $|\psi_n\rangle$, sistemin n . *inci* durum öz fonksiyonu, ε_n ise n . *inci* durum enerji özdeğerini göstermektedir.

Sıkı-bağ formalizminde dalga fonksiyonları, atomik orbitallerin lineer kombinasyonu formundadır. Bu yaklaşıma göre dalga fonksiyonları,

$$|\psi_n\rangle = \sum_{l\alpha} C_{l\alpha}^n |\Phi_{l\alpha}\rangle \quad (4.20)$$

şeklindedir. Burada l , yörünge sayısını, α , iyon numarasını ve $C_{l\alpha}^n$ ise doluluk katsayısını göstermektedir. $|\Phi_{l\alpha}\rangle$ baz seti ortogonal değildir. Ortogonal olmayan baz seti kullanılması simülasyonda iş yükünü arttıracığından uygun değildir. Bu nedenle, ortogonal olan ve aynı temel simetri özelliklerini gösteren yeni bir baz seti kullanılabilir. Bu ortogonal baz seti "Löwdin" orbitalleridir ($\varphi_{l\alpha}$). Löwdin orbitallerinin kullanılmasıyla seküler denklem;

$$\sum_{l'\beta} (\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle - \varepsilon_n \delta_{l'l} \delta_{\alpha\beta}) C_{l\alpha}^n = 0 \quad (4.21)$$

haline dönüşür. Seküler denklemde çözülmesi gereken önemli kısım hopping integralleri olarak adlandırılan $\langle \varphi_{l'\beta} | h | \varphi_{l\alpha} \rangle$ matris elemanlarıdır. Bunun için bazı yaklaşımlar yapılması gereklidir [46-49].

Bu yaklaşımlar şunlardır:

- i. Minimal baz seti seçilir.
- ii. Kısa mesafe etkileşimleri alınır.
- iii. Yalnız çiftli etkileşimler hesaba katılır.

Seküler denklemin çözülmesiyle tek parçacık enerji özdeğerleri bulunmuş olur. İyonlardan ve valans elektronlarından oluşan sistemin toplam enerjisi;

$$E_{top} = 2 \sum_n f_{FD}(\epsilon_n, T) \epsilon_n + U_{ii} - U_{ee} \quad (4.22)$$

olarak yazılabilir. Burada bant yapısı enerjisi ve itici potansiyel enerji sırasıyla,

$$E_{bs} = 2 \sum_n f_{FD}(\epsilon_n, T) \epsilon_n \quad (4.23)$$

$$U_{rep} = U_{ii} - U_{ee} \quad (4.24)$$

eşitlikleri ile tanımlanır.

Moleküler dinamik simülasyonlarında, atomları hareket ettiren atomlar arası kuvvetlerin hesaplanması ve faz uzayında sistemin yörüngesinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu hesaplamalar için SBMD hamiltoniyeni kullanılmaktadır.

$$H = \sum_{\alpha} \frac{P_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + 2 \sum_n f_{FD}(\epsilon_n, T) \epsilon_n + U_{rep} \quad (4.25)$$

$$\vec{F}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial \vec{R}_{\alpha}} = -\frac{\partial}{\partial \vec{R}_{\alpha}} 2 \sum_n \epsilon_n f(\epsilon_n, T) - \frac{\partial U_{rep}}{\partial \vec{R}_{\alpha}} \quad (4.26)$$

$$= -2 \frac{\partial}{\partial \vec{R}_{\alpha}} \sum_n \langle \psi_n | h | \psi_n \rangle f(\epsilon_n, T) - \frac{\partial U_{rep}}{\partial \vec{R}_{\alpha}} \quad (4.27)$$

4.25, 4.26 ve 4.27 denklemlerinde ilk kısım çekici kuvvetleri, ikinci kısım ise itici kuvvetleri göstermektedir. U_{rep} , kısa mesafelere kadar olan çiftli etkileşimleri atomlar

arası uzaklığın bir fonksiyonu olarak içeren analitik bir fonksiyon olduğundan, itici kuvvet özel bir yöntem gerekmeden kolayca hesaplanır, sayısal değerlendirilmesi klasik deneyden türetilen potansiyellerle aynıdır. Çekici kuvvet terimi ise, Hellmann-Feynman teoremi ile hesaplanmaktadır. Bu katkının hesaplanması için denge konumlarında bulunmayan atomlar arasındaki SB matris elemanlarının (hopping integrallerinin) hesaplanması gerekmektedir.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \vec{R}_\alpha} \sum_n \langle \psi_n | h | \psi_n \rangle f(\epsilon_n, T) &= - \frac{\partial}{\partial \vec{R}_\alpha} \sum_n f(\epsilon_n, T) \sum_{l\gamma} \sum_{l'\beta} C_{l\gamma}^n C_{l'\beta}^n \langle \phi_{l'\gamma} | h | \phi_{l\beta} \rangle \\
&= \frac{\partial}{\partial \vec{R}_\alpha} \sum_n f(\epsilon_n, T) \sum_{l\gamma} \sum_{l'\beta} C_{l\gamma}^n C_{l'\beta}^n h_{ll'}(\vec{R}_{\gamma\beta}) \\
&= \sum_n f(\epsilon_n, T) \sum_{l\gamma} \sum_{l'\beta} C_{l\gamma}^n C_{l'\beta}^n h_{ll'}^{(0)} \frac{\partial}{\partial \vec{R}_\alpha} f_{ll'}(\vec{R}_{\gamma\beta}) \quad (4.28)
\end{aligned}$$

Bu matris elemanlarının hesaplanabilmesi için yani, tüm dolu elektronik özdurumlar üzerinden ϵ_n özdeğerlerinin ve bunlara ait özvektörlerin bulunmasında “Goodwin-Skinner-Pettifor modeli” (GSP) kullanılmaktadır [50]. Bu modele göre eşitlik (4.28) için

$$\begin{aligned}
f_{ll'}(\vec{R}_{\gamma\beta}) &= f_{ll'}(R^0) \left(\frac{R^0}{R} \right)^n \exp \left\{ n \left[- \left(\frac{R}{R^c} \right)^{n_c} + \left(\frac{R^0}{R^c} \right)^{n_c} \right] \right\} \\
&= f_{ll'}(R^0) \text{ölçek}(ll') \quad (4.29)
\end{aligned}$$

kullanılmaktadır. Bu modelde kullanılan hopping integrallerinin ölçeklendirme fonksiyonları karbon atomları için Xu vd. [51] tarafından geliştirilmiştir ve SB yönteminin karbon atomu için literatürdeki tek parametreleridir. Bu parametreler elmas, grafit gibi çeşitli karbon yapılar için temel ilkeler yerel yoğunluk yaklaşımı yöntemiyle hesaplanan “enerji ilk komşu atomlararası mesafe” sonuçları kullanılarak belirlenmiştir.

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

Geleneksel sıkı-bağ teorisi Schrödinger denklemini ters uzayda direkt olarak hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle çözer. Bu da atom sayısı (N) ile kübik orantılı $O(N^3)$ bir çözüm zamanı gerektirir. $O(N)$ metodu bant enerjisini gerçek uzayda çözer ve her atom için sadece yerel bölgeyi bağa ve böylece bant enerjisi hesaplarına katan bir yaklaşım yapar [22]. Bu durumda, simülasyon zamanı atom sayısına bağlı olarak doğrusal orantılı olmaktadır. Tüm $O(N)$ metotları tek-elektron hamilton denkleminin çözümlerine yaklaşımlar sağlamaktadır. $O(N)$ yaklaşımı, mesaj aktarımı “Parallel Virtual Machine” (PVM) kütüphaneleri kullanılarak etkin bir şekilde paralel hale getirilebilir. Çalışmamızda “Divide and Conquer” (DAC) yaklaşımı yöntemi kullanılmaktadır [52]. Bu yöneme 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 yörüngeler yerine yerel baz fonksiyonları ile ifade edilmektedir. Komşu atomların baz fonksiyonları kullanılarak bu yöntemin duyarlılığı güçlendirilmektedir. Bu komşu atomlara “buffer” denilir. Her bir alt sisteme ait hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle özdeğerler ve özvektörler bulunur [53].

4.6 Simülasyon Parametrelerinin Belirlenmesi

Simülasyon çalışmalarına başlamadan önce öncelikle programın, sırasıyla 360, 380, 400 ve 440 atomlu, 20 tabakalı (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere uygun başlangıç parametreleri belirlendi. Doktora tezimde çalışılan zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ 'deki simülasyon görüntüleri Şekil 4.6'da gösterilmiştir. Simülasyon çalışmalarında TDKNT'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (n_{layer}), simülasyon süresini belirleyen moleküler adımı (dt), kutu büyüklüğü parametresi "*boxsize*" ve çalışılan her bir TDKNT'nin $O(N^3) - O(N)$ enerji hata grafiklerinden belirlenen "*buffer skin size*" parametreleri incelendi.

Simülasyon çalışmalarında moleküler dinamik adım zamanı $\Delta t = 0.02$ ve $\Delta t = 1$ fs seçilerek TDKNT'lerin dengeleme işlemleri gerçekleştirildi. Şekil 4.7 ve 4.8'de sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta $\Delta t = 0.02$ fs'de toplam enerjinin MD adıma göre değişimi gösterilmiştir. 3000 MD adım ve $\Delta t = 0.02$ fs MD adım aralığında sistemin dengeye gelmediği görülmektedir. $\Delta t = 1$ fs adım zamanında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin dengeye ulaştığı görülmektedir (Şekil 4.9 – 4.10). Buna göre moleküler dinamik adım zamanı 1 fs olarak seçildi.

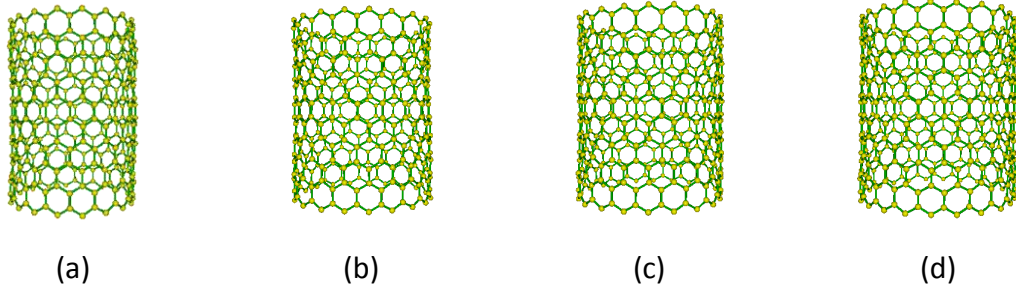
Tüpün kutu büyüklüğü parametresi olan "*boxsize*" değeri tüp eksenini boyunca iki karbon atomu arasındaki mesafe olan 1.229 Å olarak seçildi ve simülasyonlar boyunca bu değer kullanıldı.

Çalışılan zigzag TDKNT'lerin "*buffer skin size*" değerleri aşağıdaki gibi hesaplanmıştır:

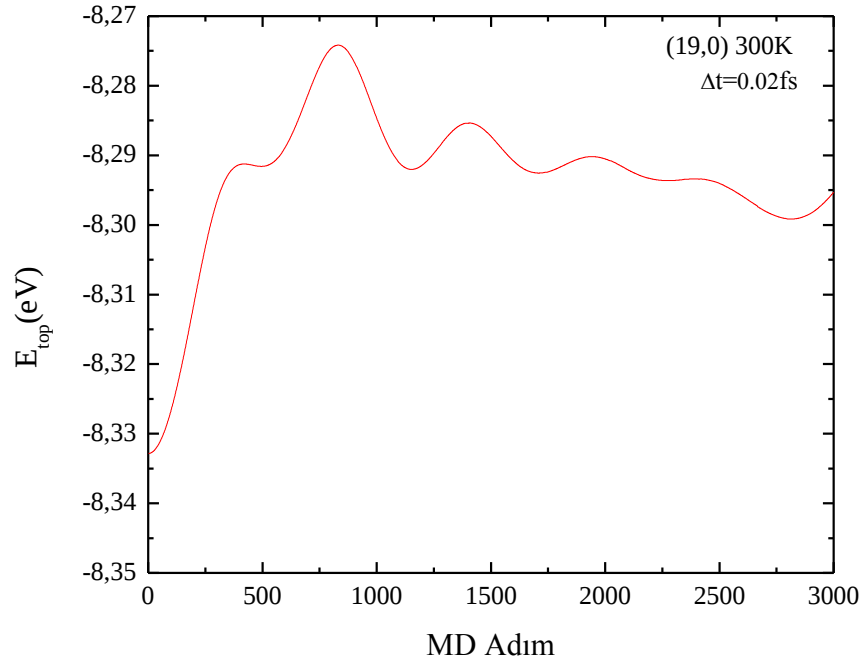
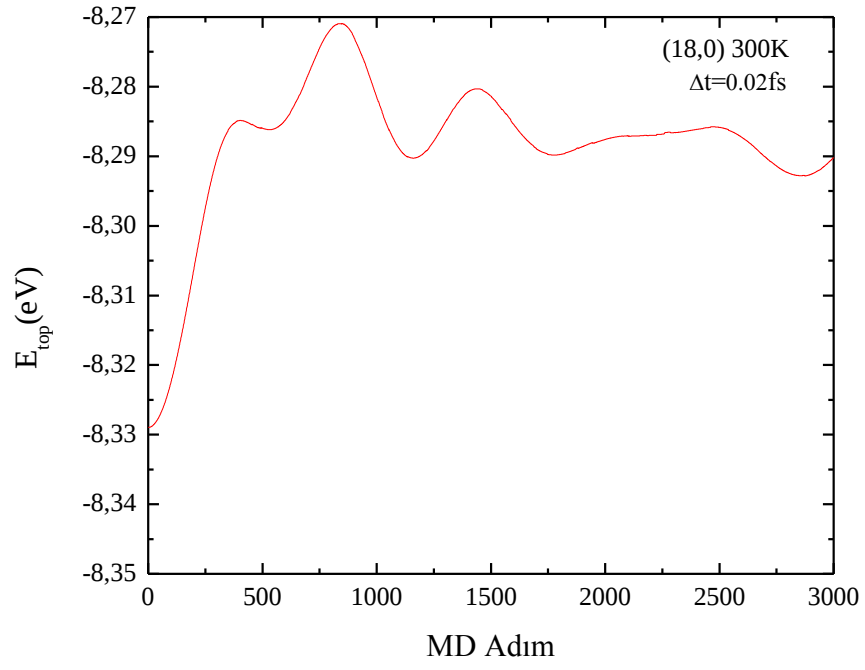
$O(N^3)$ yöntemi, Schrödinger denklemini tüm sistemin Hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle çözer, bu da atom sayısının (N) küpü ile orantılı simülasyon zamanı $O(N^3)$ gerektirmektedir. $O(N)$ metodu ise, tüm sistemi alt sistemlere böler. Her bir alt sistemin çözümleri bulunarak toplam sistemin çözümü elde edilir (DAC). $O(N)$ tekniği her atomun sadece yerel çevresinin bağ yapmaya etkisi olduğu prensibinden hareket eder. Buna göre alt sistemler seçilir. DAC yaklaşımı, tüm sistemi alt sistemlere bölerek her bir sistemi, kendi içerisinde çözer. Her alt sistemin bir buffer bölgesi ve buna göre oluşturulmuş hamilton matrisi vardır. Tüm sistemin hamilton matrisinin çözümü yerine oluşturulan küçük hamilton matrislerinin çözümü yapılır. Küçük hamilton matrisleri köşegenleştirilerek özdeğerler ve özvektörler elde edilir. Her

bir alt sistem köşegenleştirildikten sonra elde edilen bilgiler esas sistemin kimyasal potansiyelini hesaplamada kullanılır. Hesaplanan kimyasal potansiyel bize Fermi enerjisinin seviyesini verir. Buradan bant yapısı enerjisi bulunur. Her alt sistem çözümlerinin toplamıyla tüm sistemin çözümü bulunmuş olur. Alt sistemlerin büyüklüğünü “*buffer skin size*” parametresi belirler [54].

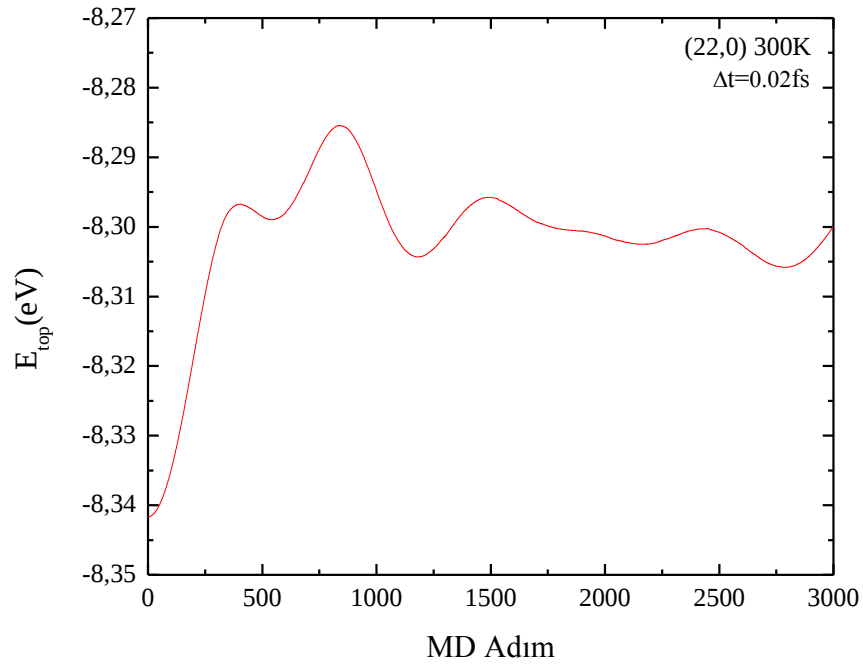
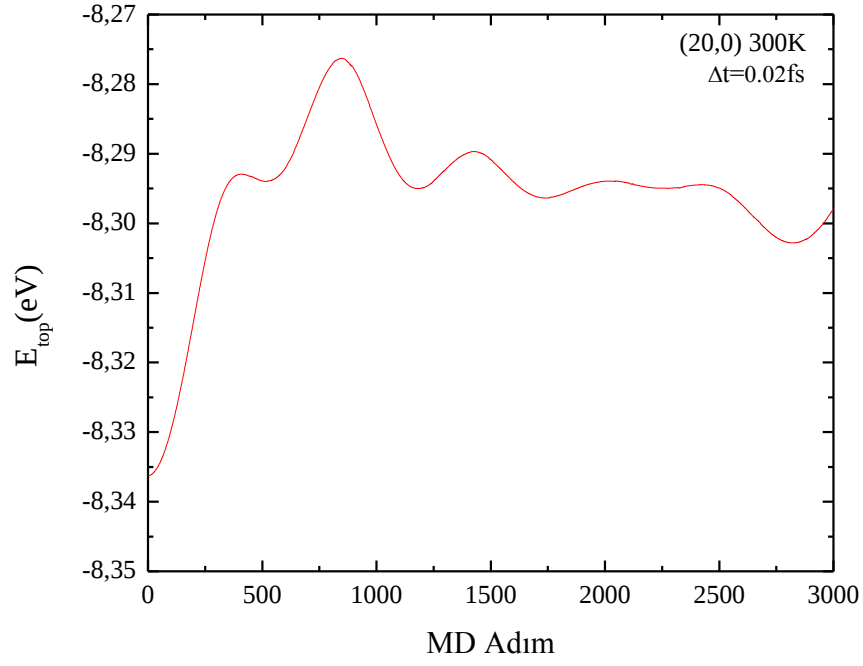
$O(N)$ sonuçlarının, $O(N^3)$ ile uygunluğunu sağlayabilmek için, çalışılan her tüp için $O(N^3) - O(N)$ enerji hata grafikleri oluşturuldu. Bu grafikler tüpün bir moleküler dinamik (MD) simülasyon adımı için, $O(N^3)$ ortalama atom başına toplam enerji değeri ile $O(N)$ atom başına toplam enerji değerleri arasındaki farkın (bu fark “*hata*” olarak tanımlandı) farklı “*buffer skin size*” değerlerine göre çizilmesi ile oluşturuldu (Şekil 4.11 – 4.12). Çalışılan (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin buffer büyüklükleri sırasıyla 4.6, 4.8, 4.7 ve 4.7 Å olarak belirlendi (Çizelge 4.1). Buffer skin size parametresinin büyük seçilmesi simülasyon zamanını attırır. Küçük seçilmesi ise hatalı sonuçlara neden olur. Bu nedenle enerji farkını minimum yapan değerler buffer skin size parametresi olarak belirlendi.



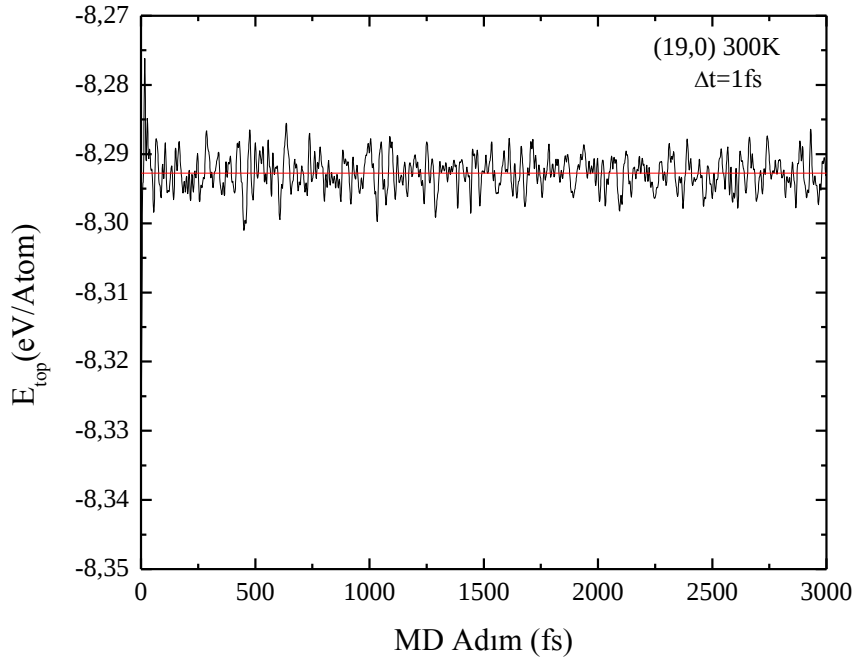
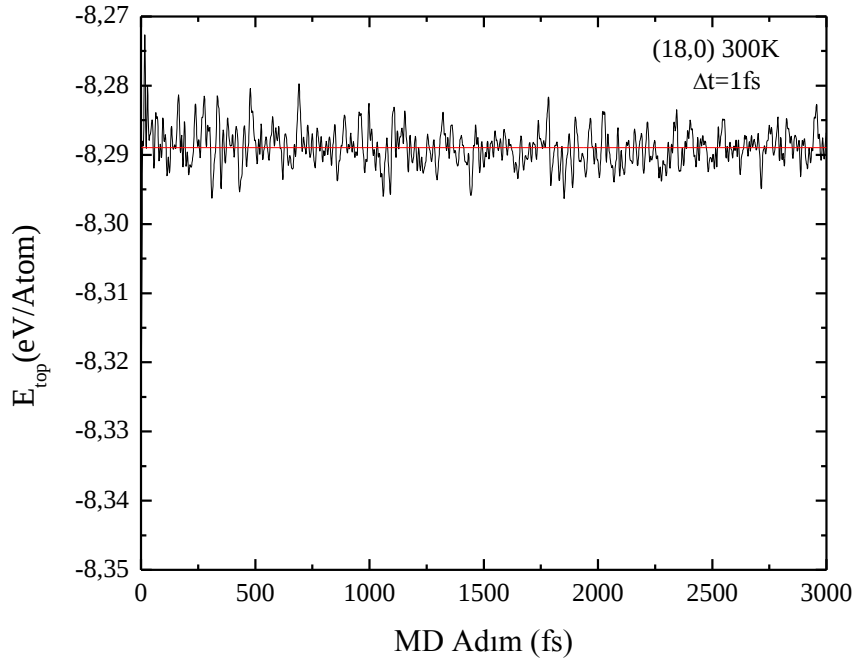
Şekil 4. 6 Sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT’lerin $T = 300K$ simülasyon görüntüleri



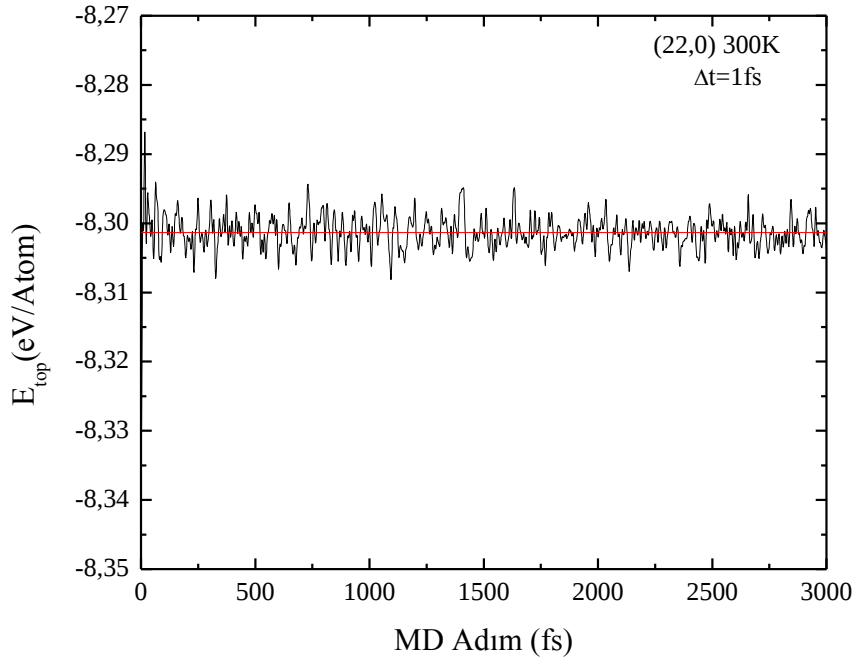
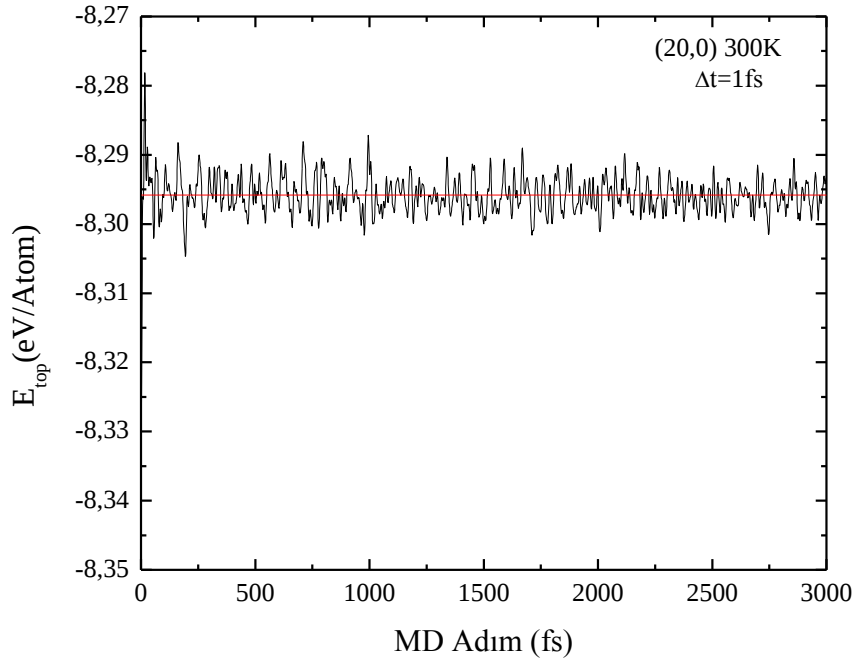
Şekil 4. 7 $\Delta t = 0.02 \text{ fs}$ (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişimi



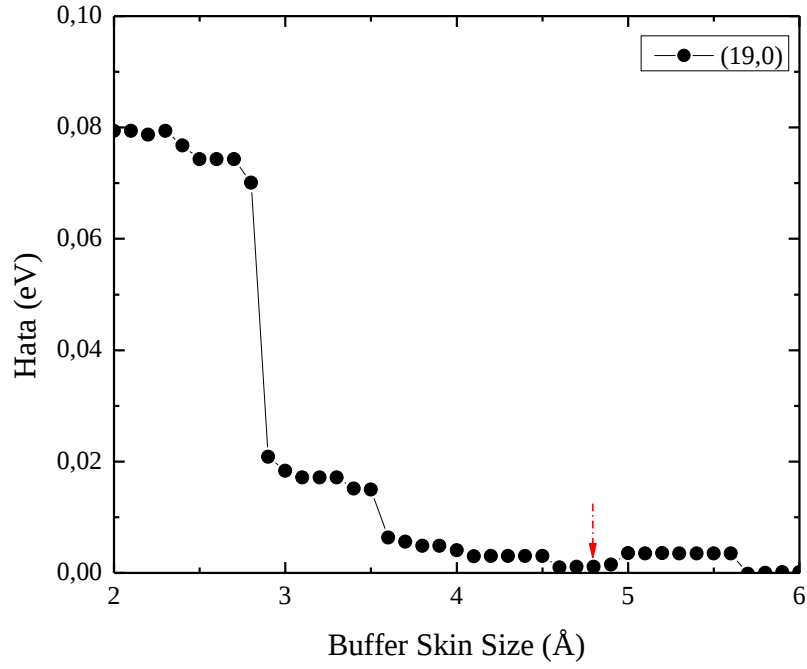
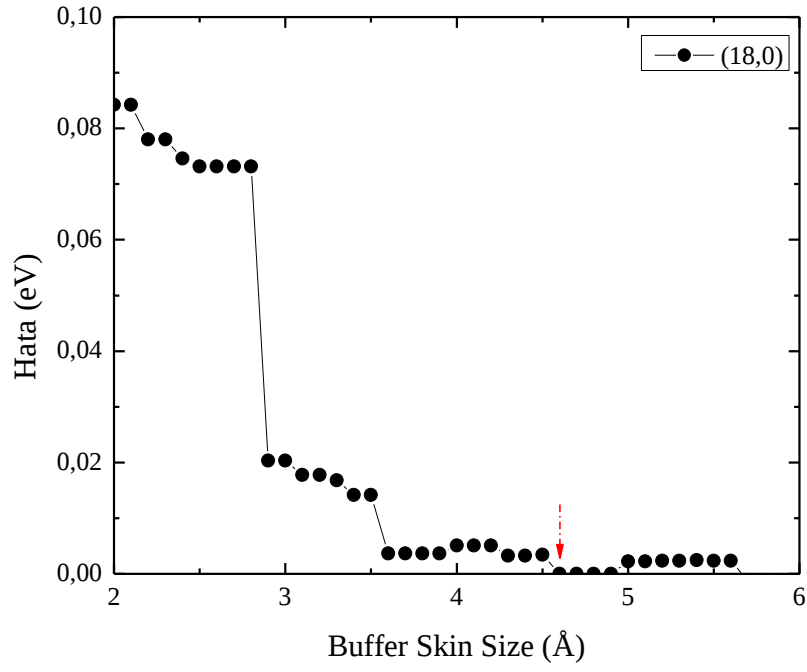
Şekil 4. 8 $\Delta t = 0.02 \text{ fs}$ (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjisinin MD adımına göre değişim



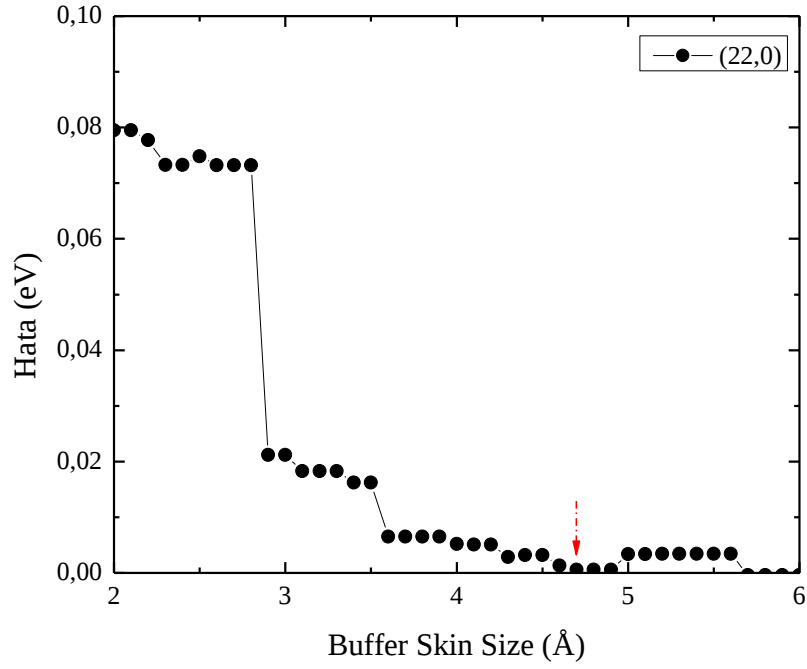
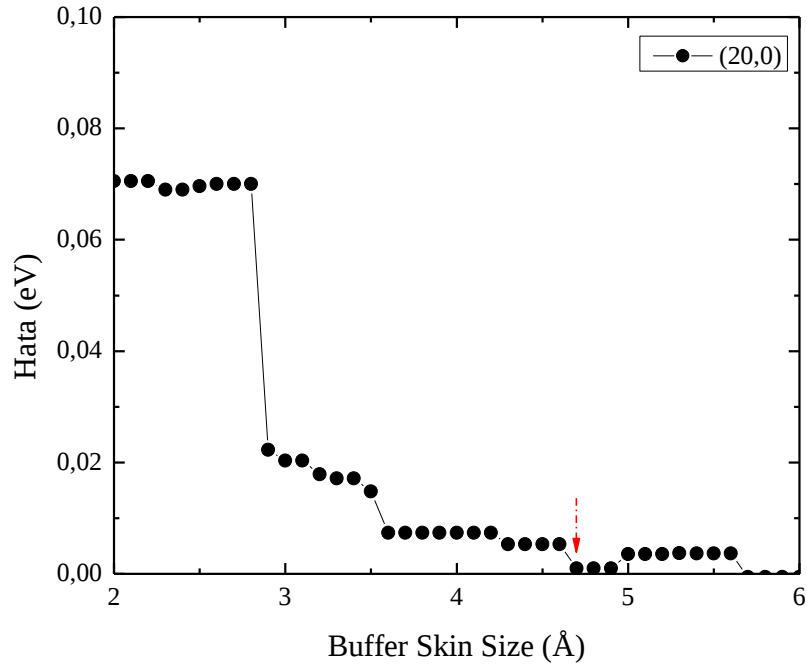
Şekil 4. 9 $\Delta t = 1$ fs (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjinin MD adımına göre değişimi



Şekil 4. 10 $\Delta t = 1$ fs (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta toplam enerjisinin MD adımına göre değişimi



Şekil 4. 11 (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT’lerin “Buffer Skin Size” parametresine bağlı olarak $O(N^3) - O(N)$ toplam enerji fark grafikleri



Şekil 4. 12 (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin "Buffer Skin Size" parametresine bağlı olarak $O(N^3) - O(N)$ toplam enerji fark grafikleri

BİLGİSAYAR SİMÜLASYON SONUÇLARI

5.1 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları

TDKNT'ler, nano-boyutlarından kaynaklanan dikkat çekici elektronik özellikleri nedeniyle, geleceğin elektronik aygıt tasarımları için kullanılacak en önemli malzemeler arasındadır. TDKNT'ler üzerlerine uygulanan germe – sıkıştırma deformasyonları ile elektronik özellikleri değişmekte ve metal – yarı iletken, yarı iletken – metal geçişleri meydana gelmektedir. Bu konuda yapılan çalışmalar elektronik aygıtlarda kullanılacak TDKNT'lerin elektronik yapılarının kontrolü hakkında literatüre önemli bilgiler kazandıracaktır. Bu nedenle, TDKNT'ler üzerine uygulanan germe – sıkıştırma çalışmalarının incelenmesi önem kazanmaktadır.

TDKNT'lerin özellikleri, simetri özelliklerini belirleyen kiral vektörüne ($\vec{C}_h = (n, m)$) bağlı olarak değişmektedir. Doktora tez çalışmalarımda TDKNT'ler n ve m indislerine bağlı olarak $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$, $(n - m) = 3q + 2$ olarak üç grupta toplanmıştır. $(n - m) = 3q$ grubuna örnek olarak (18,0) zigzag TDKNT, $(n - m) = 3q + 1$ grubuna örnek olarak (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler, $(n - m) = 3q + 2$ grubuna örnek olarak (22,0) zigzag TDKNT seçilmiştir. Seçilen TDKNT'lerin yarıçapları sırasıyla 7.05, 7.45, 7.84 ve 8.62 Å değerindedir. Seçilen zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altında elektronik özellikleri ($E_f, eDOS, E_g$) N-Mertebe SBMD simülasyon yöntemi kullanılarak incelendi.

Simülasyonlarda, TDKNT'lere germe – sıkıştırma gerinimleri tüp eksenine boyunca;

$$\varepsilon = \frac{(l - l_0)}{l_0} \quad (5.1)$$

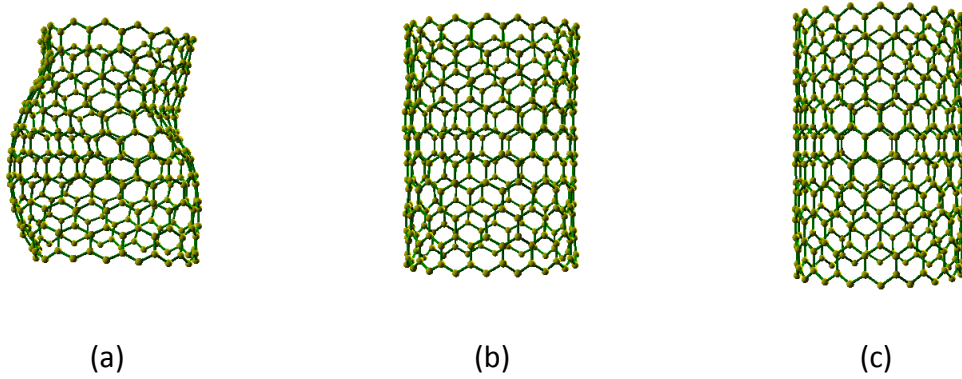
eşitliğiyle uygulanmıştır. Burada l_0 : TDKNT'nin başlangıçtaki boyu, l : TDKNT'nin germe – sıkıştırma değerindeki boyunu göstermektedir. Simülasyonlarda, “negatif” gerinim değerleri aksel sıkıştırmayı, “pozitif” gerinim değerleri de aksel germeyi ifade etmektedir. TDKNT'lerin gerinim değerleri z-doğrultusunda % boy artışı olarak uygulandı. Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapılmıştır. Uygulanan gerinim değerleri ise denge durumundaki TDKNT'lerin üzerine 2000 MD adım olacak şekilde uygulanmıştır. Germe – sıkıştırma çalışmaları 5 farklı sıcaklık (0.1, 300, 900, 1200 ve 1500) değerinde çalışıldı. Her sıcaklık değerinde çalışılan zigzag TDKNT'lere germe için %1'den %23'e, sıkıştırma için de %1'den %9'a kadar gerinimler uygulandı.

5.1.1 300K Sıcaklığında Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları

Karbon nanotüpler elektriksel, mekanik ve elektromekanik özellikleri nedeniyle çok dikkat çekici malzemelerdir [55-57]. Karbon nanotüplerin “strain sensor” ile uyumluluğu hem deneysel hem de teorik olarak kanıtlanmıştır [58]. Aksel gerinim altındaki karbon nanotüplerin kiralitesine bağlı enerji bant aralıklarındaki değişimin öngürülebilir olması, karbon nanotüplerin sensör yapımında kullanımına olanak sağlamıştır [58-60]. Literatürde Neng-Kai Chang vd. tarafından yapılan “strain sensor” çalışmaları oda sıcaklığında yapılmıştır [61]. Bu nedenle, TDKNT'ler üzerine uygulanan germe – sıkıştırma çalışmalarının oda sıcaklığında incelenmesi önem kazanmaktadır. Doktora tezi çalışmalarımda, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklığında (~oda sıcaklığında) germe – sıkıştırma etkisi altında elektronik yapıları (E_f , $eDOS$, E_g) incelenmiştir.

5.1.1.1 (18,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı

(18,0) zigzag TDKNT'nin germe – sıkıştırma çalışmaları öncelikli olarak 300K sıcaklığında incelendi. (18,0) zigzag TDKNT üzerine %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9'a kadar da sıkıştırma işlemi TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar sistematik bir şekilde uygulandı. (18,0) zigzag TDKNT'nin denge, %8 germe ve sıkıştırma değerleri için simülasyon görüntüleri Şekil 5. 1'de gösterilmiştir.

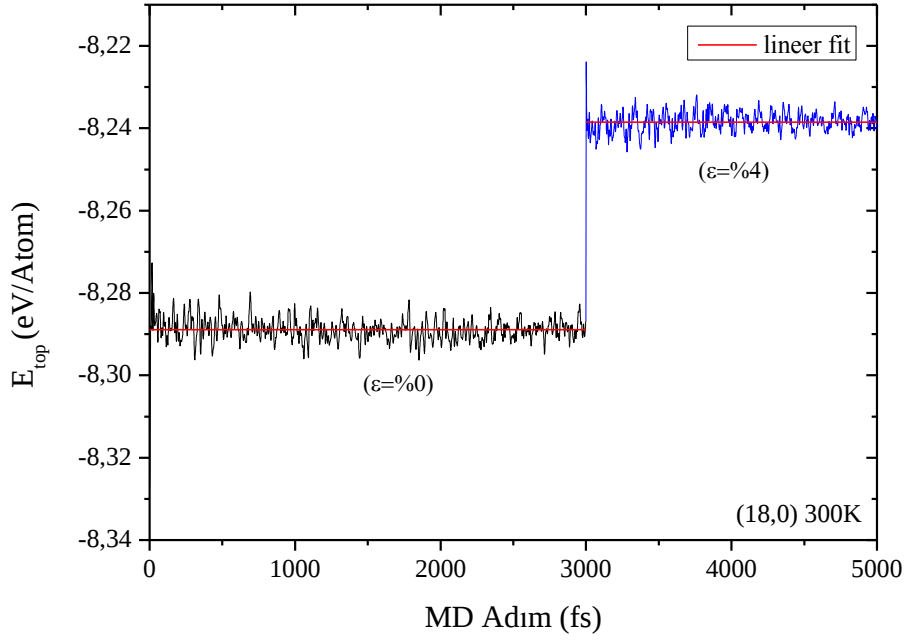


Şekil 5. 1 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri

Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapılmıştır. Uygulanan gerinim değerleri ise denge durumundaki TDKNT üzerine 2000 MD adım olacak şekilde uygulanmıştır (Şekil 5.2). Şekil 5.2'de 3000 MD adım dengelenmiş (18,0) zigzag TDKNT üzerine, 2000 MD adım boyunca %4 germe uygulanmış ve toplam enerjisinin MD adıma göre değişimi gösterilmiştir.

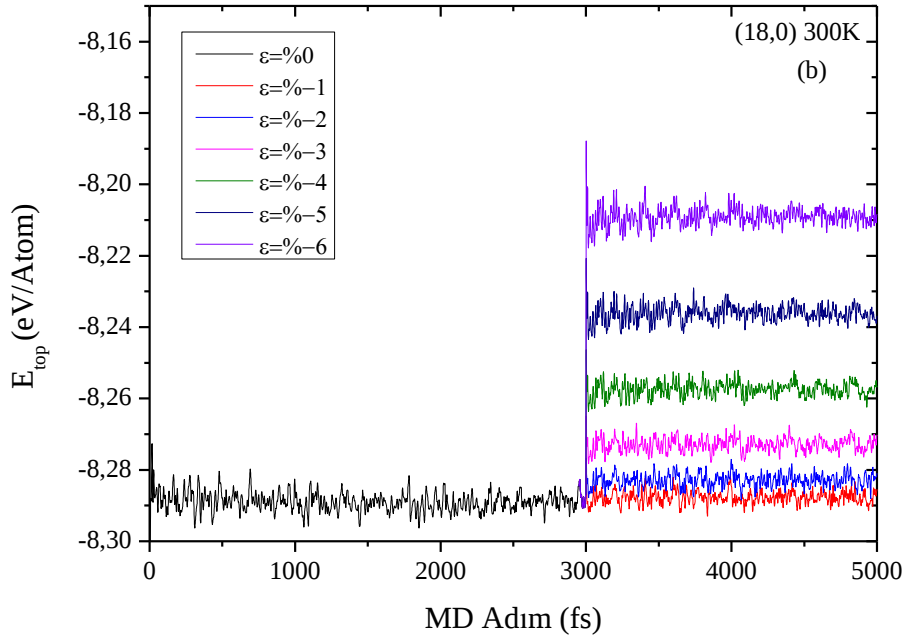
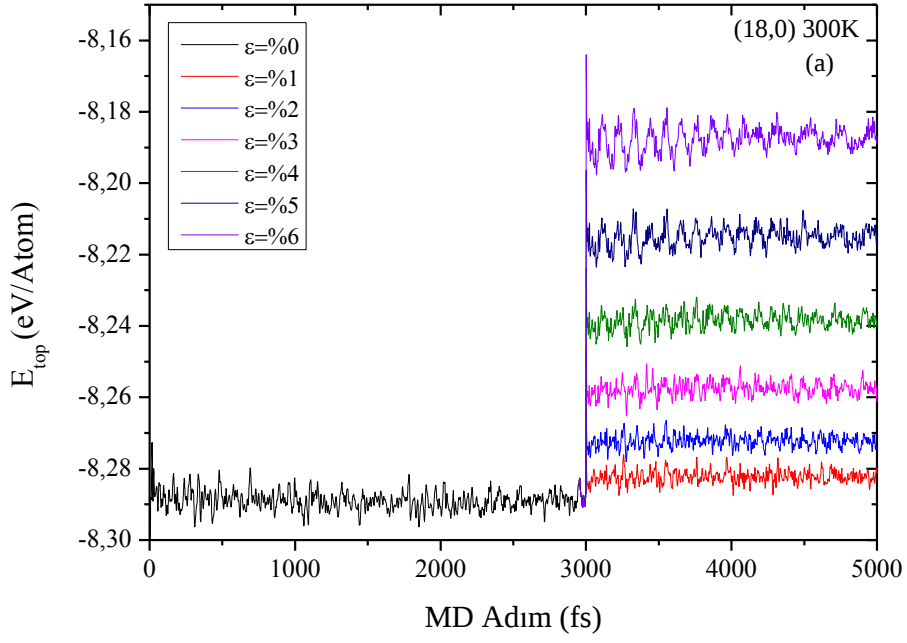
Literatürde (18,0) zigzag TDKNT'ler q tam sayı olmak üzere, $(n - m) = 3q$ olarak gösterilmektedir. Bu gruptaki TDKNT'ler metalik davranış sergilemektedir. (18,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinim değerlerinde toplam enerjilerindeki değişim kontrol edilerek, uygulanan gerinim değerlerinde TDKNT'lerin yapısal kararlılıklarını koruyup korumadıkları kontrol edildi.

(18,0) zigzag TDKNT'nin çalışılan her gerinim değerinde MD adım boyunca toplam enerjilerindeki değişimin ortalaması hesaplanmıştır. Şekil 5.2'de görüldüğü üzere enerjideki değişimin ortalaması lineer fit yardımıyla hesaplanmıştır. Denge durumunda 300K sıcaklık değerinde (18,0) zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisi -8,28895 eV değerindedir.

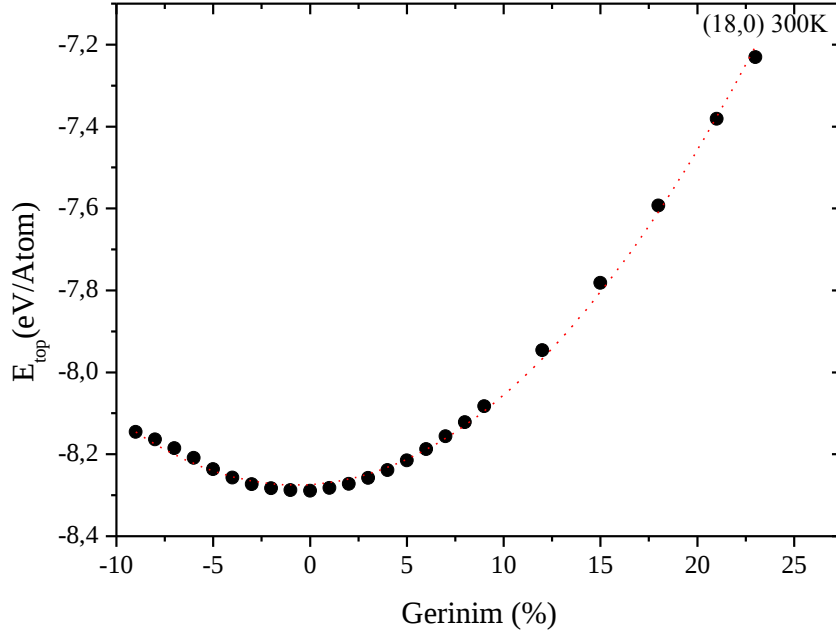


Şekil 5. 2 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %4 germe etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi

Şekil 5.3'de 300K sıcaklıkta (18,0) zigzag TDKNT'nin %6 germe ve %6 sıkıştırma altındaki toplam enerjilerinin MD adıma göre değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.3'deki simülasyon çalışmalarında, sistem ilk olarak 3000 MD adım boyunca dengeye getirilmiş ardından dengeye getirilen sistem üzerine 2000 MD adım boyunca gerinim uygulanmıştır. Uygulanan gerinim değerlerinde yapısal kararlılığın korunduğu görülmektedir.



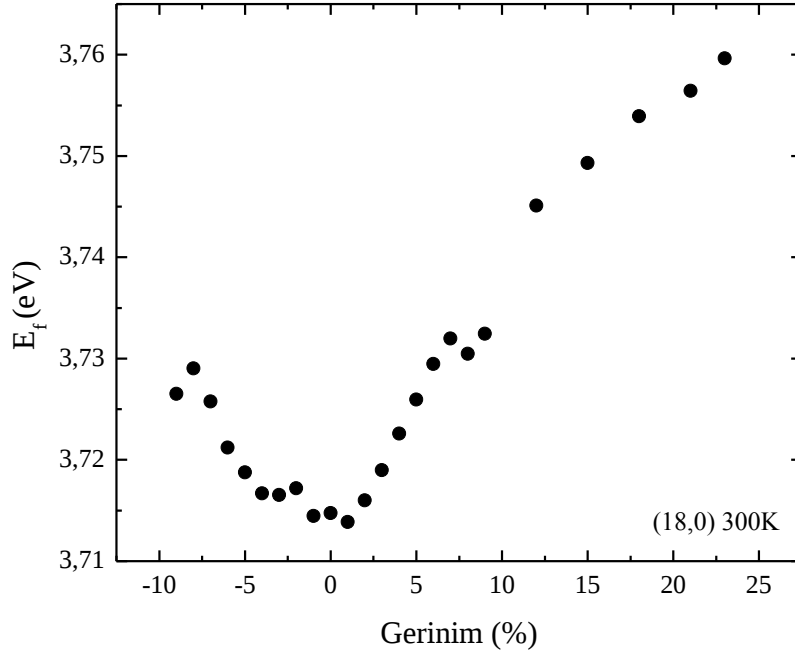
Şekil 5. 3 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi



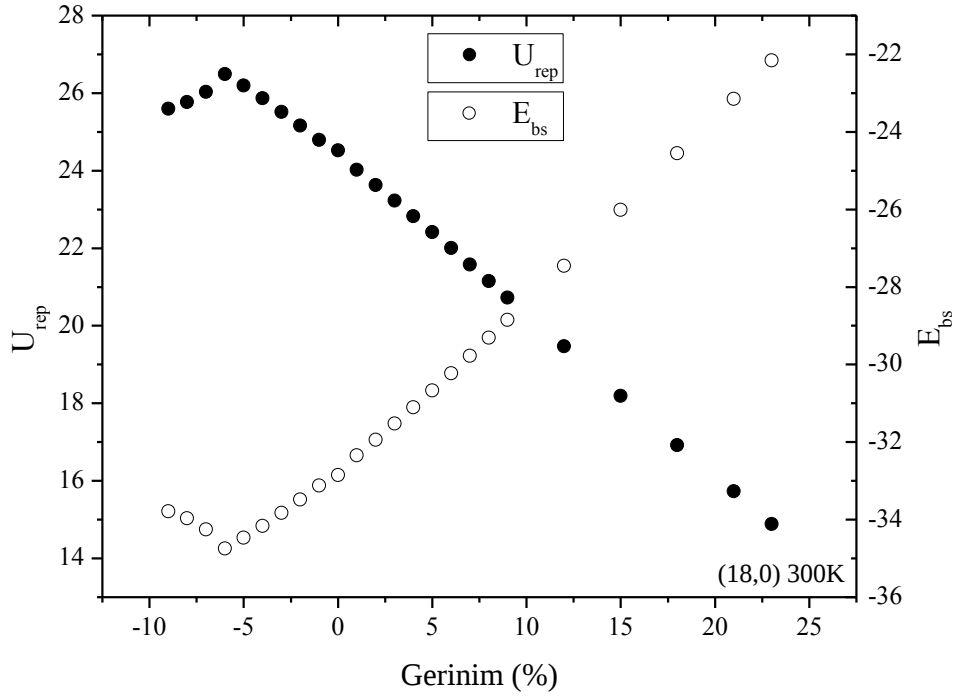
Şekil 5. 4 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 5.4'de (18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.4'deki, "negatif" gerinim değerleri aksenal sıkıştırmayı, "pozitif" gerinim değerleri de aksenal germeyi ifade etmektedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak, atom başına toplam enerji artmakta ve TDKNT elastik davranış sergilemektedir.

Şekil 5.5'de 300K sıcaklıkta (18,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir. Denge durumunda (18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi 3,71467 eV değerindedir. TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisinin arttığı görülmektedir. Şekil 5.6'da (18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde itici potansiyel ve bant yapısı enerjisinin gerinime göre değişimi gösterilmiştir. İtici potansiyel gerinime bağlı olarak azalırken, bant yapısı enerjisi gerinime bağlı olarak artmaktadır.

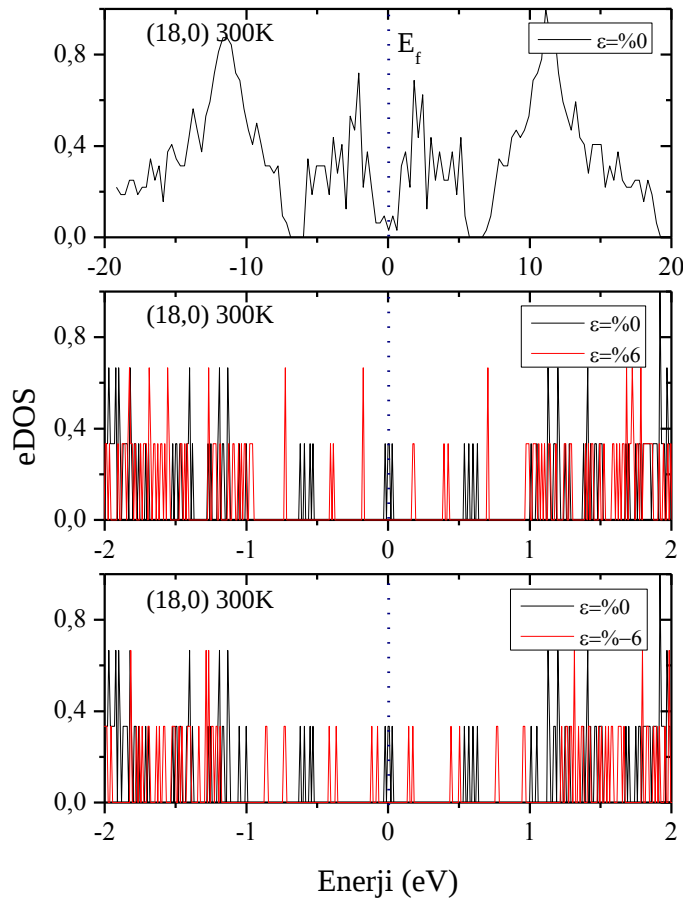


Şekil 5. 5 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi



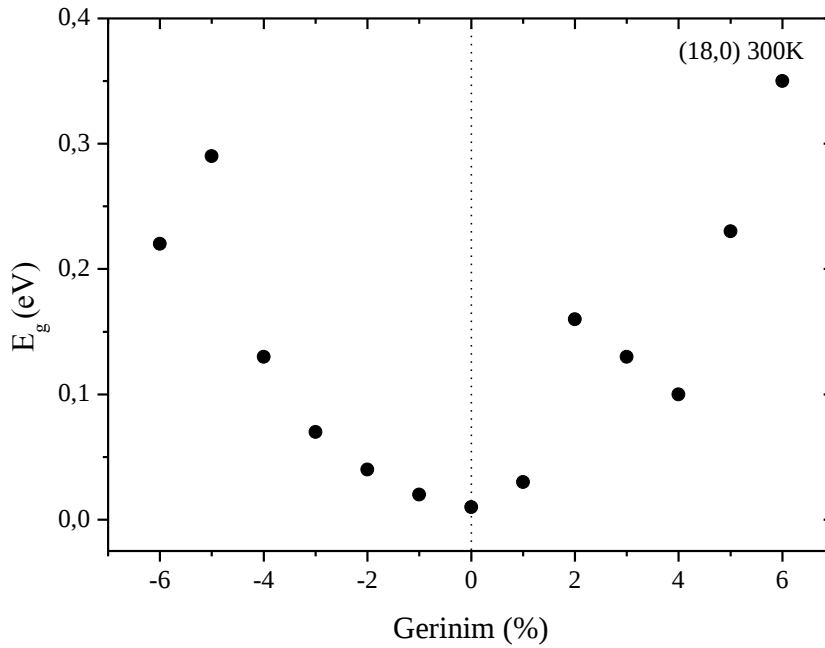
Şekil 5. 6 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi

(18,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak elektronik durum yoğunluğu (*eDOS*) grafikleri çizilmiş ve Şekil 5.7'de denge ($\varepsilon=0$) durumundaki (18,0) zigzag TDKNT'nin %6 germe ve %6 sıkıştırma durumundaki *eDOS* grafikleri gösterilmiştir. Şekil 5.7'deki kesikli çizgiler Fermi enerjisini (E_f) göstermektedir. Şekilde Fermi enerji seviyesi sıfır noktasına getirilerek grafikler çizilmiştir. (18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu grafiklerinden her bir gerinim değerinde TDKNT'nin enerji bant aralığı (E_g) değerleri hesaplanmıştır.



Şekil 5. 7 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri

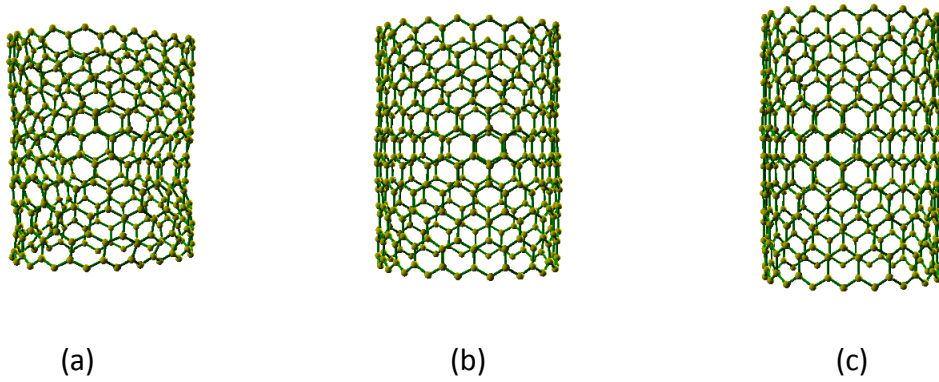
Şekil 5.8’de (18,0) zigzag TDKNT’nin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığının değişimi gösterilmiştir. $(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT’nin $eDOS - Enerji (eV)$ grafiği incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı (E_g) 0,01 eV değerindedir. Denge durumunda (18,0) zigzag TDKNT metalik bir davranış göstermektedir. Uygulanan %6 germe ve %6 sıkıştırma gerinimlerine bağlı olarak enerji bant aralığının arttığı görülmüştür. (18,0) zigzag TDKNT’nin %6 germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,35 eV ve %6 sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığı 0,22 eV olarak hesaplanmıştır. (18,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak metal – yarı iletken geçişi yapmaktadır. Çalışmada bulunan bu sonuçlar, literatürde yapılmış çalışmalarla [2-8, 62] uyumluluk içerisindedir.



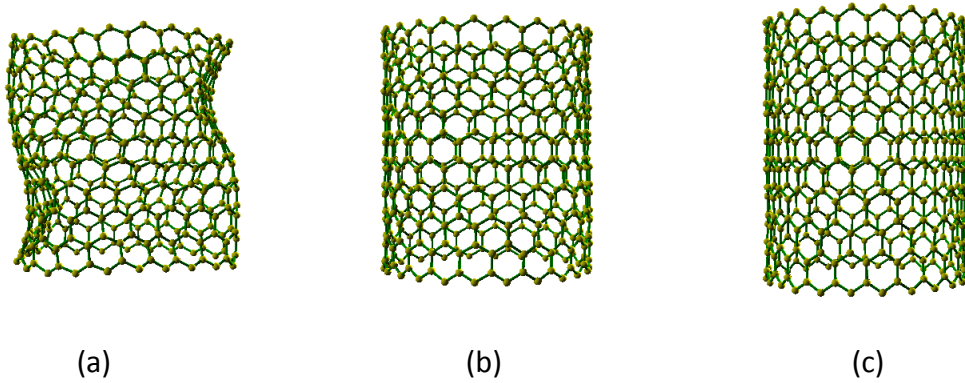
Şekil 5. 8 (18,0) Zigzag TDKNT’nin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim

5.1.1.2 (19,0) - (22,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı

Bu çalışmada, $(n - m) = 3q + 1$ grubu TDKNT'lerden (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler simüle edilerek elektronik özellikleri incelenmiştir. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki TDKNT'ler yarı iletken davranış sergilemektedir. Germe – sıkıştırma çalışmaları 300K sıcaklığında incelendi. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler üzerine %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9'a kadar da sıkıştırma işlemi TDKNT'lerin yapısal kararlılığı bozulana kadar uygulandı. Şekil 5.9-5.10'da sırasıyla (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin denge, %8 germe ve %8 sıkıştırma değerleri için simülasyon görüntüleri gösterilmiştir.



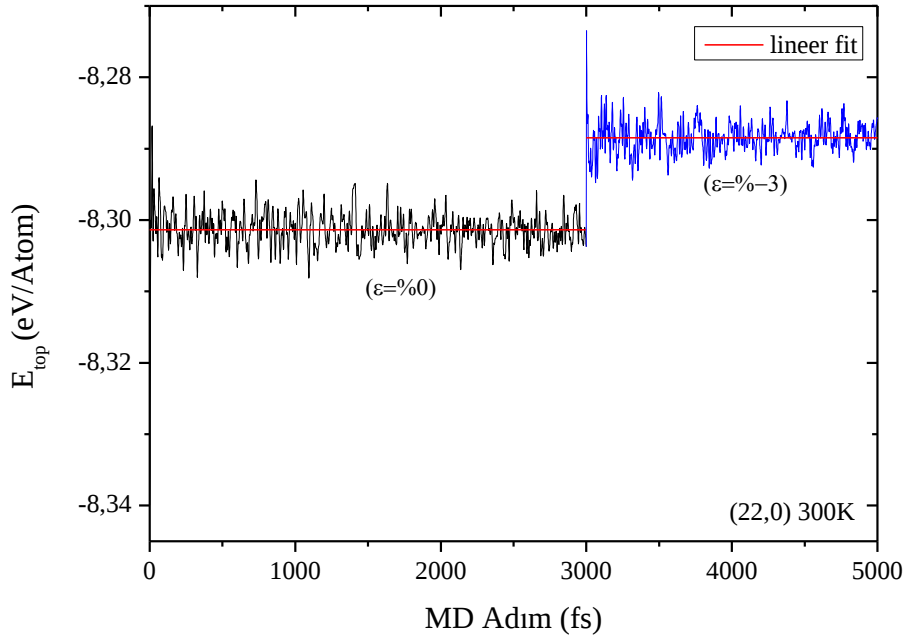
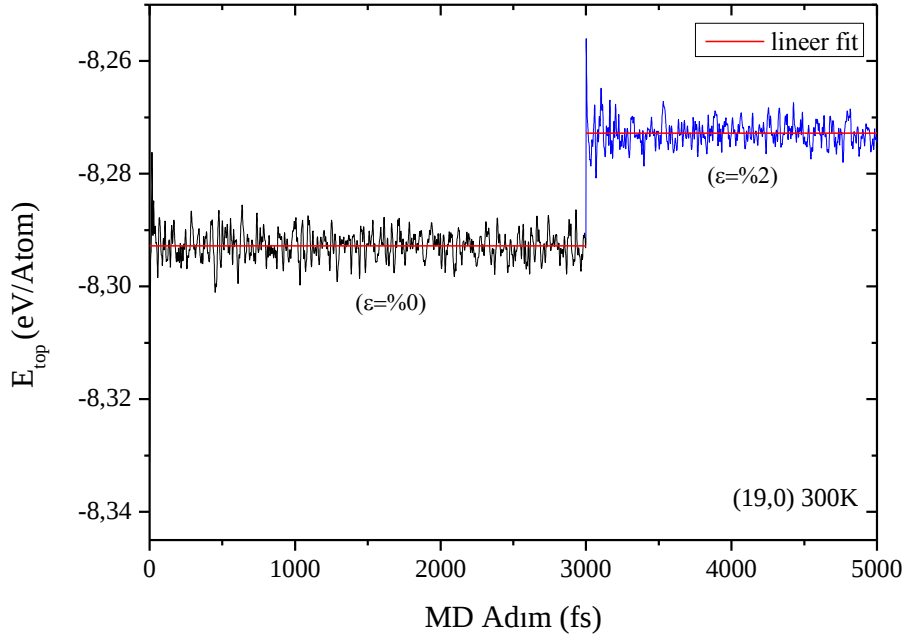
Şekil 5. 9 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri



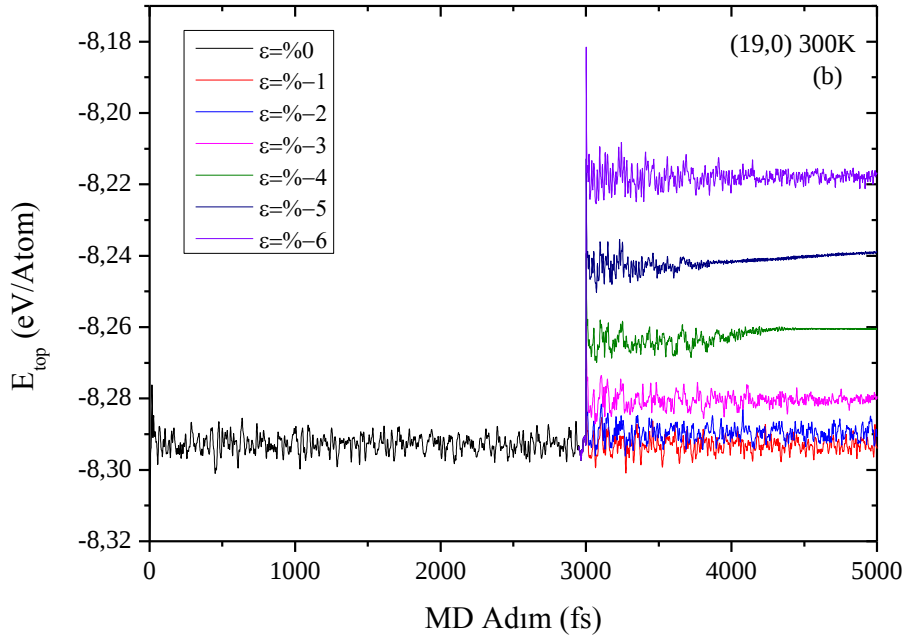
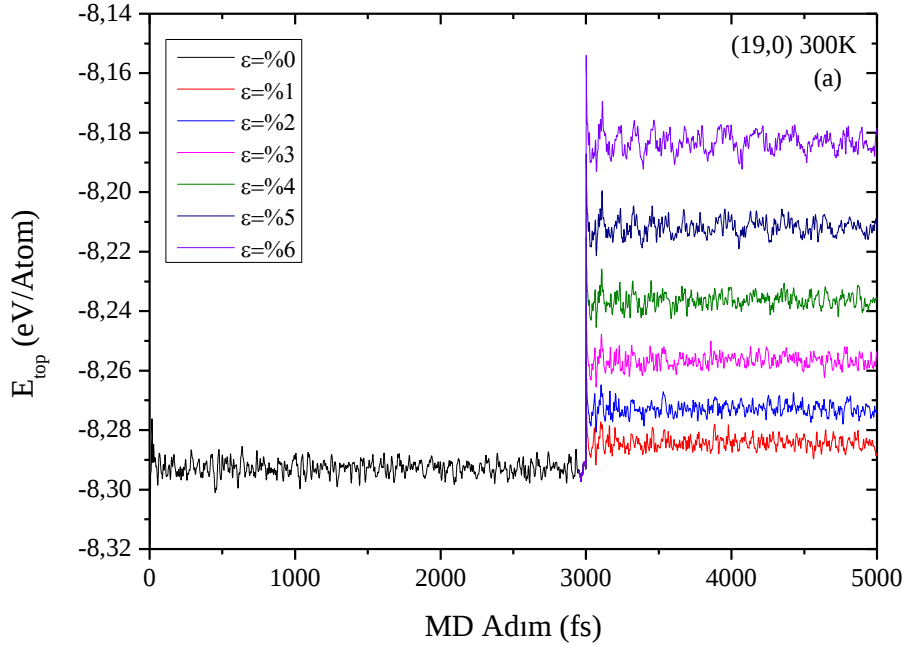
Şekil 5. 10 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin uygulanan gerinim deęerlerinde toplam enerjilerindeki deęişim kontrol edilerek, uygulanan gerinim deęerlerinde TDKNT'lerin yapısal kararlılıklarını koruyup korumadıkları kontrol edildi (Şekil 5.11). Denge durumunda 300K sıcaklık deęerinde (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ortalama toplam enerjisi sırasıyla -8,29277 eV ve -8,30136 eV deęerindedir.

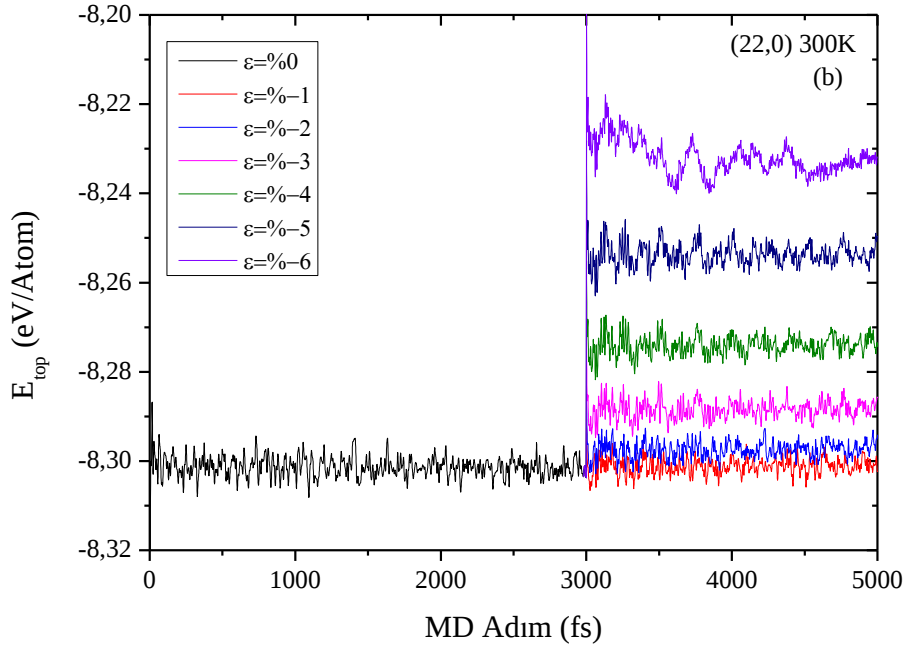
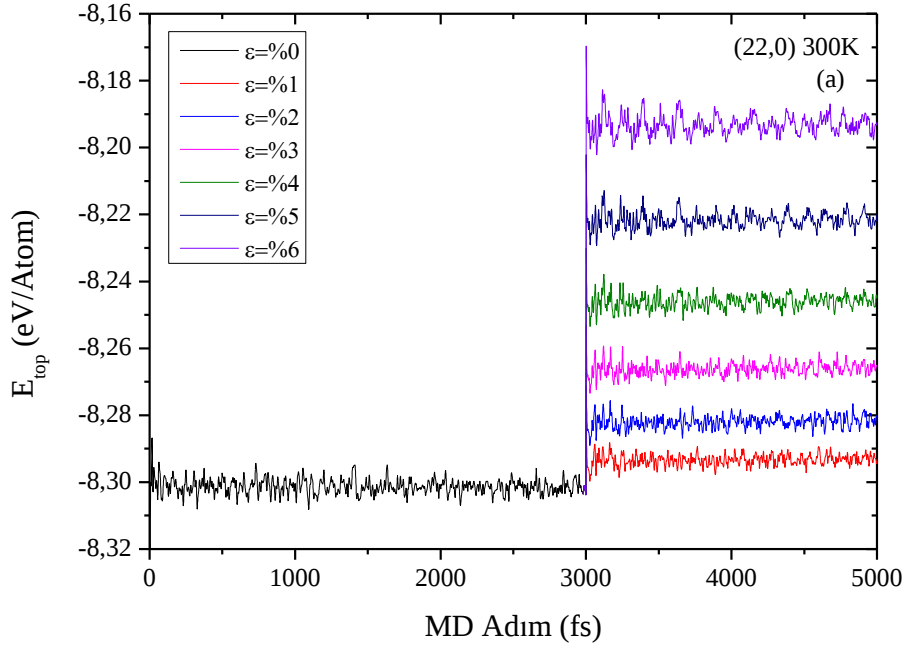
Şekil 5.12-5.13'de 300K sıcaklıkta sırasıyla (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin %6 germe ve %6 sıkıştırma altındaki toplam enerjilerinin MD adıma göre deęişimi gösterilmiştir.



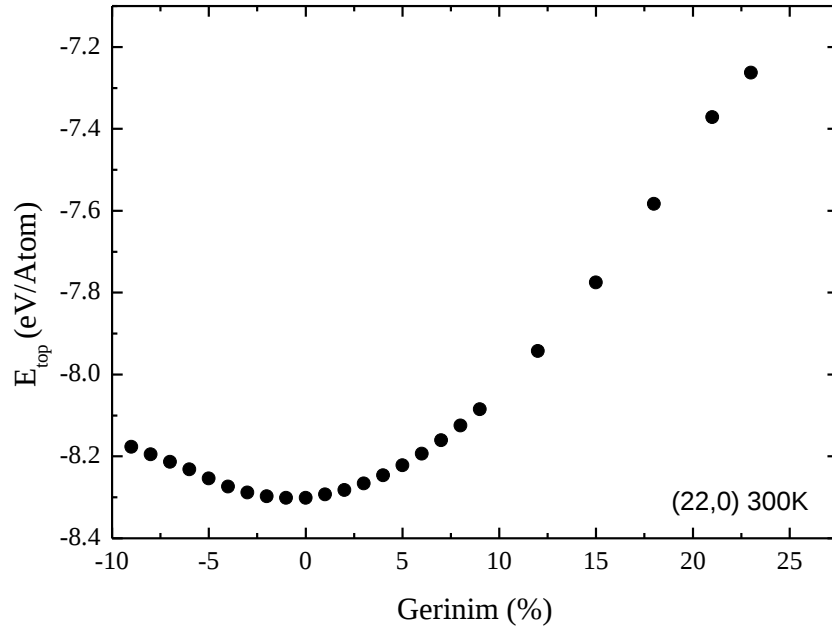
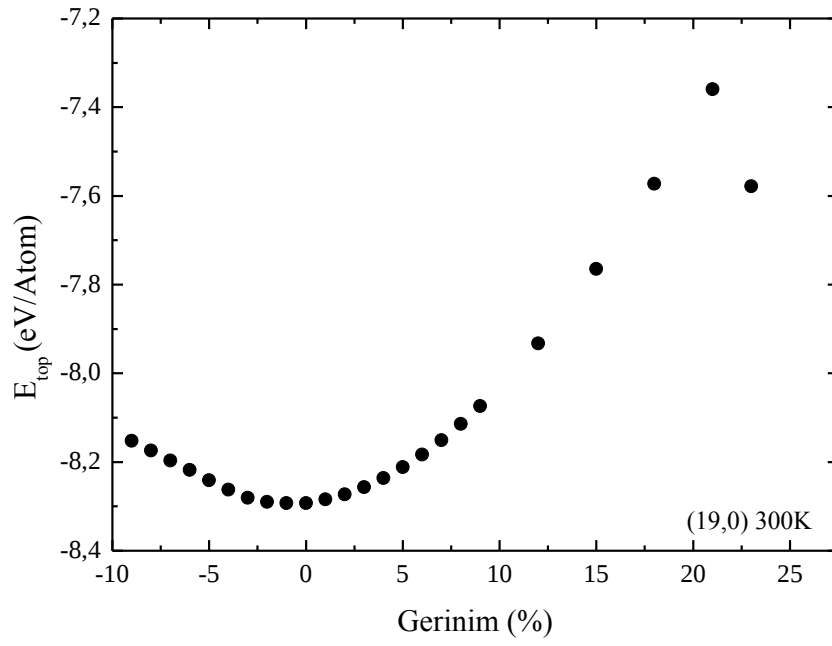
Şekil 5. 11 (19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta sırasıyla %2 ve %-3 gerinim etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi



Şekil 5. 12 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi



Şekil 5. 13 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi

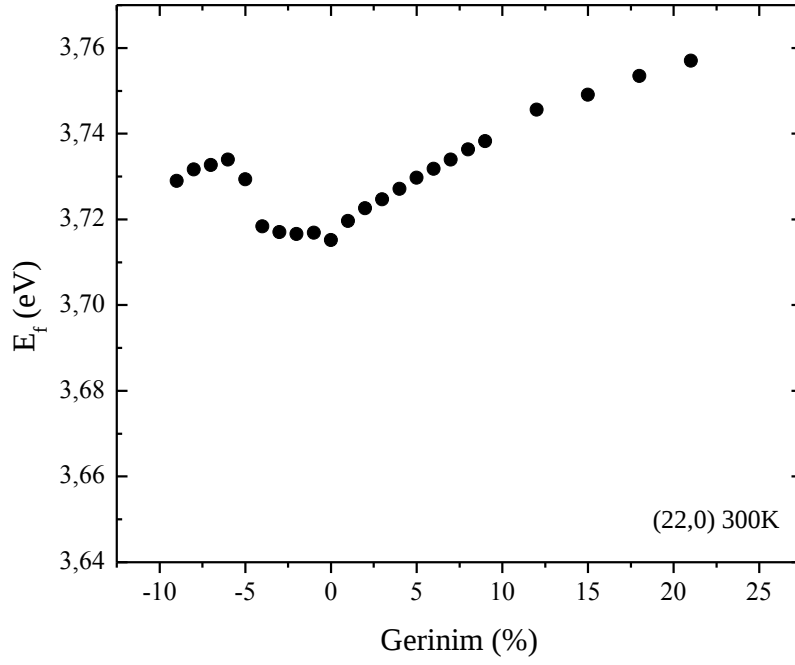
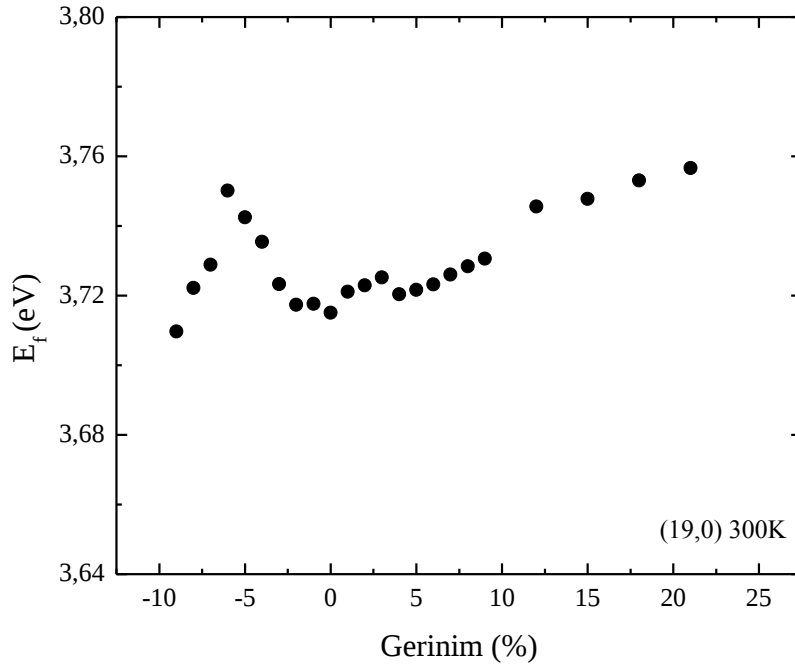


Şekil 5. 14 (19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

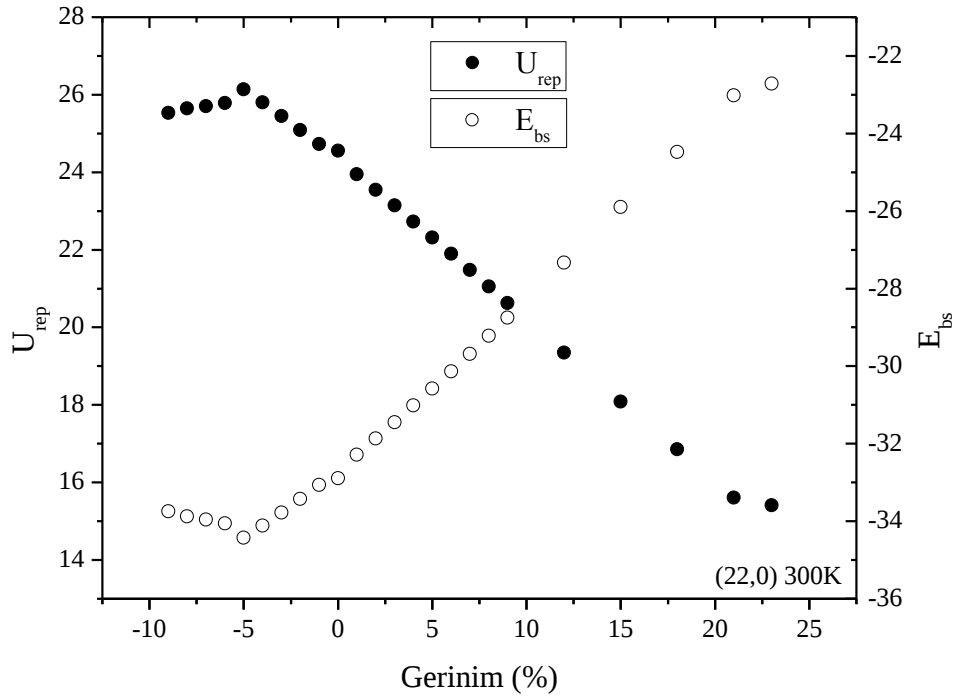
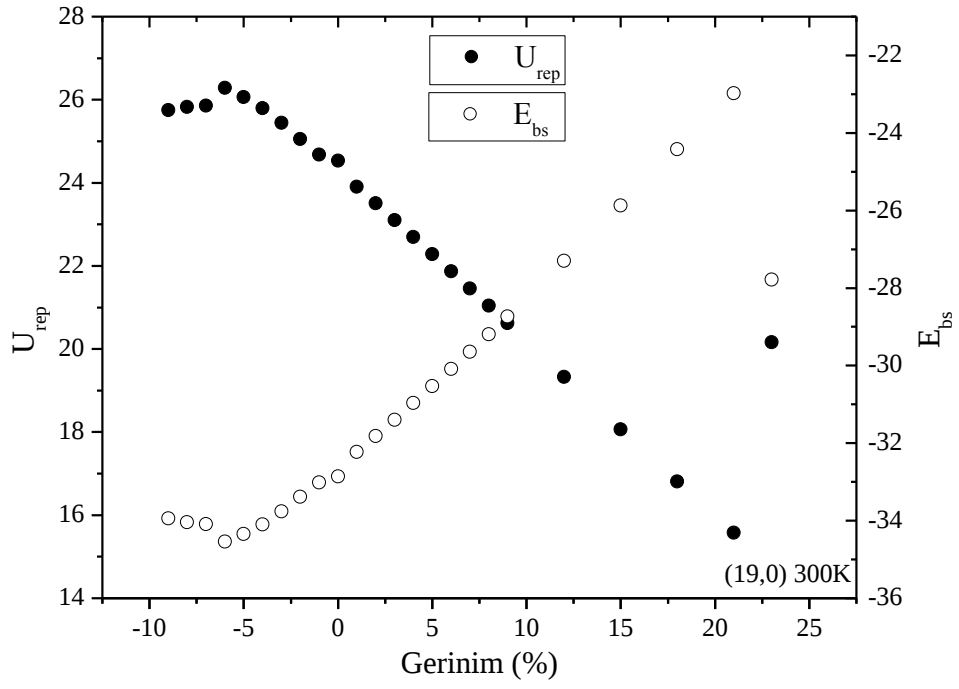
Şekil 5.14’de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin 300K sıcaklık değerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.14’deki, “negatif” gerinim değerleri aksel sıkıştırmayı, “pozitif” gerinim değerleri de aksel germeyi ifade etmektedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak, atom başına toplam enerjinin arttığı görülmektedir. Şekil 5.14’de (19,0) zigzag TDKNT’nin atom başına toplam enerji grafiğinde %23 germe değerinde yapısal kararlılık bozulmaktadır. Bu kısım Bölüm 5.4’de ayrıntılı bir şekilde incelenecektir.

Şekil 5.15’de 300K sıcaklıkta (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir. Denge durumunda (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin Fermi enerjisi sırasıyla 3,71504 eV ve 3,71520 eV değerindedir. Şekil 5.15’de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’ler üzerine uygulanan germeye bağlı olarak Fermi enerjisinin arttığı, sıkıştırmaya bağlı olarak da Fermi enerjisinin %5 - %6 sıkıştırmadan sonra azalmaya başladığı görülmektedir.

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin 300K sıcaklıkta itici potansiyel ve bant yapısı enerjisinin gerinime göre değişimi Şekil 5.16’da görülmektedir.

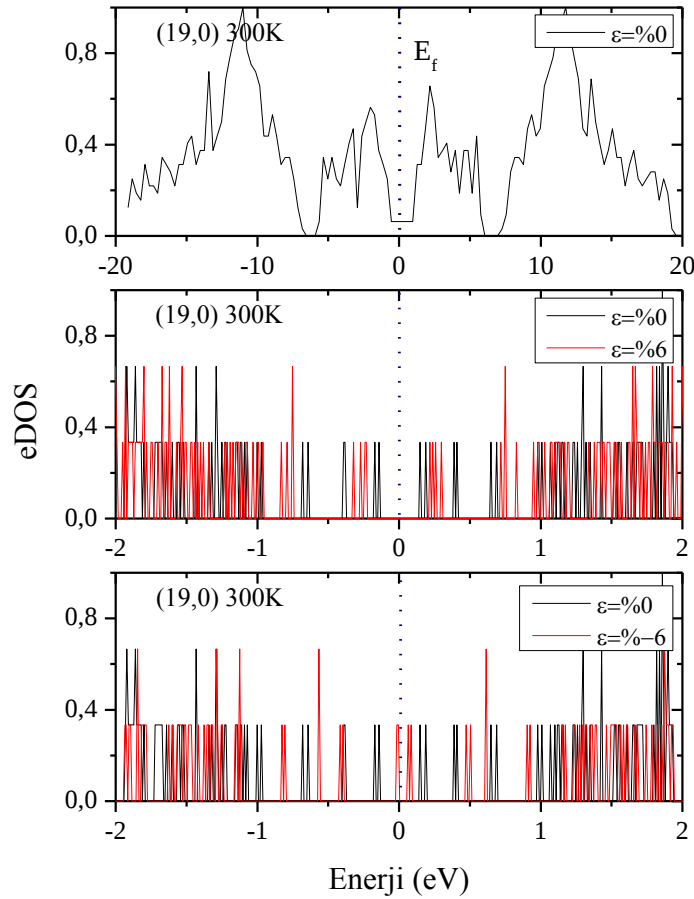


Şekil 5. 15 (19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi

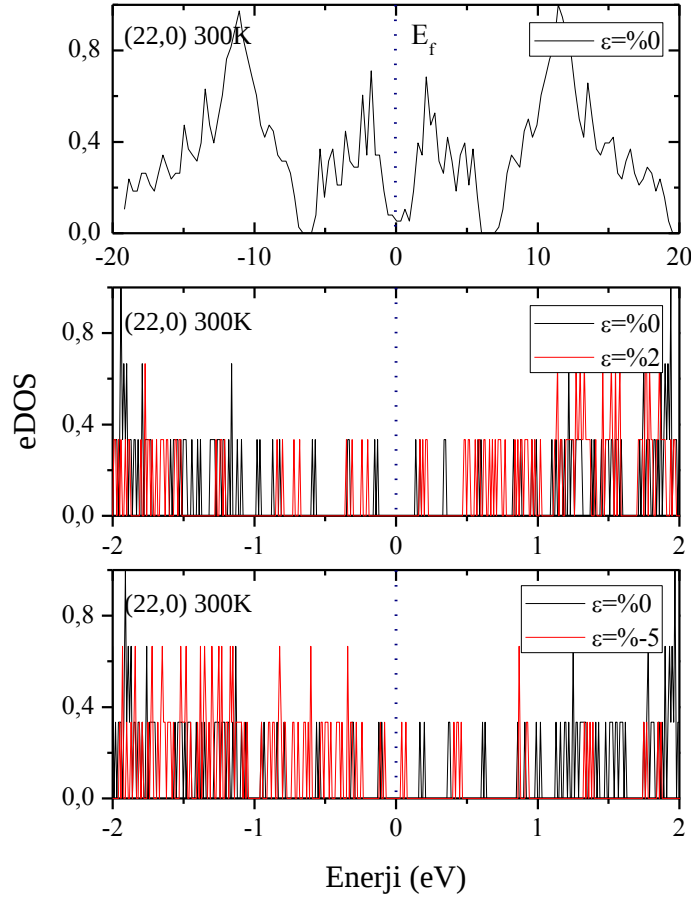


Şekil 5. 16 (19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak *eDOS* grafikleri çizilmiştir (Şekil 5.17-5.18). Şekil 5.17'de 300K sıcaklık değerinde denge ($\varepsilon=0\%$) durumundaki (19,0) zigzag TDKNT'nin %6 germe ve %6 sıkıştırma durumundaki *eDOS* – *Enerji* (eV) grafikleri gösterilmiştir. Şekildeki kesikli çizgi Fermi enerji seviyesi göstermektedir. Fermi enerji seviyesi sıfır noktasına getirilerek grafikler çizilmiştir. (19,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarında *eDOS* – *Enerji* (eV) grafiklerinden her bir gerinim değerinde (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı (E_g) değerleri hesaplanmıştır.



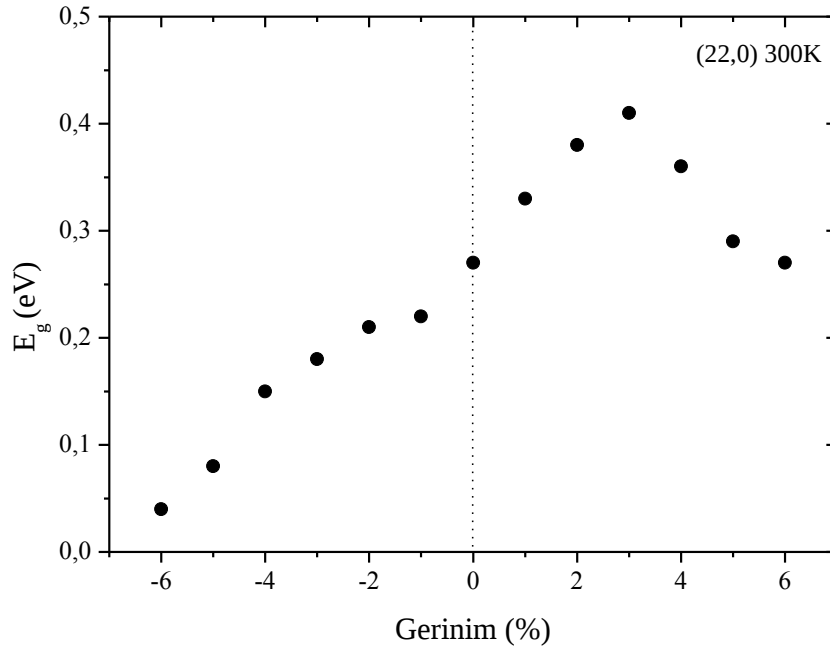
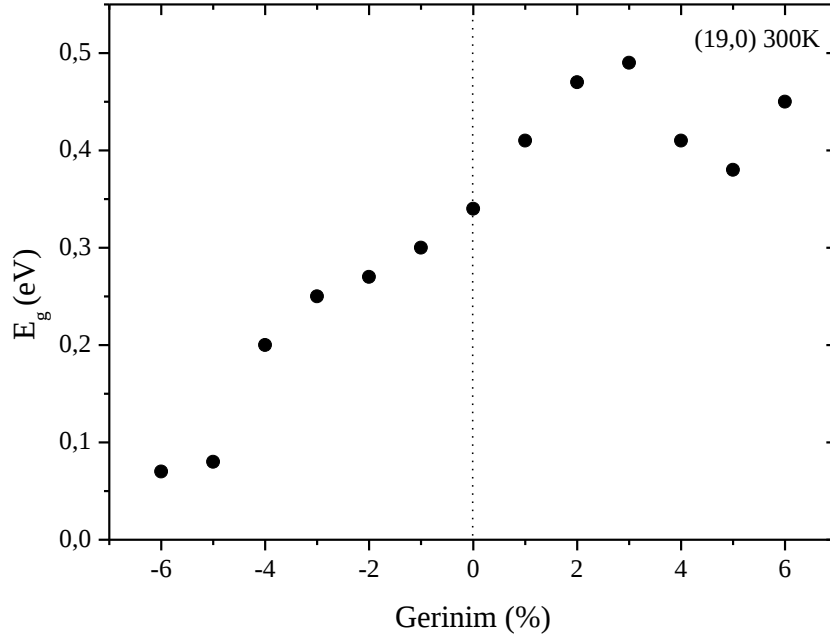
Şekil 5. 17 (19,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri



Şekil 5. 18 (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %2 germe %5 sıkıştırma etkisinde eDOS grafikleri

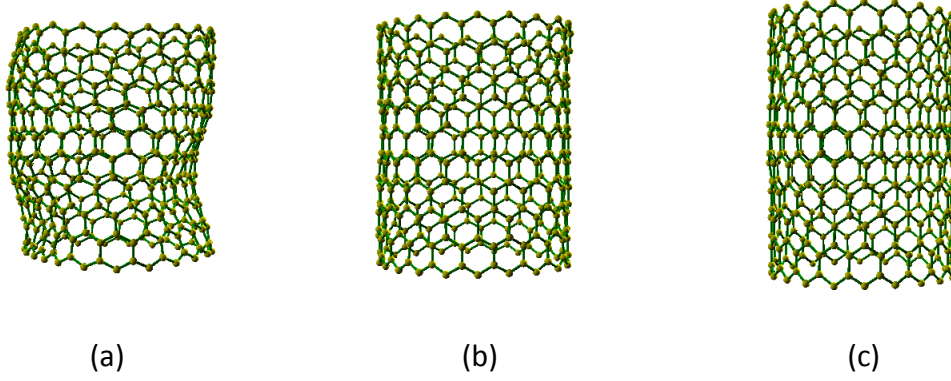
Benzer şekilde, Şekil 5.18'de (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde %2 germe, %5 sıkıştırma etkisindeki $eDOS - Enerji (eV)$ grafikleri çizilmiştir. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerindeki $eDOS - Enerji (eV)$ grafikleri incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralıkları (E_g) sırasıyla 0,34 eV ve 0,27 eV değerlerindedir. $\varepsilon = 0$ denge durumunda her iki zigzag TDKNT yarı iletken bir davranış göstermektedir. Şekil 5.17-5.18'den de görüldüğü üzere (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralıkları değişmektedir.

Uygulanan gerinime bağılı olarak, germe ile enerji bant aralığının arttığı, sıkıştırma gerinimine bağılı olarak da enerji bant aralığının azaldığı görülmüştür (Şekil 5.19). $\varepsilon = 0$ denge durumunda (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı 0,34 eV değerinde iken, $\varepsilon = \%3$ değerinde 0,49 eV, $\varepsilon = \% - 6$ değerinde ise 0,07 eV olarak hesaplanmıştır. Benzer şekilde, (22,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = 0$ denge durumunda enerji bant aralığı değeri 0,27 eV iken bu değer $\varepsilon = \%3$ 'de 0,41 eV, $\varepsilon = \% - 6$ 'da 0,04 eV olarak hesaplanmıştır. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan gerinime bağılı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır. Çalışmada bulunan bu sonuçlar, literatürde $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki TDKNT'ler üzerine yapılmış çalışmalarla uyumluluk içerisindedir [2-8, 62].



Şekil 5. 19 (19,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim

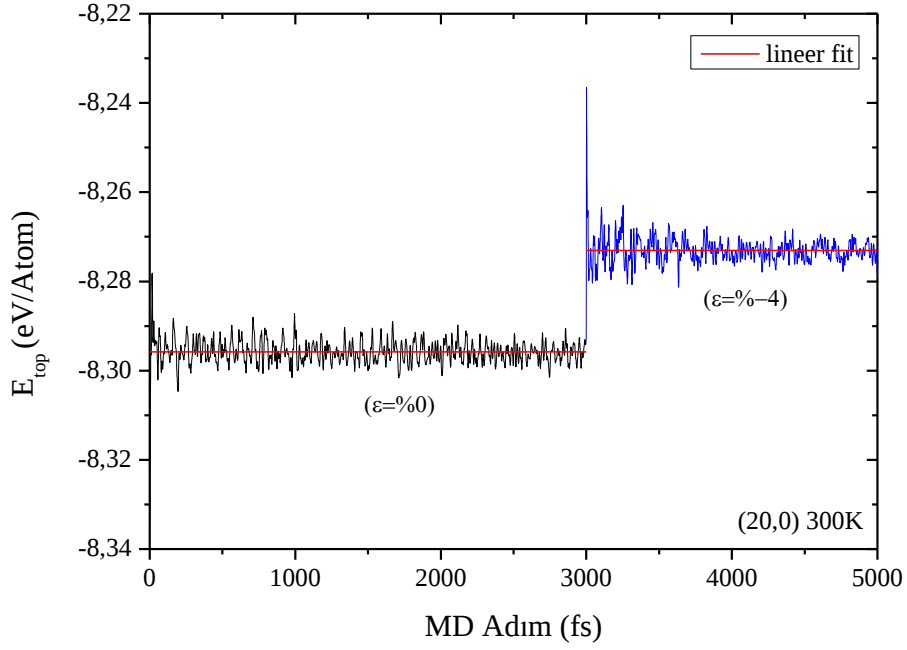
5.1.1.3 (20,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı



Şekil 5. 20 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) %8 sıkıştırma, (b) denge ve (c) %8 germe değerindeki simülasyon görüntüleri

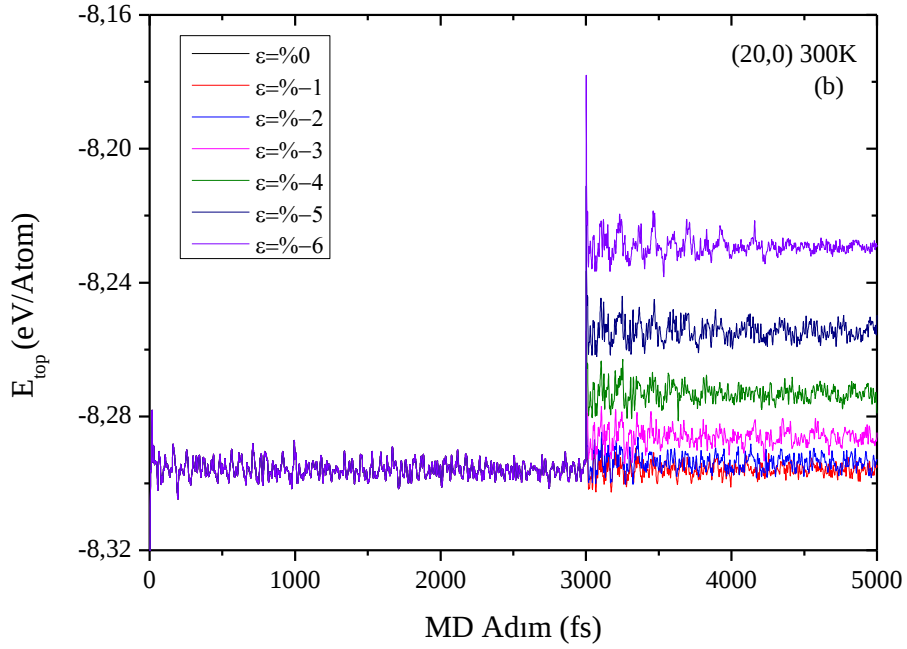
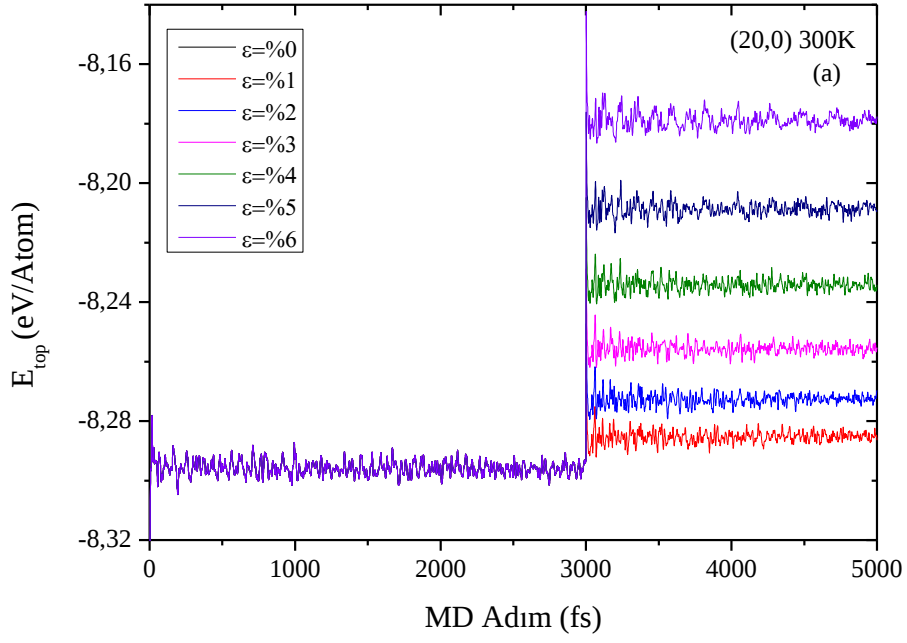
$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT'nin germe – sıkıştırma çalışmaları 300K sıcaklığında üzerine farklı germe (%1'den %23'e kadar germe) ve sıkıştırma (%1'den %9'a kadar) işlemi uygulanarak incelenmiştir. (20,0) zigzag TDKNT'nin denge, %8 germe ve %8 sıkıştırma değerleri için simülasyon görüntüleri Şekil 5.20'de gösterilmiştir.

(20,0) zigzag TDKNT'nin çalışılan her gerininim değerinde MD adım boyunca toplam enerjilerindeki değişimin ortalaması hesaplanmıştır. Şekil 5.21'de görüldüğü üzere enerjideki değişimin ortalaması lineer fit yardımıyla hesaplanmıştır. Denge durumunda 300K sıcaklık değerinde (20,0) zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisi -8,29582 eV değerindedir. Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapılmıştır. Uygulanan gerininim değerleri ise denge durumundaki TDKNT üzerine 2000 MD adım olacak şekilde uygulanmıştır (Şekil 5.22).

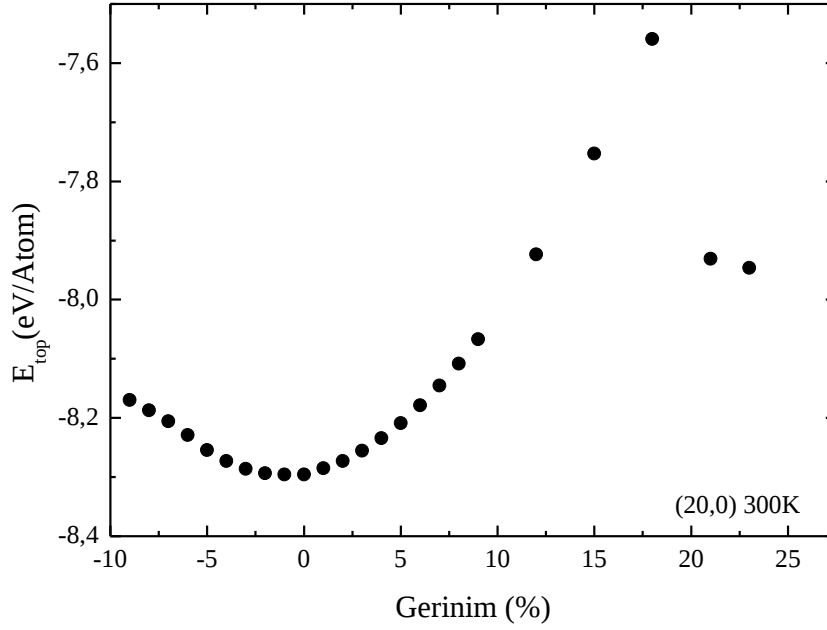


Şekil 5. 21 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %4 sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi

Şekil 5.23'de (20,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Uygulanan gerinime bağlı olarak, atom başına toplam enerji artmaktadır. Şekil 5.23'de (20,0) zigzag TDKNT'nin atom başına toplam enerji grafiğinde %21 ve %23 germe değerinde yapısal kararlılık bozulmaktadır. Yapısal kararlılığın bozulduğu durumlar Bölüm 5.4'de ayrıntılı bir şekilde incelenecektir.



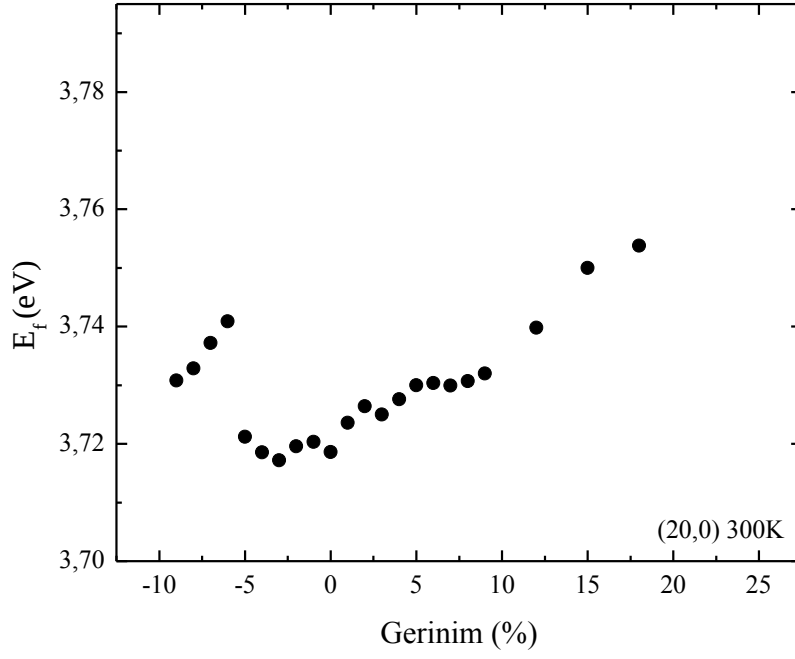
Şekil 5. 22 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta (a) Germe (b) Sıkıştırma etkisi altında toplam enerjisinin zamana göre değişimi



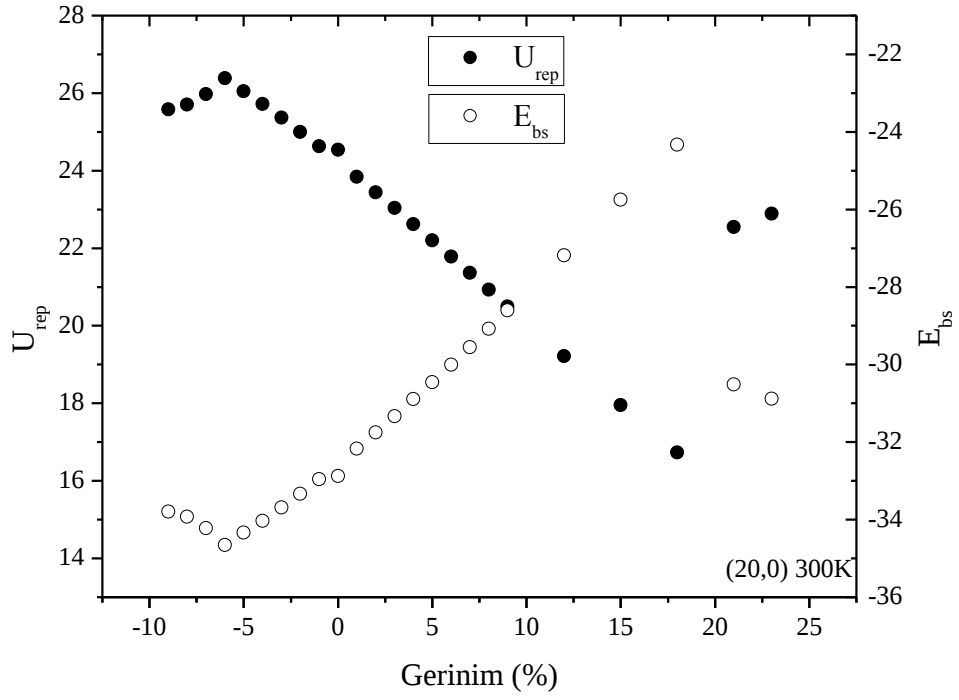
Şekil 5. 23 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 5.24'de 300K sıcaklıkta (20,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir. Denge durumunda (20,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi 3,71855 eV değerindedir. (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan germeye bağlı olarak Fermi enerjisinin arttığı, sıkıştırmaya bağlı olarak da %6 sıkıştırmadan sonra azaldığı görülmektedir. 300K sıcaklıkta, (20,0) zigzag TDKNT'nin itici potansiyel ve bant yapısı enerjisinin gerinime göre değişimi Şekil 5.25'de gösterilmiştir.

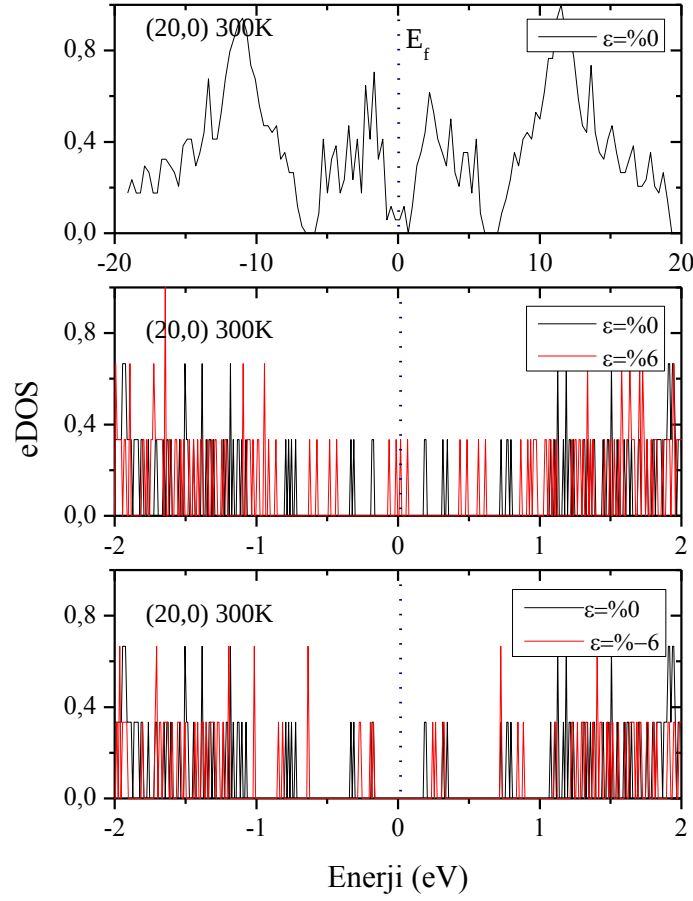
(20,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak elektronik durum yoğunluğu grafikleri çizilmiş ve Şekil 5.26'da denge ($\epsilon=0$) durumundaki (20,0) zigzag TDKNT'nin %6 germe ve %6 sıkıştırma durumundaki *eDOS* grafikleri gösterilmiştir. (20,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu grafiklerinden her bir gerinim değerinde TDKNT'nin enerji bant aralığı (E_g) değerleri hesaplanmıştır.



Şekil 5. 24 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime göre değişimi

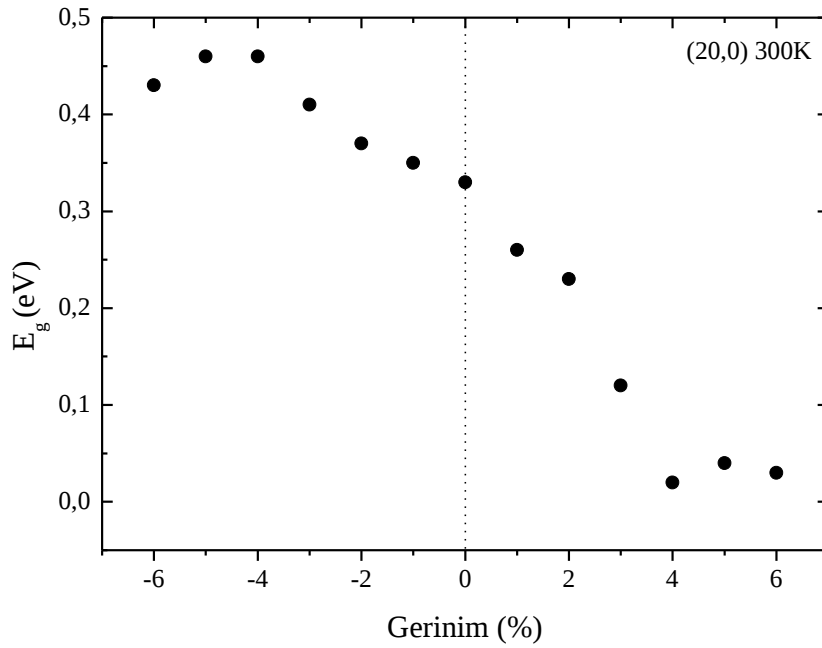


Şekil 5. 25 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta U_{rep} , E_{bs} 'nin gerinime göre değişimi



Şekil 5. 26 (20,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta %6 gerinim etkisinde eDOS grafikleri

$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklığındaki $eDOS - Enerji (eV)$ grafiği incelendiğinde, denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı (E_g) 0,34 eV değerindedir. Denge durumunda (20,0) zigzag TDKNT yarı iletken bir davranış göstermektedir.



Şekil 5. 27 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığındaki değişim

Şekil 5.27'den de görüldüğü üzere (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığı değişmektedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak, sıkıştırma ile enerji bant aralığının arttığı, germe gerinimine bağlı olarak da enerji bant aralığının azaldığı görülmektedir (Şekil 5.27). (20,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumunda 0,34 eV enerji bant aralığına sahipken, bu değer TDKNT üzerine uygulanan pozitif gerinimle ($\varepsilon = \%6$) 0,03 eV, negatif gerinimle ($\varepsilon = \% - 5$) 0,46 eV olarak hesaplanmıştır. (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan germe gerinimine bağlı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır. Çalışmada bulunan bu sonuçlar, literatürde $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki TDKNT'ler üzerine yapılmış çalışmalarla uyumluluk içerisindedir [2-8, 62].

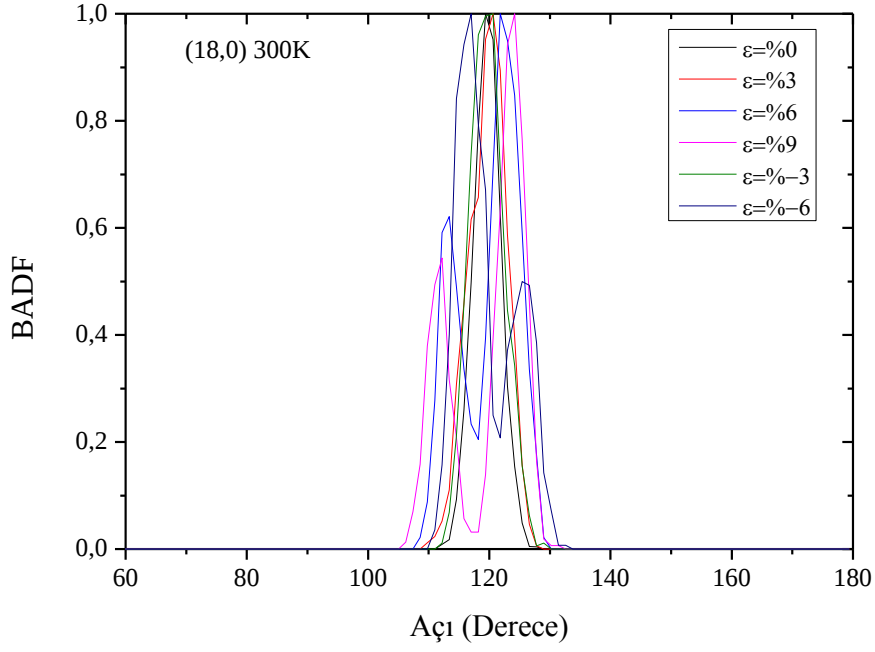
5.1.1.4 Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel Yapısı

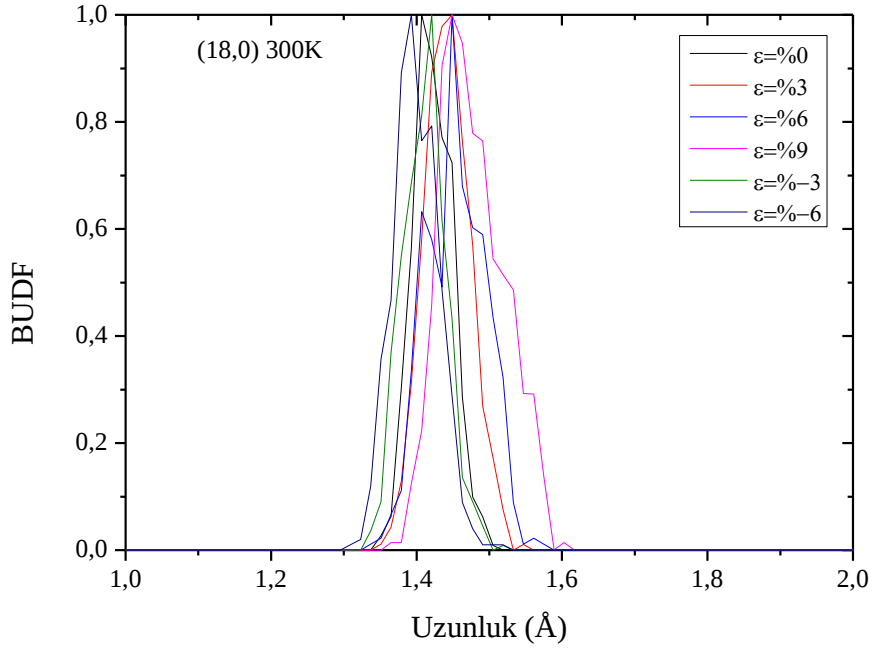
$(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki fiziksel özellikleri (*BADF*, *BUDF*, *RDF* ve *AKS*) incelenmiştir.

Şekil 5.28, 5.32, 5.36 ve 5.40'de sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – açısı dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi gösterilmiştir. 300K sıcaklıkta denge durumunda ($\varepsilon = 0$) (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'ler için altıgen örgüdeki bağ açısı dağılım fonksiyonu 119.4° açıda keskin bir tepe noktası verdi. %6 germe etkisi altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin *BADF*'leri sırasıyla, 121.8° , 121.8° , 123° ve 124.2° değerlerinde tepe noktası verirken, %6 sıkıştırma etkisi altında 117° , 117° , 117° ve 118.2° değerlerinde tepe noktası meydana gelmektedir. Şekil 5.29, 5.33, 5.37 ve 5.41'de sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi gösterilmiştir. Denge durumunda 300K sıcaklıkta, altıgen örgüdeki karbon atomları arasındaki bağ – uzunluğu sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin için $1.421\text{\AA}$ 'da keskin bir tepe verdi. %9 germe etkisi altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin *BUDF*'leri sırasıyla, 1.449, 1.449, 1.435 ve $1.449\text{\AA}$ 'da değerlerine yükselirken, %6 sıkıştırma etkisi altında 1.393, 1.407, 1.407 ve $1.407\text{\AA}$ 'da değerlerinde tepe noktasının değerinde azalma meydana gelmektedir. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin radyal dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi sırasıyla Şekil 5.30, 5.34, 5.38 ve 5.42'de gösterilmiştir. Germe – sıkıştırma etkisine bağlı olarak birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri değişmektedir. (18,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = 0$ denge durumunda birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri sırasıyla 1.42, 2.44 ve $2.78\text{\AA}$ olarak hesaplandı. $\varepsilon = \%3$ germe etkisi altında birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri sırasıyla 1.46, 2.52 ve $2.87\text{\AA}$, $\varepsilon = \% - 3$ sıkıştırma etkisi altında bu değerler sırasıyla 1.38, 2.48 ve $2.81\text{\AA}$ olarak hesaplandı. (19,0) zigzag TDKNT'nin denge durumunda birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri sırasıyla 1.42, 2.44 ve $2.78\text{\AA}$ mesafelerinde iken bu değerler $\varepsilon = \%3$ germe ile 1.46, 2.52 ve $2.86\text{\AA}$, $\varepsilon = -6$ sıkıştırma ile 1.38, 2.34 ve $2.82\text{\AA}$ olarak ölçülmüştür. Benzer şekilde, (20,0) zigzag TDKNT'nin ölçülen birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri sırasıyla 1.47, 2.49 ve

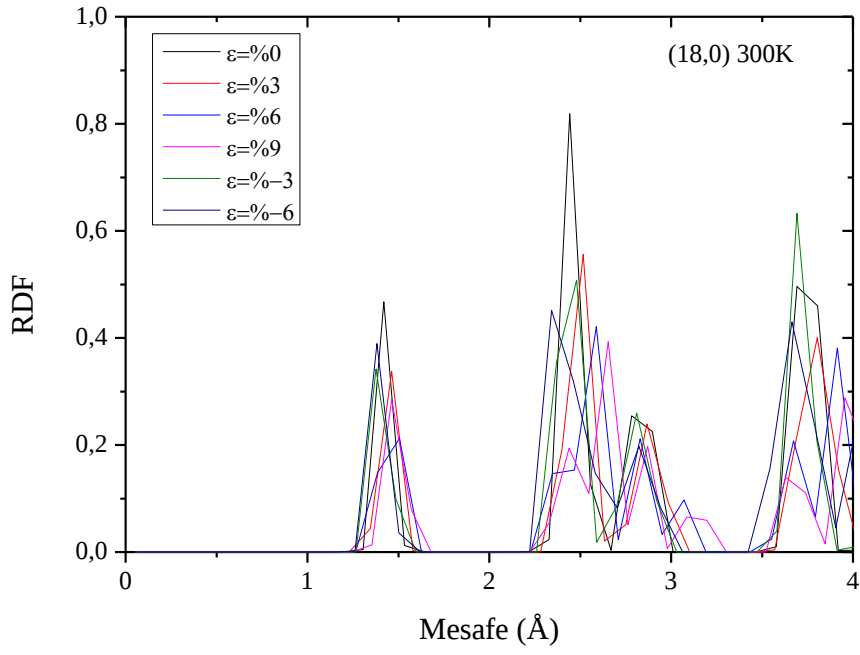
2.88Å değerlerindedir. $\varepsilon = \%6$ germe etkisi altında birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri sırasıyla 1.51, 2.59 ve 2.83Å, $\varepsilon = \% - 6$ sıkıştırma etkisi altında bu mesafeler 1.38, 2.34 ve 2.82Å olarak hesaplandı. (22,0) zigzag TDKNT'nin denge durumunda 1.49, 2.49 ve 2.77Å olan birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri, $\varepsilon = \%7$ germe etkisinde 1.44, 2.53 ve 2.80Å, $\varepsilon = \% - 7$ sıkıştırma etkisinde ise 1.40, 2.46 ve 2.86Å olarak hesaplandı. AKS, altıgen örgüdeki her karbon atomunun komşu atomlarla kaç bağ yaptığını gösterir. Şekil 5.31, 5.35, 5.39 ve 5.43'de sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin denge, $\%3 - \%6 - \%9$ germe, $\%3 - \%6$ sıkıştırma gerinimlerinde atomik koordinasyon sayısının gerinime bağlı değişimi gösterilmiştir. 300K sıcaklıkta, germe – sıkıştırma etkisi altında şekillerde atomların komşu atomlarla 3 bağ yaptığı görülmektedir.



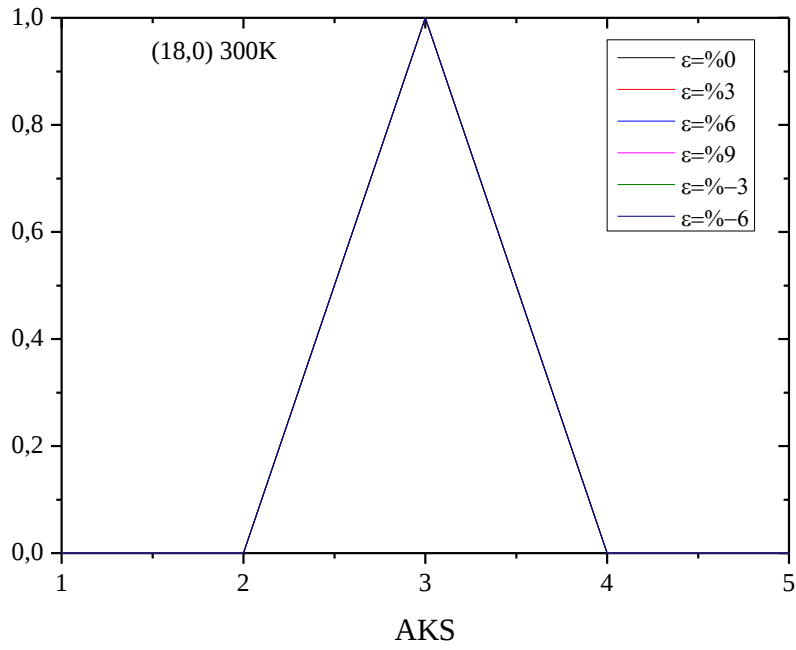
Şekil 5. 28 (18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



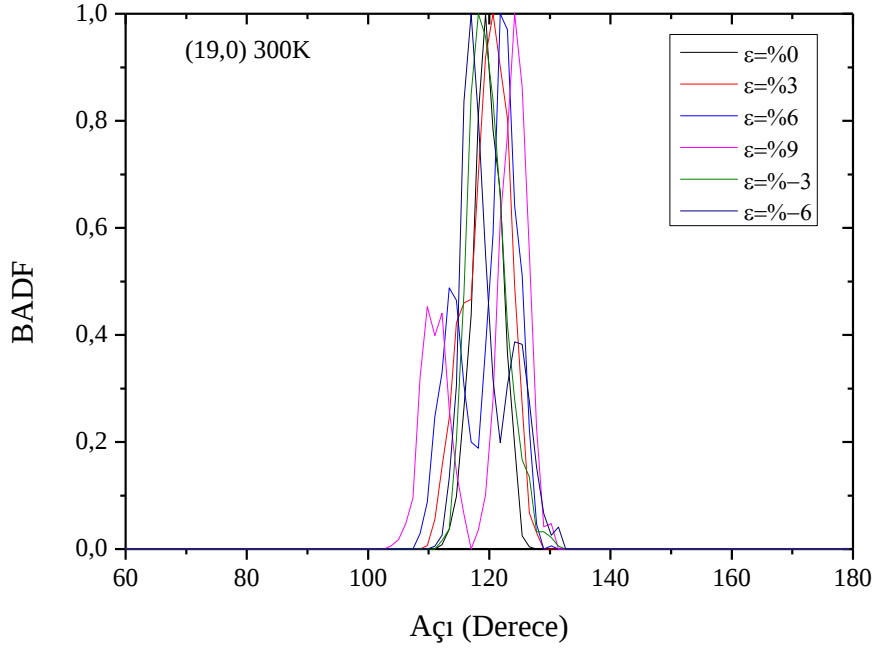
Şekil 5. 29 (18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



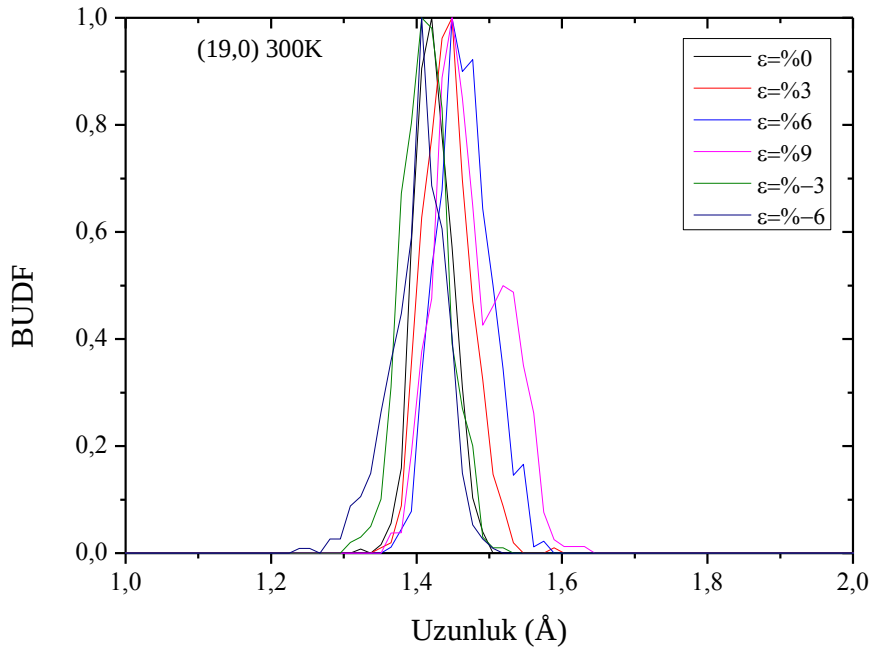
Şekil 5. 30 (18,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime



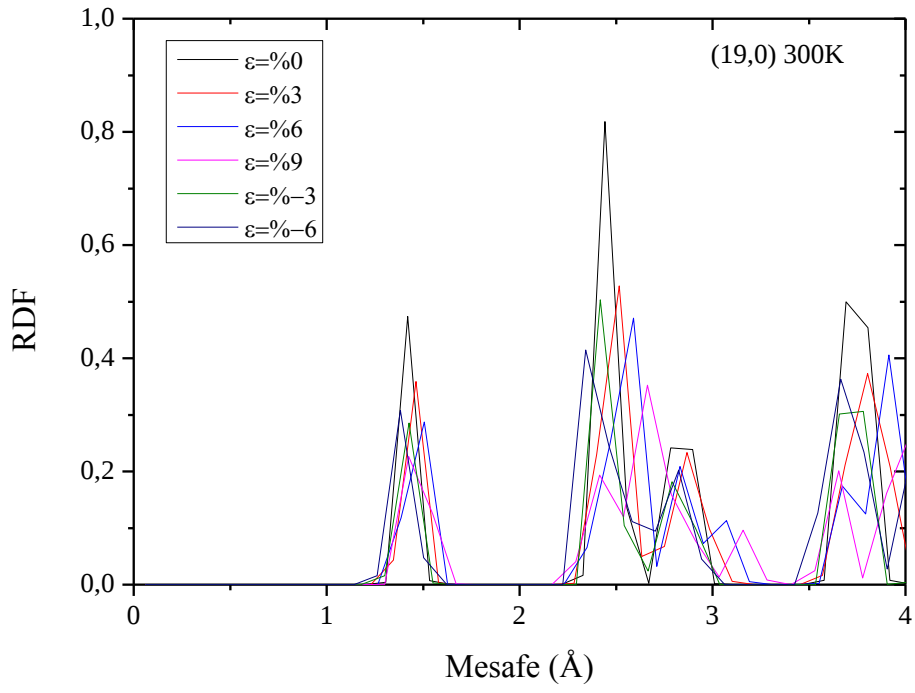
Şekil 5. 31 (18,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi



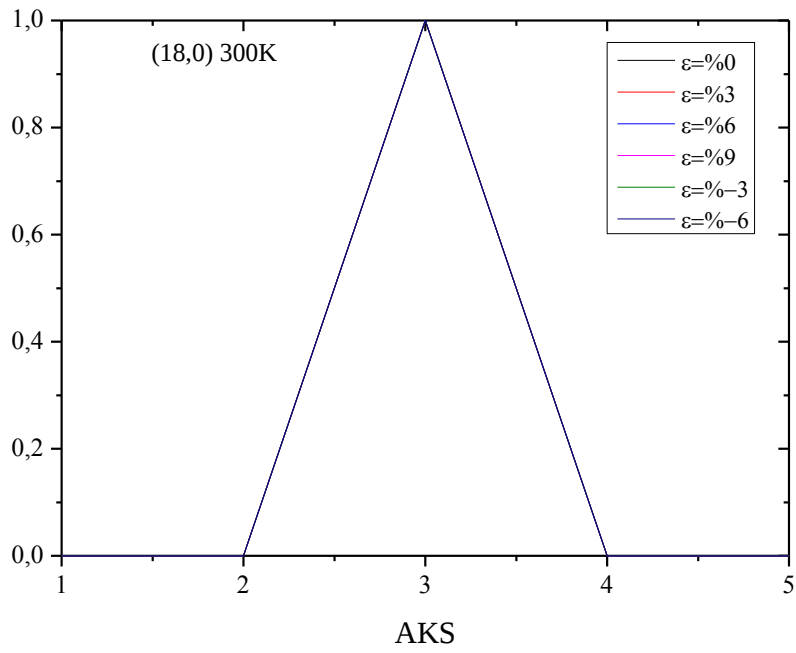
Şekil 5. 32 (19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



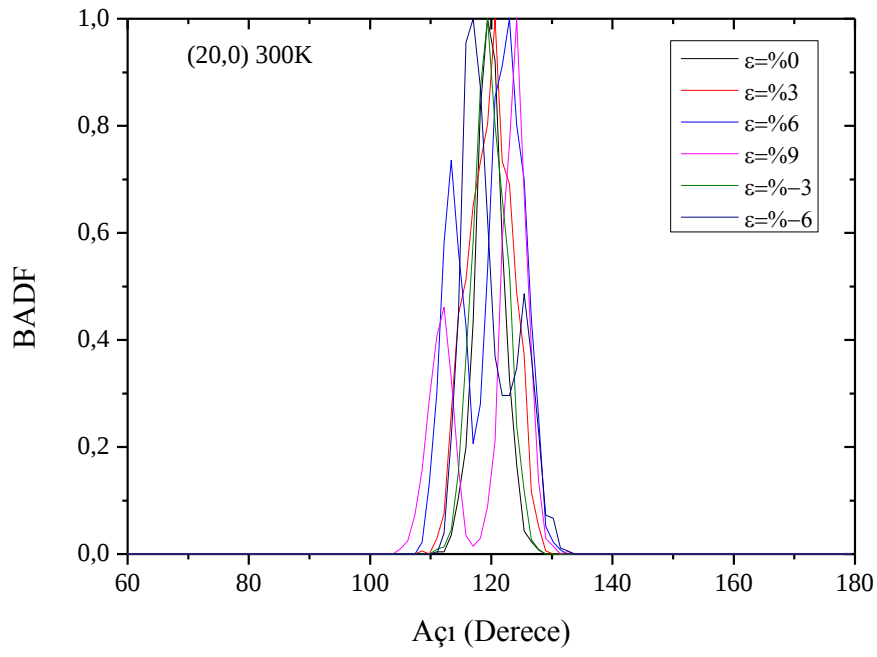
Şekil 5. 33 (19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



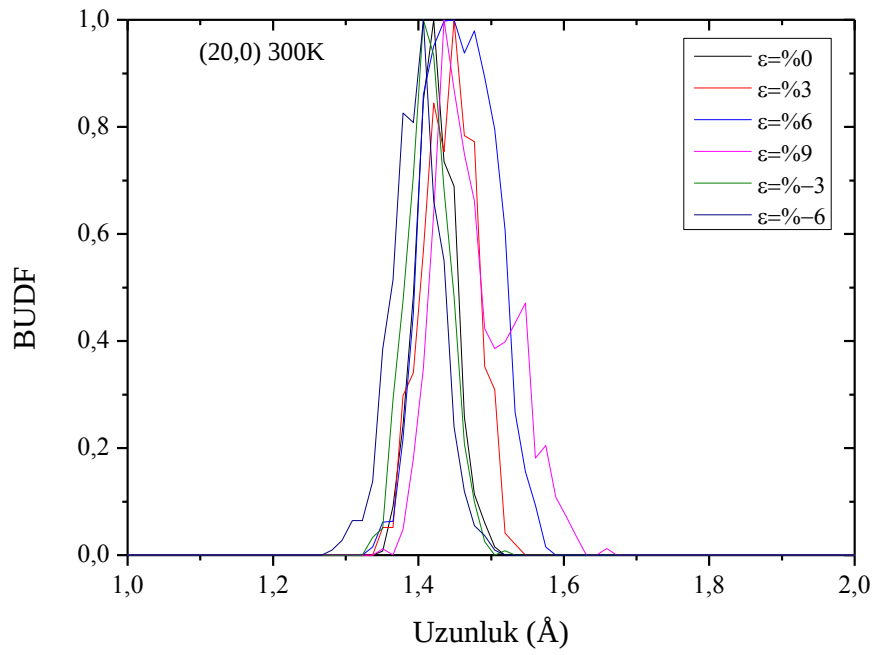
Şekil 5. 34 (19,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime



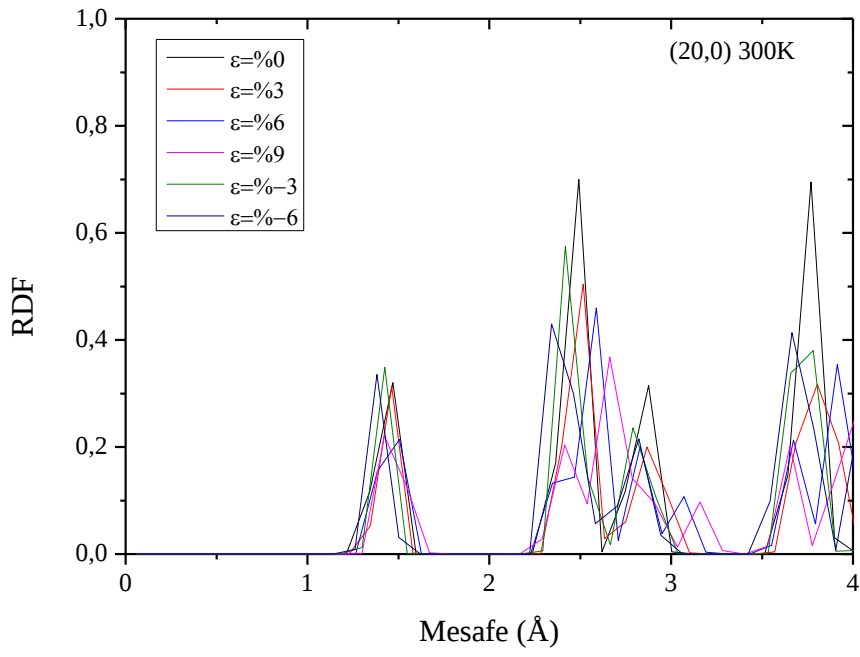
Şekil 5. 35 (19,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi



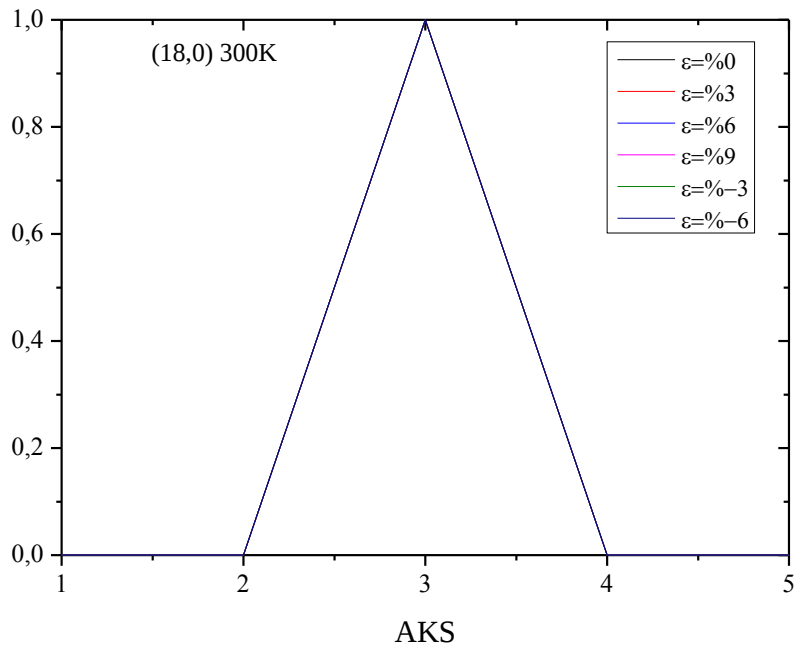
Şekil 5. 36 (20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



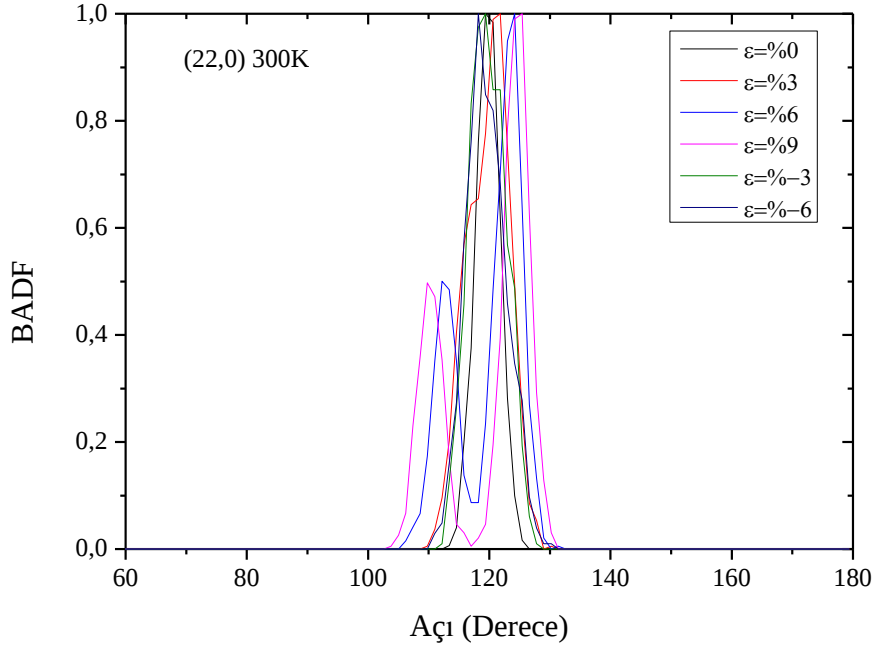
Şekil 5. 37 (20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



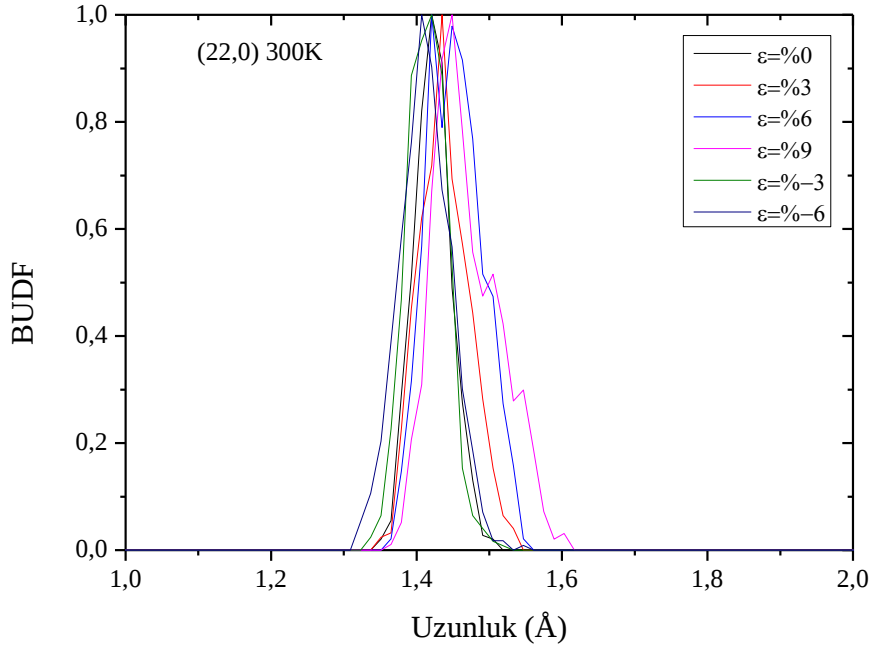
Şekil 5. 38 (20,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime



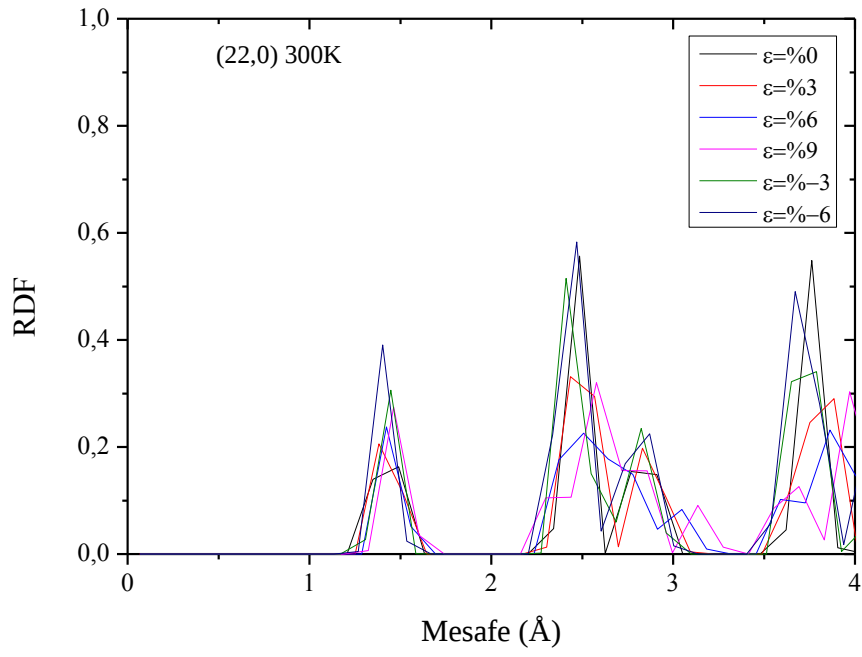
Şekil 5. 39 (20,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi



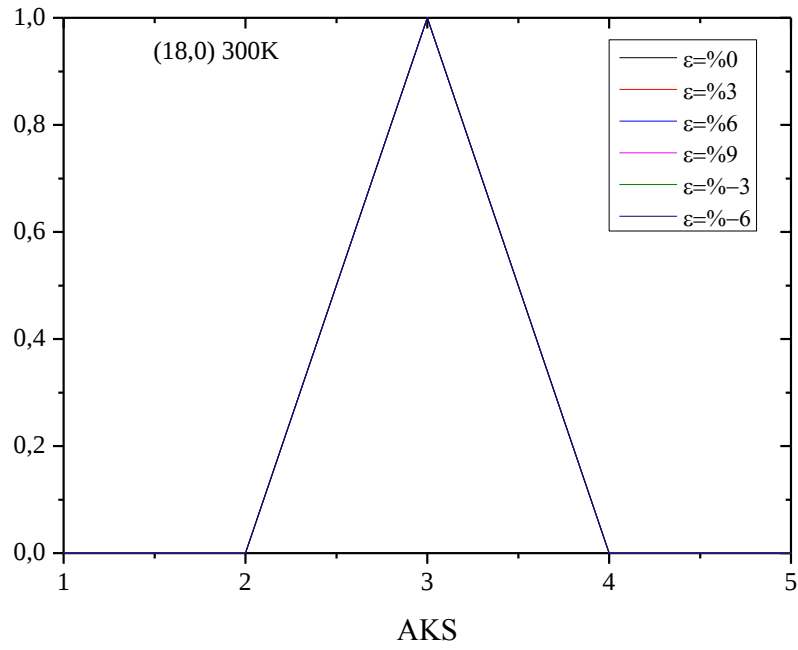
Şekil 5. 40 (22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



Şekil 5. 41 (22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun gerinime göre değişimi



Şekil 5. 42 (22,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre gerinime



Şekil 5. 43 (22,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının gerinime göre değişimi

5.1.1.5 Sonuçlar

300K sıcaklığında germe – sıkıştırma etkisi altında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik ve fiziksel özellikleri incelendi. Çalışmalarda zigzag TDKNT'ler $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ olarak 3 grupta toplandı. Çalışılan zigzag TDKNT'lere gerinim değeri tüp eksenine doğrultusunda uygulandı. Simülasyon çalışmalarında zigzag TDKNT'ler 3000MD adım dengelendikten sonra denge durumundaki TDKNT'lerin üzerine 2000 MD adım olacak şekilde gerinim uygulandı. Elektronik ve fiziksel özelliklerin hesabında çalışılan zigzag TDKNT'ler yapısal kararlılıklarını korumaktadır. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin üzerine %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9'a kadar da sıkıştırma işlemi uygulandı. Denge durumunda 300K sıcaklık değerinde (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ortalama toplam enerjileri ve Fermi enerji seviyeleri hesaplandı.

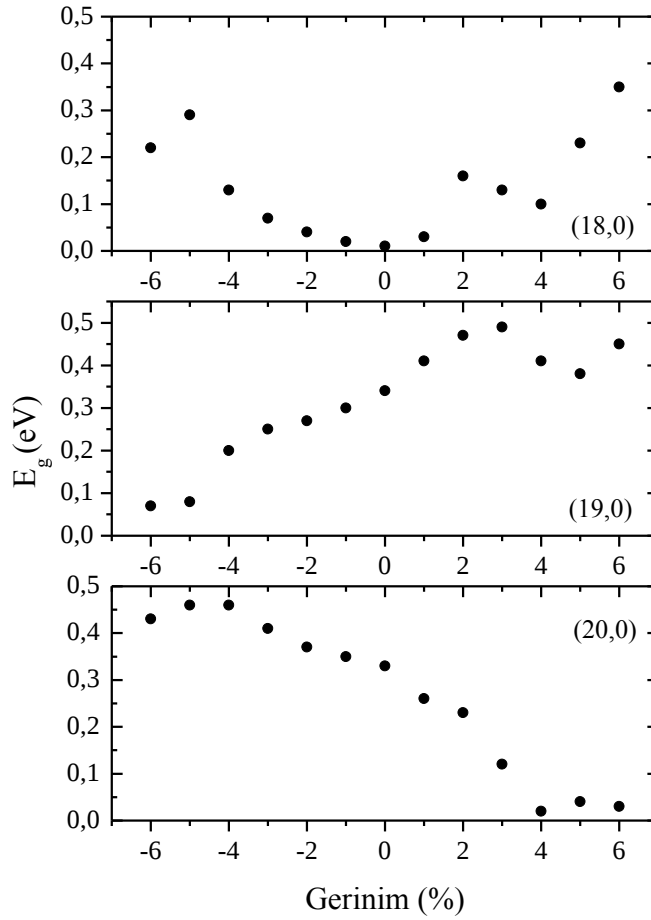
Çizelge 5. 1 300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ortalama toplam enerjileri ve Fermi enerji seviyeleri

$(n, 0)$	<i>Ortalama toplam enerji (eV)</i>	<i>Fermi Enerji Seviyesi (eV)</i>
(18, 0)	-8,28895	3,71467
(19, 0)	-8,29277	3,71504
(20, 0)	-8,29582	3,71855
(22, 0)	-8,30136	3,71520

Ortalama toplam enerjinin simüle edilen zigzag TDKNT'lerin kiralitesine bağlı olarak arttığı hesaplandı (Çizelge 5.1). (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin Fermi enerji seviyeleri ortalama 3,71 eV değerindedir. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak *eDOS* grafikleri çizildi. Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerinden her bir gerinim değerinde TDKNT'lerin E_g değerleri hesaplandı.

$(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT'nin *eDOS – Enerji (eV)* grafikleri incelendiğinde, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerjisi seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,01 eV değerindedir. Denge durumunda (18,0) zigzag TDKNT metalik bir davranış göstermektedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığının arttığı görüldü. %6 germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,35 eV iken %6

sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığı 0,22 eV olarak hesaplandı. $(n - m) = 3q$ grubundaki zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak metal – yarı iletken geçişi yapmaktadır (Şekil 5.44).



Şekil 5. 44 $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralıklarındaki değişim

Doktora tez çalışmalarında $(n - m) = 3q + 1$ grubunda incelenen (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin $eDOS - Enerji$ (eV) grafikleri incelendiğinde, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerjisi seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralıkları sırasıyla 0,34 ve 0,27 eV değerindedir. Denge durumunda her iki zigzag TDKNT yarı iletken davranış göstermektedir. Şekil 5.44'den görüldüğü üzere (19,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığı değişmektedir. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki zigzag TDKNT'lerin uygulanan gerinime bağlı olarak, germe ile enerji bant aralığının arttığı, sıkıştırma gerinimine bağlı olarak da enerji bant aralığının azaldığı

görüldü. Denge durumunda 0,34 eV olan enerji bant aralığı, $\varepsilon = \%3$ germe etkisinde 0,49 eV, $\varepsilon = \% - 6$ sıkıştırma etkisinde 0,07 eV olarak hesaplandı. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (22,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumun 0,27 eV enerji bant aralığına sahipken, $\varepsilon = \%3$ germe etkisi altında bu değer 0,41, $\varepsilon = \% - 6$ sıkıştırma etkisi altında 0,04 eV olarak hesaplandı. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan sıkıştırma gerinimine bağlı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır (Şekil 5.44).

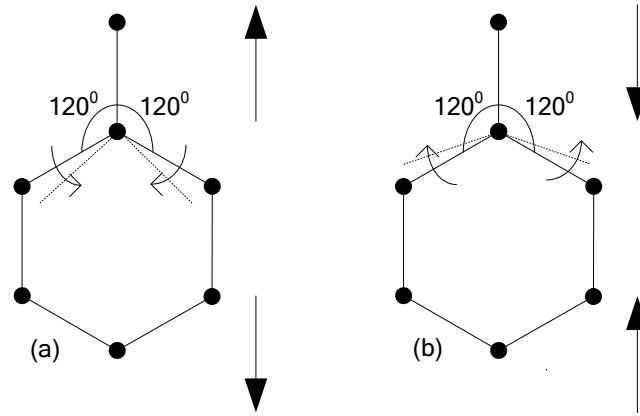
$(n - m) = 3q + 2$ grubunda bulunan (20,0) zigzag TDKNT'nin, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerjisi seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığı 0,34 eV değerindedir. Denge durumunda (20,0) zigzag TDKNT yarı iletken davranış gösterirken, üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığı değişmektedir. $\varepsilon = \%6$ germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,03 eV değerindeyken, $\varepsilon = \% - 5$ sıkıştırma etkisinde 0,46 eV değerindedir. (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan germe etkisi ile enerji bant aralığının azaldığı, sıkıştırma gerinimine bağlı olarak da enerji bant aralığının arttığı görüldü. $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan germe gerinimine bağlı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır (Şekil 5.44).

$(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerinde *BADF*, *BUDF*, *RDF* ve *AKS* gibi fiziksel özellikleri gerinime bağlı olarak incelendi. Altıgen örgüdeki karbon atomları arasındaki açı 120° 'dir. 300K sıcaklıkta denge durumunda ($\varepsilon = 0$) (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'ler için altıgen örgüdeki bağ açısı dağılım fonksiyonu 119.4° açıda keskin bir tepe noktası verdi. Çizelge 5. 2'de seçilen zigzag TDKNT'lerin sırasıyla denge, $\%6$ germe ve $\%6$ sıkıştırma değerlerinde bağ açılarının değerleri verilmiştir.

Çizelge 5. 2 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin 300K de farklı gerinim değerlerinde bağ açıları

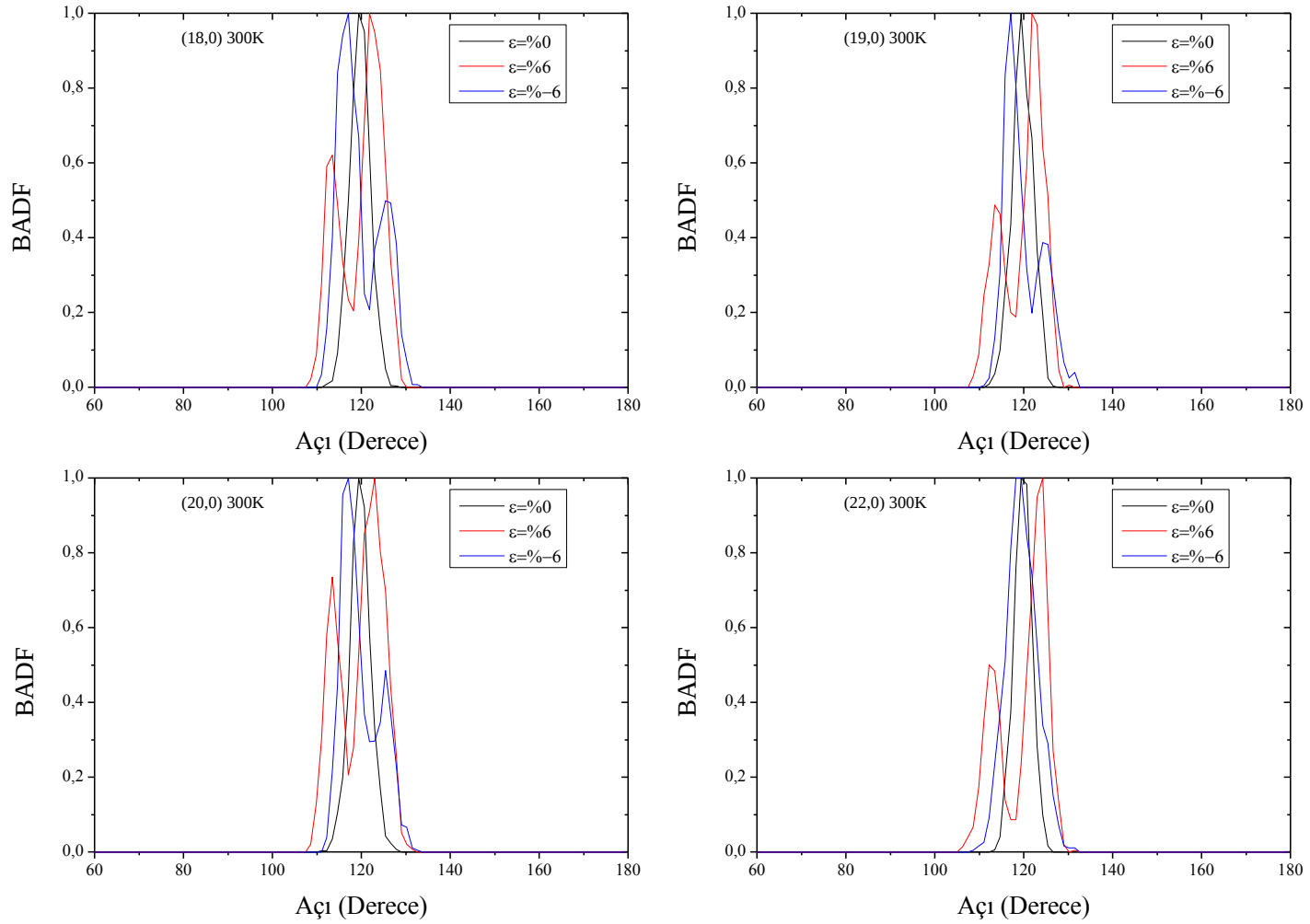
	(18,0)	(19,0)	(20,0)	(22,0)
$\varepsilon = \%0$	119.4°	119.4°	119.4°	119.4°
$\varepsilon = \%6$	121.8° – 113.4°	121.8° – 113.4°	123° – 113.4°	124.2° – 112.4°
$\varepsilon = \% - 6$	117.0° – 125.4°	117.0° – 124.2°	117.0° – 125.4°	118.2°

TDKNT üzerine uygulanan pozitif gerinim ile referans karbon atomu ile bağ yapan karbon atomları arasındaki üç açıdan ikisi 120° 'den büyük değer alırken diğer açı 120° 'den küçük değer almaktadır (Şekil 5.45). Şekil 5.46'dan görüldüğü üzere, %6 gerinim ile bağ açısı dağılım fonksiyonu sağa doğru kayarken (120° 'den büyük değer alırken), 120° 'den küçük oluşan açılar içinde bir kırınım oluşmaktadır. Benzer şekilde, uygulanan sıkıştırma gerinimiyle referans karbon atomu ile bağ yapan karbon atomları arasındaki üç açıdan ikisi 120° 'den küçük değer alırken diğer açı 120° 'den büyük değer almaktadır (Şekil 5.45). %-6 gerinim ile bağ açısı dağılım fonksiyonu sola doğru kayarken (120° 'den küçük değer alırken), 120° 'den büyük oluşan açılar içinde bir kırınım oluşmaktadır [63-64].



Şekil 5. 45 (a) Germe, (b) Sıkıştırma etkisi ile Zigzag TDKNT'lerin bağ- açılarındaki değişim

(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi incelendiğinde, germe etkisi altında TDKNT'lerin bağ-açısı dağılım fonksiyonları artarken, sıkıştırma etkisi altında azalmaktadır. Seçilen zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisine bağlı olarak birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri değişmektedir. Germe – sıkıştırma etkisi altındaki TDKNT'lerin atomik koordinasyon sayısının gerinime bağlı değişimi incelendiğinde, 300K sıcaklıkta, atomların komşu atomlarla üç bağ yaptığı görülmektedir.



Şekil 5. 46 $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin bağ-açısı dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi

5.1.2 0.1K, 900K, 1200K ve 1500K Sıcaklıklarda Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları

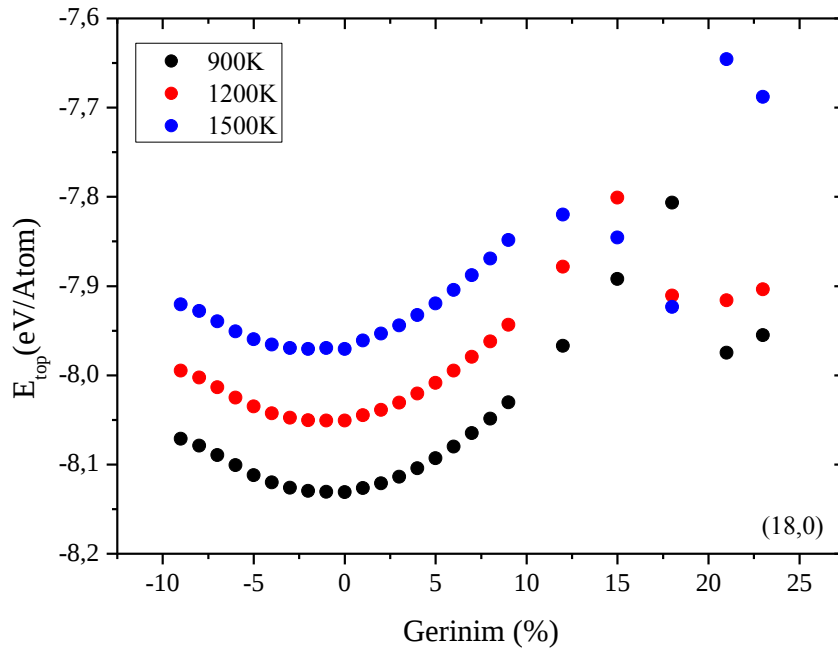
Kiralitelerine bağlı olarak TDKNT'lerin mekanik ve elektronik özellikleri sıcaklık ve gerinimle değişmektedir [65-67]. Doktora tezimde, yarıçapları 7.05 – 8.62Å aralığında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altında elektronik yapıları 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında çalışıldı. Düşük – yüksek sıcaklık simülasyon çalışmalarında elektronik sıcaklık $k_B T = 0,025$ eV olarak alınmıştır. 0.1K sıcaklıktaki, atom başına toplam enerjinin ve Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişim grafikleri EK-B'de verildi.

5.1.2.1 (18,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı

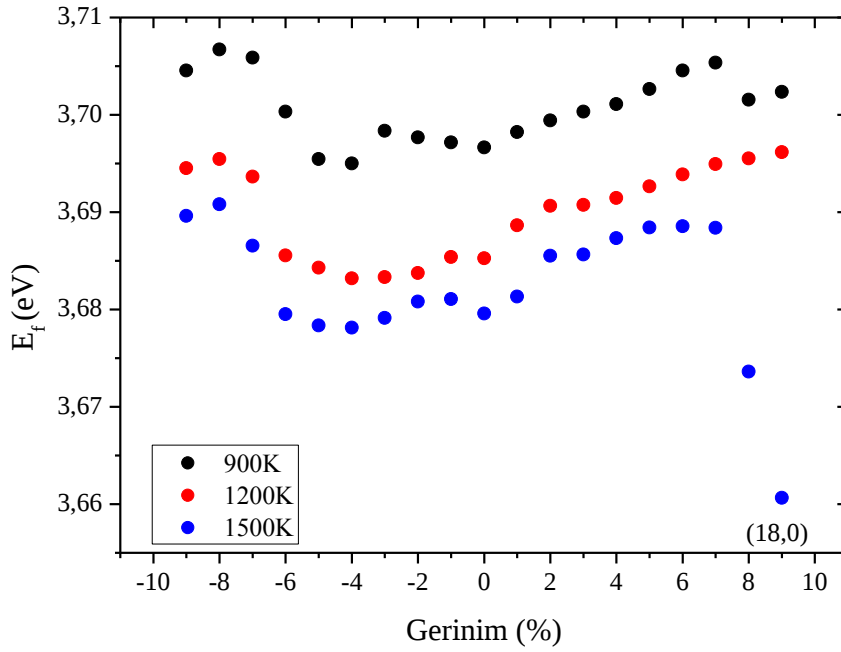
$(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT'nin germe – sıkıştırma çalışmaları sıcaklığa bağlı olarak, TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar çalışıldı. Simülasyon çalışmalarında (18,0) zigzag TDKNT çalışılan her sıcaklıkta dengeleme işlemi 3000MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapıldı. Denge durumundaki TDKNT üzerine 2000 MD adım gerinim uygulandı.

Şekil 5.47'de (18,0) zigzag TDKNT'nin 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Şekildeki “negatif” gerinim değerleri aksel sıkıştırmayı gösterirken “pozitif” gerinim değerleri de aksel germeyi göstermektedir. Buna göre, uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak atom başına toplam enerji artmaktadır. (18,0) zigzag TDKNT, %9 sıkıştırma ile %9 germe aralığında elastik davranış sergilemektedir. Yüksek gerinim değerlerinde yapısal kararlılık bozulmaktadır. Şekil 5.47'de yapısal kararlılığın bozulduğu durumlar Bölüm 5.4'de detaylı olarak verilecektir.

900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde (18,0) zigzag TDKNT'nin uygulanan gerinim değerlerine bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim Şekil 5.48'de gösterilmiştir. Şekil 5.48'de uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisi arttığı, sıcaklığa bağlı olarak Fermi enerjisinin azaldığı görülmektedir.



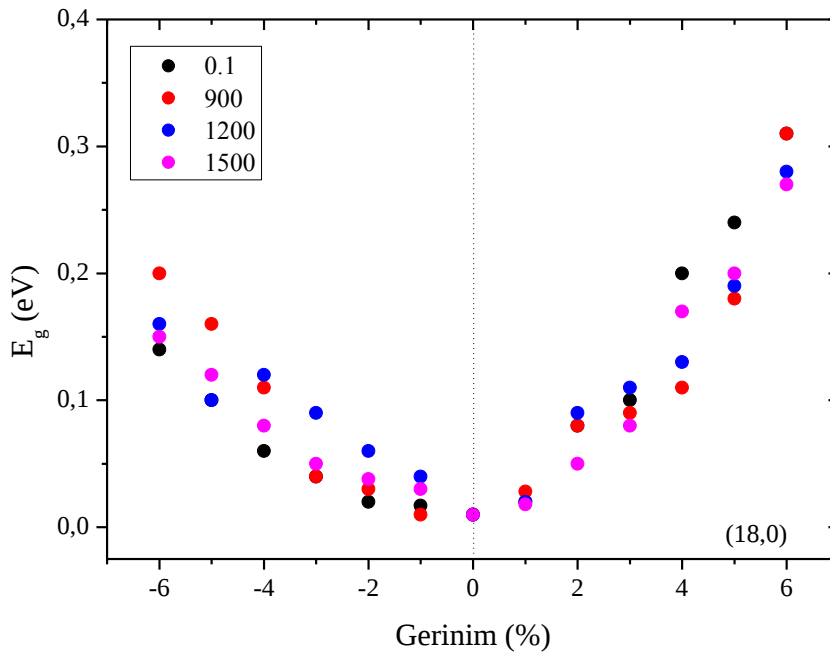
Şekil 5. 47 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 5. 48 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 5.49'da (18,0) zigzag TDKNT'nin çalışılan sıcaklık değerlerinde germe – sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığının değişimi görülmektedir. $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığına göre $(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde metalik davranış göstermektedir. 0.1K sıcaklık değerinde, $\varepsilon = \%5$ germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,24eV değerinde, $\varepsilon = \%5$ sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığı 0,1 eV değerindedir (Şekil 5.49). (18,0) zigzag TDKNT'nin üzerine uygulanan germe ve sıkıştırmaya bağlı olarak enerji bant aralığının arttığı görülmektedir.

900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde de uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığının arttığı görülmektedir. 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde uygulanan gerinime bağlı olarak metal – yarı iletken geçişleri gerçekleşmektedir.



Şekil 5. 49 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi

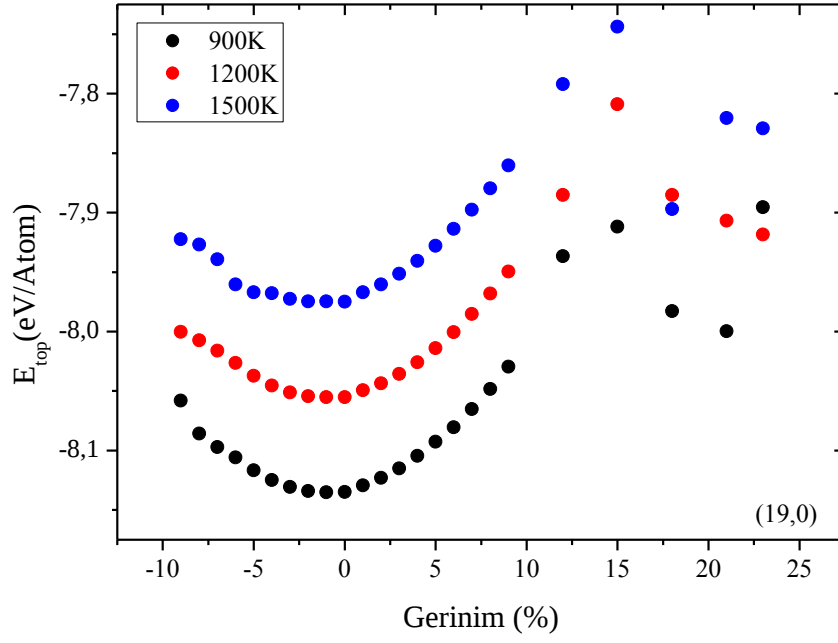
5.1.2.2 (19,0) - (22,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapısı

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde $1fs$ moleküler dinamik adım zamanı için 3000 MD adım süresince denge durumunda kararlı enerji seviyesinde salınım yapmaktadırlar. Elektronik yapı çalışmalarının yapıldığı sıcaklık değerlerinde yapısal kararlılık korunmaktadır.

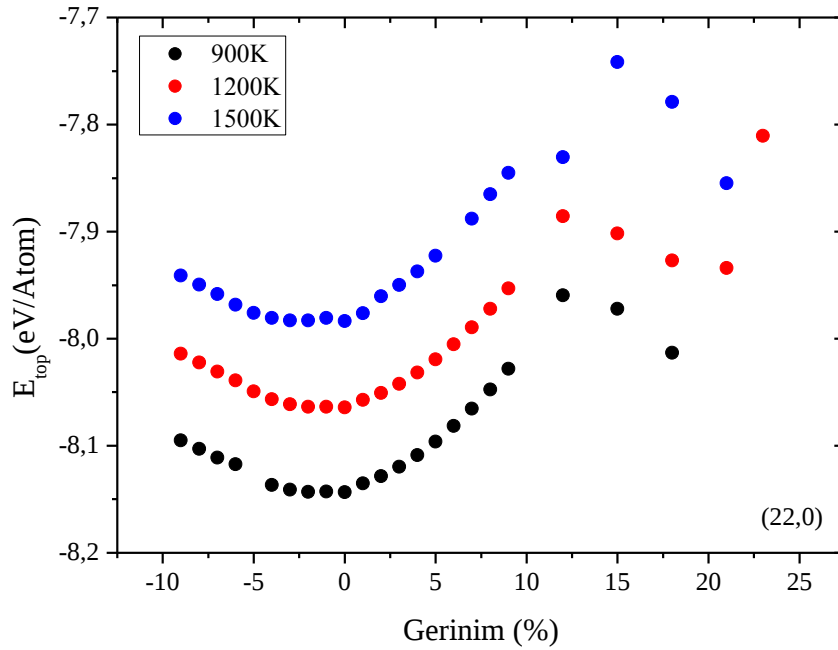
Germe – sıkıştırma çalışmaları 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler üzerine %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9 kadar sıkıştırma uygulanarak gerçekleştirildi.

Şekil 5.50 ve 5.51'de sırasıyla (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Uygulanan gerinime bağlı olarak atom başına toplam enerji artmaktadır. Grafiklerde, “pozitif” gerinim değerleri eksenel germeyi göstermektedir. Atom başına toplam enerjinin gerinimle değişim grafiklerinde %15 germe değerinden sonra yapısal kararlılık bozulmaktadır. Bu kısım Bölüm 5.4'de ayrıntılı bir şekilde incelenecektir.

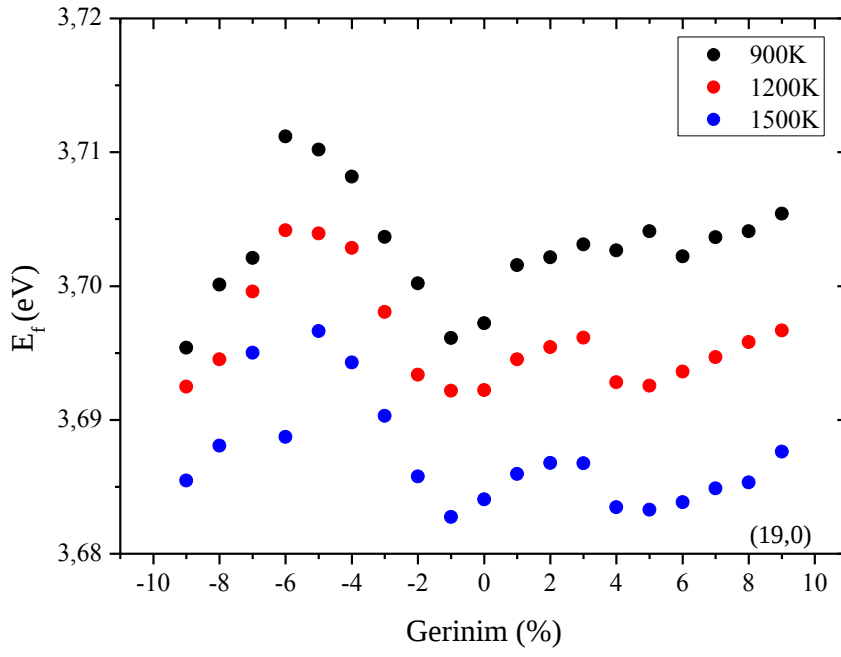
Şekil 5.52 ve 5.53'de $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 900, 1200 ve 1500K yüksek sıcaklık değerlerinde uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir. Sıcaklığa bağlı olarak Fermi enerjisinin azaldığı görülmektedir.



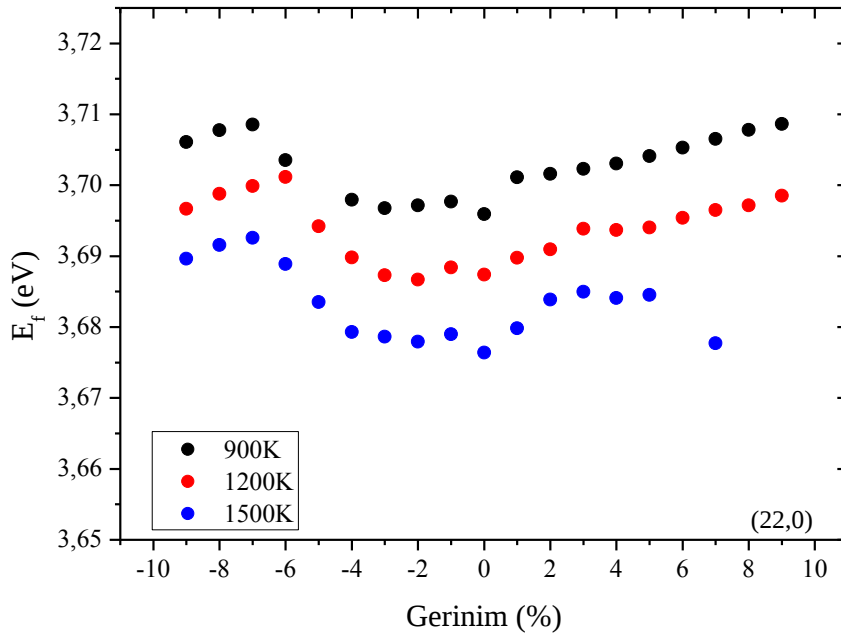
Şekil 5. 50 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 5. 51 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



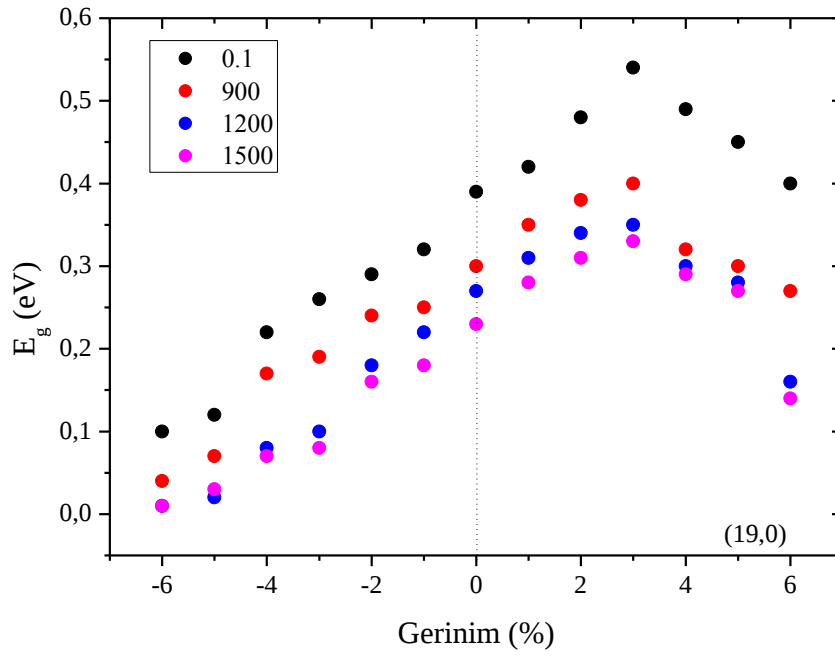
Şekil 5. 52 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi



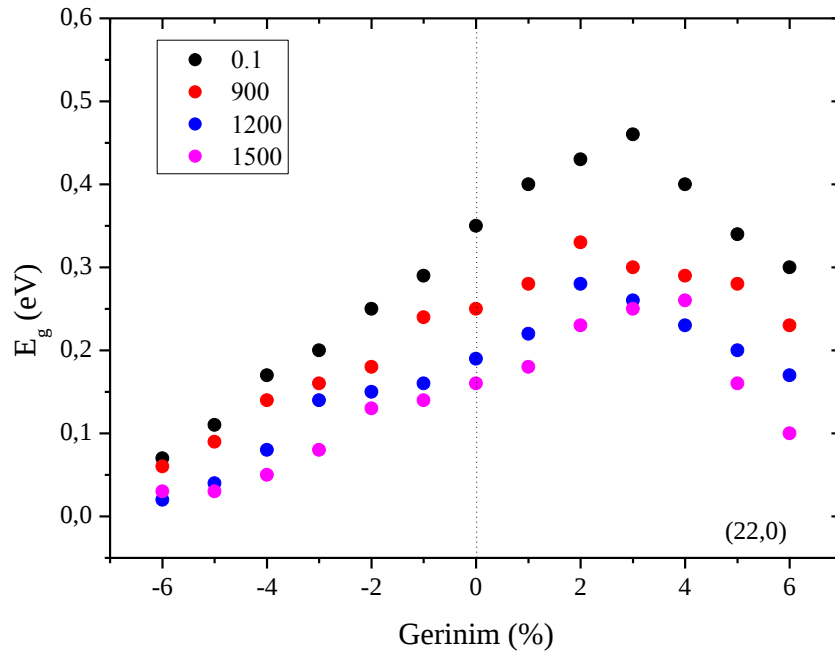
Şekil 5. 53 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

Şekil 5.54 ve 5.55’de sırasıyla $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT’lerin 0.1K - 900K - 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi görülmektedir. (19,0) zigzag TDKNT’nin, $\varepsilon = 0$ denge durumunda, 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde enerji bant aralıkları sırasıyla 0,39, 0,3, 0,27 ve 0,23 eV değerlerindedir. Denge durumunda (19,0) zigzag TDKNT yarı iletken davranış göstermektedir. Üzerine uygulanan pozitif gerinimle enerji bant aralığının arttığı görülmektedir (Şekil 5.54). 0.1K sıcaklık değerinde, $\varepsilon = \%3$ germe etkisi altında enerji bant aralık değeri 0,54 eV olurken, $\varepsilon = \%5$ sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığı 0.12 eV değerine azalmaktadır. (19,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde karbon nanotüp üzerine uygulanan pozitif gerinimle enerji bant aralığının arttığı, negatif gerinimle enerji bant aralığının azaldığı görülmüştür.

$(n - m) = 3q + 1$ grubuna diğer bir örnek (22,0) zigzag TDKNT’dir. (22,0) zigzag TDKNT’nin 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde denge durumunda enerji bant aralıkları sırasıyla 0,35, 0,25, 0,19 ve 0,16 eV değerlerindedir. TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığının değiştiği gözlenmiştir (Şekil 5.55). Örnek olarak, 900K sıcaklığında $\varepsilon = \%4$ germe etkisi altında (22,0) zigzag TDKNT’nin enerji bant aralık değerinin artarak 0,29 eV değerinde olduğu, $\varepsilon = \%6$ sıkıştırma etkisi altında bu değer 0,06 eV olduğu hesaplanmıştır. Çalışılan diğer sıcaklıklarda da (0.1, 1200 ve 1500K) enerji bant aralığının pozitif gerinimle arttığı, negatif gerinimle de azaldığı tespit edilmiştir. Buna göre, $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki her iki TDKNT için gerinime bağlı olarak negatif gerinim değerlerinde yarı iletken – metal geçişleri gözlenmektedir.



Şekil 5. 54 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi



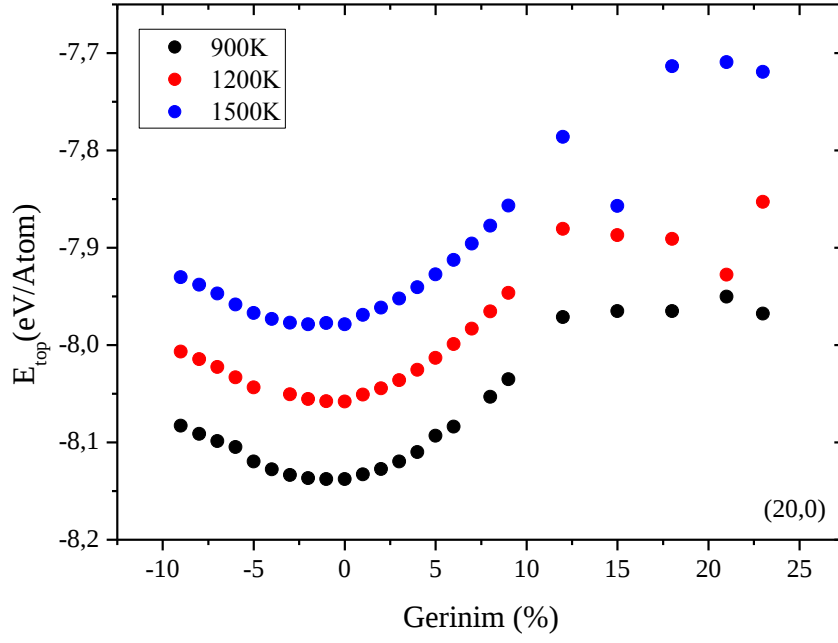
Şekil 5. 55 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K - 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi

5.1.2.3 (20,0) Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Elektronik Yapısı

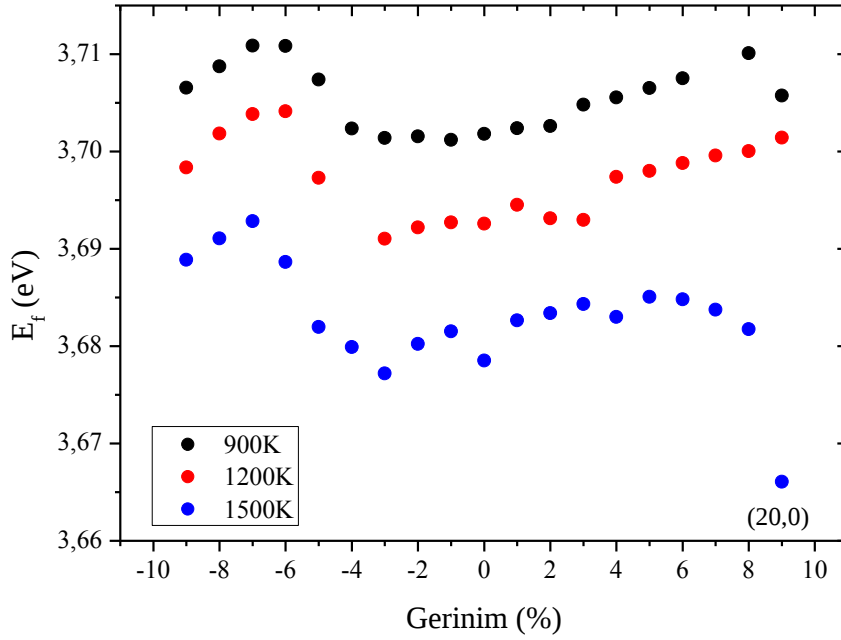
$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT'nin germe – sıkıştırma çalışmaları 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında simüle edildi. Simülasyon çalışmalarında her sıcaklıkta dengeleme işlemi 3000MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapıldı. Elektronik yapı çalışmaları yapısal kararlılığın korunduğu bölgelerde gerçekleştirildi. Yüksek sıcaklıklarda, germe – sıkıştırma çalışmaları %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9 kadar sıkıştırma uygulanarak gerçekleştirildi.

Şekil 5.56'da (20,0) zigzag TDKNT'nin 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Atom başına toplam enerji uygulanan gerinime bağlı olarak arttığı görülmektedir. Grafiklerde, “pozitif” gerinim değerleri eksenel germeyi göstermektedir. Atom başına toplam enerjinin gerinimle değişim grafiklerinde %12 germe değerinden sonra yapısal kararlılık bozulmaktadır. Bu kısım Bölüm 5.4'de ayrıntılı bir şekilde incelenecektir.

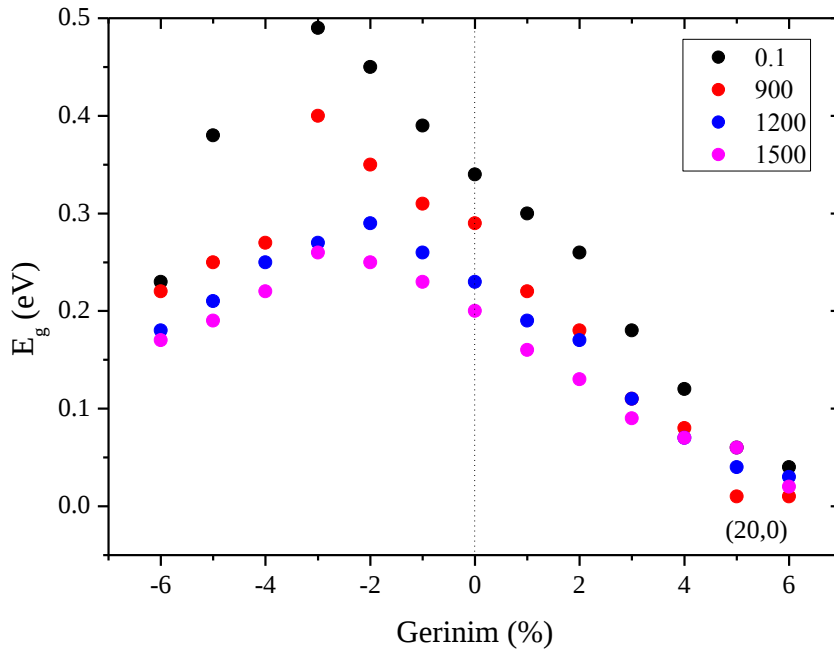
$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT'nin 900, 1200 ve 1500K yüksek sıcaklık değerlerinde uygulanan gerinime bağlı olarak Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir. Sıcaklığa bağlı olarak Fermi enerjisinin azaldığı görülmektedir (Şekil 5.57).



Şekil 5. 56 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 5. 57 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 5. 58 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K – 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi

(20,0) zigzag TDKNT'nin 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi Şekil 5.58'de görülmektedir. $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumunda 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında sırasıyla 0,34, 0,29, 0,23 ve 0,2 eV değerinde enerji bant aralığına sahiptir. Çalışılan sıcaklıklarda, $\varepsilon = 0$ denge durumunda yarı iletken davranış sergilemektedir. Uygulanan negatif gerinimle enerji bant aralığı artarken, pozitif gerinimle enerji bant aralığı azalmaktadır (Şekil 5.58). 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde $\varepsilon = 6$ germe etkisinde (20,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı sırasıyla 0,04, 0,01, 0,03 ve 0,06 eV değerindedir. Buna göre, $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak pozitif gerinim değerlerinde yarı iletken – metal geçişleri gözlenmektedir.

5.1.2.4 Sonuçlar

Doktora tez çalışmalarında 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklığında germe – sıkıştırma etkisi altında $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT'lerden sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik özellikleri incelendi. Simülasyon çalışmalarında $(n, 0)$ zigzag TDKNT'lere gerinim değeri tüp eksenini doğrultusunda uygulandı. Çalışmaların yapıldığı sıcaklık ve gerinim değerlerinde yapısal kararlılık korunmaktadır. 3000 MD adım dengelenen TDKNT'ler üzerine 2000 MD adım olacak şekilde %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9'a kadar da sıkıştırma işlemi uygulandı. $(n, 0)$ zigzag TDKNT'lerin 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde denge durumlarındaki toplam enerjilerinin moleküler dinamik adıma göre değişimi ve atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı değişimi incelendi. Her bir sıcaklık ve gerinim değerinde Fermi enerji seviyeleri hesaplandı. Fermi enerjisi civarında durum yoğunlukları grafikleri oluşturuldu. Bu grafikler yardımıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında enerji bant aralıkları hesaplandı. Çizelge 5.3'de (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin $\varepsilon = 0$ denge durumunda 0.1, 300, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde Fermi enerjisindeki değişim gösterilmiştir.

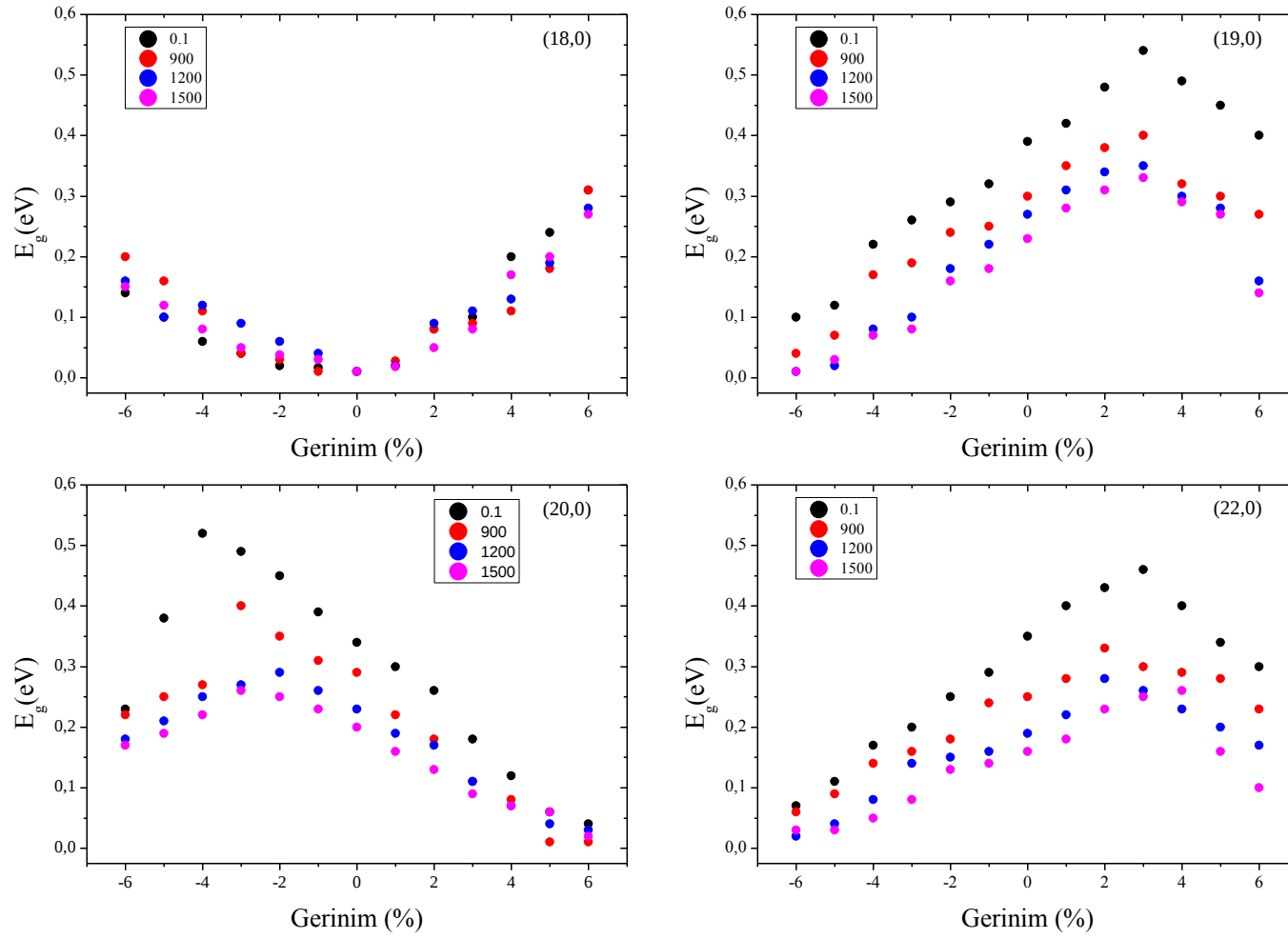
Çizelge 5. 3 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin denge durumunda 0.1, 300, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde Fermi enerjisindeki değişim

$\varepsilon = 0$	E_{fermi}				
	0.1K	300K	900K	1200K	1500K
(18,0)	3,72384	3,71467	3,69665	3,68525	3,67957
(19,0)	3,71476	3,71504	3,69722	3,69223	3,68406
(20,0)	3,70754	3,71855	3,70180	3,69257	3,67852
(22,0)	3,71885	3,71520	3,69594	3,68740	3,67638

$(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerji seviyesi civarında hesaplanan enerji bant aralığına göre 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde metalik davranış göstermektedir. 0.1K sıcaklık değerinde, $\varepsilon = \%5$ germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,24eV değerinde, $\varepsilon = \%5$ sıkıştırma etkisi altında enerji bant aralığı 0,1 eV değerindedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak tüm sıcaklık değerlerinde enerji bant aralığının arttığı görülmekte ve metal – yarı iletken geçişleri meydana gelmektedir (Şekil 5.59).

$(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerji civarında hesaplanan enerji bant aralığına göre yarı iletken davranış göstermektedir. (19,0) zigzag TDKNT'nin, $\varepsilon = 0$ denge durumunda, 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde enerji bant aralıkları sırasıyla 0,39, 0,3, 0,27 ve 0,23 eV değerlerindedir. Diğer taraftan, (22,0) zigzag TDKNT'nin 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde denge durumunda enerji bant aralıkları sırasıyla 0,35, 0,25, 0,19 ve 0,16 eV değerlerindedir. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan eksenel gerinime bağlı olarak her iki zigzag TDKNT'de ortak elektronik davranış göstermektedir. Çalışılan sıcaklık değerlerinde (0.1, 900, 1200 ve 1500K) enerji bant aralığının pozitif gerinimle arttığı, negatif gerinimle azalarak yarı iletken – metal geçişlerinin meydana geldiği gözlemlendi (Şekil 5.59).

$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (22,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumunda Fermi enerji civarında hesaplanan enerji bant aralığına göre yarı iletken davranış göstermektedir. $\varepsilon = 0$ denge durumunda 0.1, 900, 1200 ve 1500K sıcaklıklarında sırasıyla 0,34, 0,29, 0,23 ve 0,2 eV değerinde enerji bant aralığına sahiptir. Uygulanan negatif gerinimle enerji bant aralığı artarken, pozitif gerinimle enerji bant aralığı azalarak yarı iletken – metal geçişlerinin meydana geldiği gözlemlendi (Şekil 5.59). Çalışmaların yapıldığı düşük – yüksek sıcaklıklarda (0.1, 900, 1200 ve 1500K) TDKNT'lerin enerji bant aralığı değerleri sıcaklığa bağlı olarak azalmaktadır. Sıcaklığın, $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisi altındaki genel davranışını etkilemediği görüldü. Bu davranış düşük – yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi altındaki zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığındaki değişimin önceden öngürülebilir olması açısından önem taşımaktadır.



Şekil 5. 59 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 0.1K – 900K – 1200K - 1500K sıcaklıklarda enerji bant aralıklarının gerinime bağlı değişimi

5.2 Farklı Boylardaki Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapıları

TDKNT'lerin günümüz teknolojisinde hedeflenen ve/veya kullanımda (hidrojen depolama, strain sensor, biyosensor, uzay araştırmaları vs.) olan bir dizi kullanım alanı mevcuttur [68-70]. Ultra uzun TKDNT'lerin elektriksel özellikleri farklı deneysel gruplar tarafından çalışılmaktadır [71-76]. Karbon nanotüplerin hafif, yüksek mukavvemetli kullanımlarına ek olarak, yeni uzun metalik karbon nanotüplerin nano-ölçekli elektromekanik sistemlerde kullanılması hedeflenmektedir [77-83]. Örneğin; mikro-elektrik motorlar, nano-ölçekli diyotlar ve mikro-elektronik cihazlar için nano iletken kablo yapımı. Uzun metalik karbon nanotüpler, biyo-kimyasal sensör oluşturmak için kullanılırken, diğer KNT'ler sinyal iletiminde iletken malzeme olarak kullanılmaktadır. KNT'lerin diğer kullanım alanları arasında nano-elektronik uygulamalar (iletken ve yalıtkan malzeme olarak) yer almaktadır. Örneğin; elektronik özellikleri farklı olan iki KNT birleştirilerek nano-ölçekli diyotlar oluşturulmaktadır [84-90].

Simülasyon çalışmalarımda TDKNT'lerin boyunu, katman sayısı (*nlayer*) parametresi belirlemektedir. Doktora tezimde, nanokuşaklar (*nlayer* = 5), katman sayısı 8, 20 ve 80 olan zigzag TDKNT'ler çalışıldı. Çalışmada simüle edilen zigzag TDKNT'lerin boyları 4,26 Å'dan 83,78Å'a, atom sayıları da 90'dan 1760'a kadar değişmektedir. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklığında denge durumlarındaki ortalama boyları ve atom sayıları Çizelge 5.4'de gösterilmiştir.

Çalışma da öncelikle seçilen zigzag TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin katman sayısına göre değişimine bakılmış, ardından TDKNT'lerin boyunun enerji bant aralığına etkisi incelenmiştir. Farklı boylardaki zigzag TDKNT'lerin elektronik özellikleri 300K sıcaklığında çalışılmıştır. Bu çalışmada (*n*, 0) zigzag TDKNT'lerden (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler incelenmiştir.

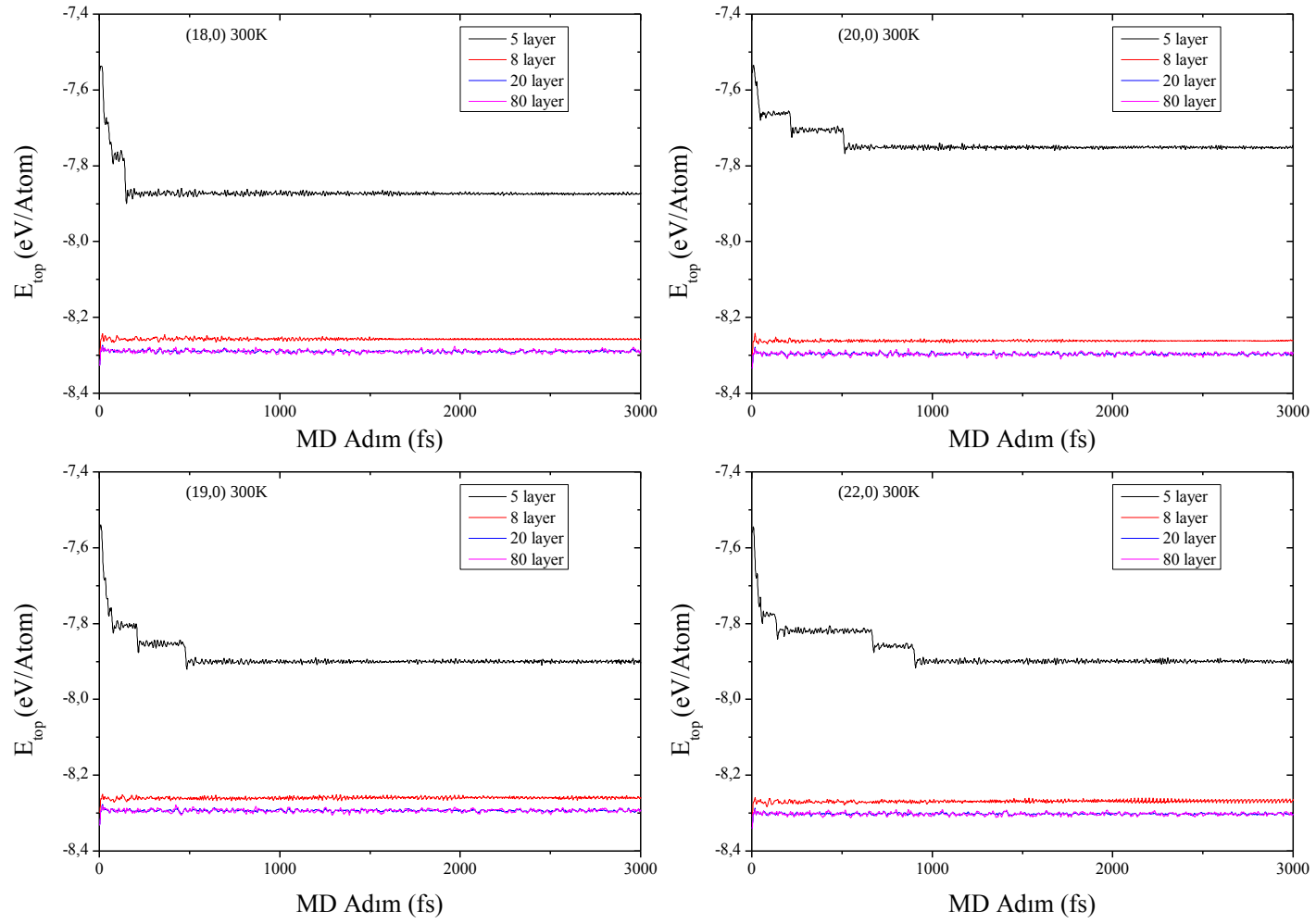
Çizelge 5. 4 300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin fiziksel özellikleri

$T = 300K$	(18,0)		(19,0)		(20,0)		(22,0)	
	$l(\text{\AA})$	N	$l(\text{\AA})$	N	$l(\text{\AA})$	N	$l(\text{\AA})$	N
Nanokuşak	4,26	90	4,26	95	4,26	100	4,26	110
8 layer	7,1	144	7,1	152	7,1	160	7,1	176
20 layer	19,88	360	19,88	380	19,88	400	19,88	440
80 layer	83,78	1440	83,78	1520	83,78	1600	83,78	1760

Şekil 5.60'da sırasıyla 300K sıcaklığında nanokuşak, 8, 20 ve 80 katmandan oluşan (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 3000 MD adımıdaki ortalama enerjilerindeki değişim görülmektedir. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin nanokuşak yapıları 300K sıcaklıkta sırasıyla -7,87288, -7,89972, -7,75096 ve -7,89896 eV ortalama enerjilerinde salınım yapmaktadır. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin boyu arttıkça salınım yaptıkları ortalama enerji değerleri artmaktadır. Çizelge 5.5'de 300K sıcaklıkta zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre ortalama enerjileri görülmektedir.

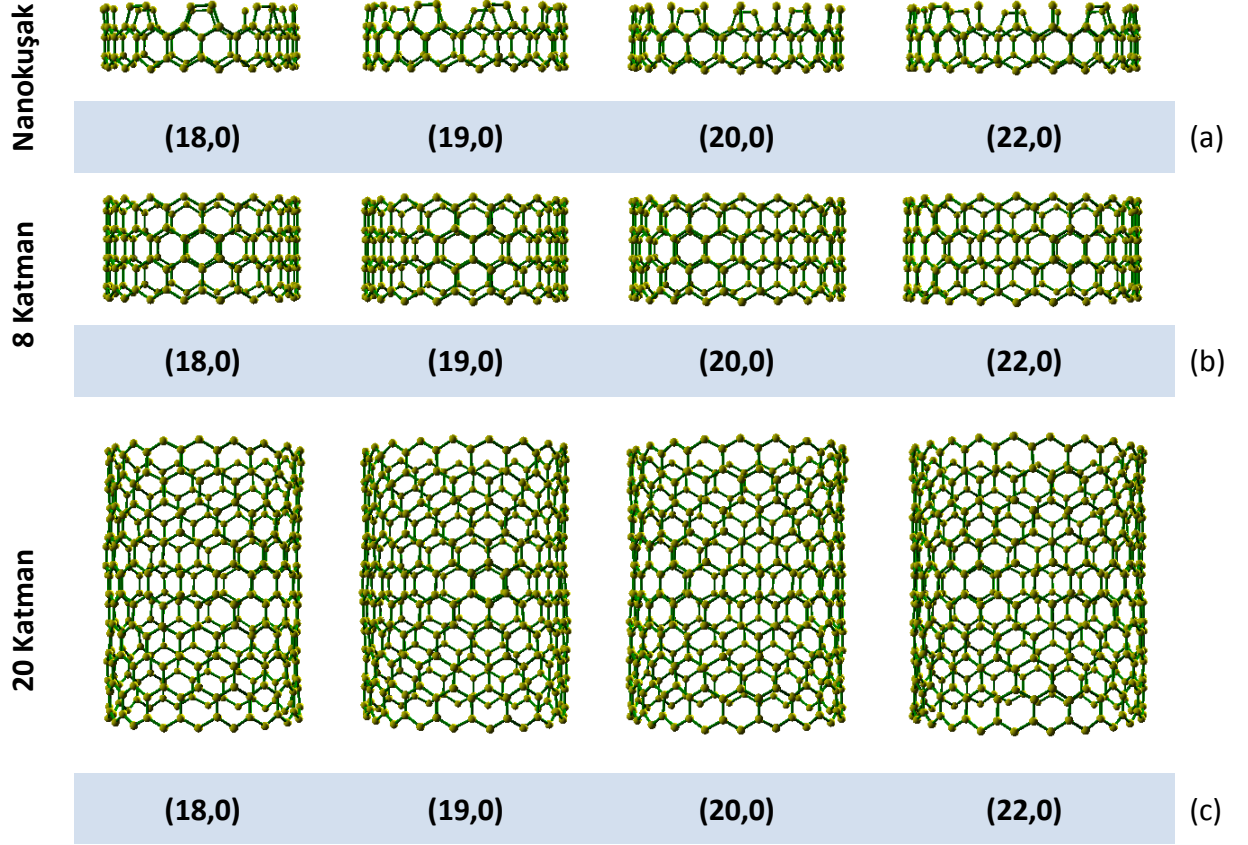
Çizelge 5. 5 300K sıcaklıkta Zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre ortalama enerjileri

(n, m)	$E_{ort}(eV/Atom)$			
	Nanokuşak	8 Katman	20 Katman	80 Katman
(18,0)	-7,87288	-8,25663	-8,28895	-8,32229
(19,0)	-7,89972	-8,25924	-8,29277	-8,32611
(20,0)	-7,75096	-8,26128	-8,29582	-8,32916
(22,0)	-7,89896	-8,26838	-8,30136	-8,33470



Şekil 5. 60 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta 5 – 8 – 20 ve 80 katman sayısında enerjilerindeki değişim

Şekil 5.61(a)'da yarıçapları sırasıyla 7.05, 7.45, 7.84 ve 8.62 Å aralığında değişen (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag nanokuşak TDKNT'lerin 300K'deki simülasyon görüntüleri görülmektedir. Şekil 5.61(b)-(c)'de aynı tüplerin 8 ve 20 katman simülasyon görüntüleri görülmektedir. Ek-C kısmında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 80 katman simülasyon görüntüleri verilmiştir.



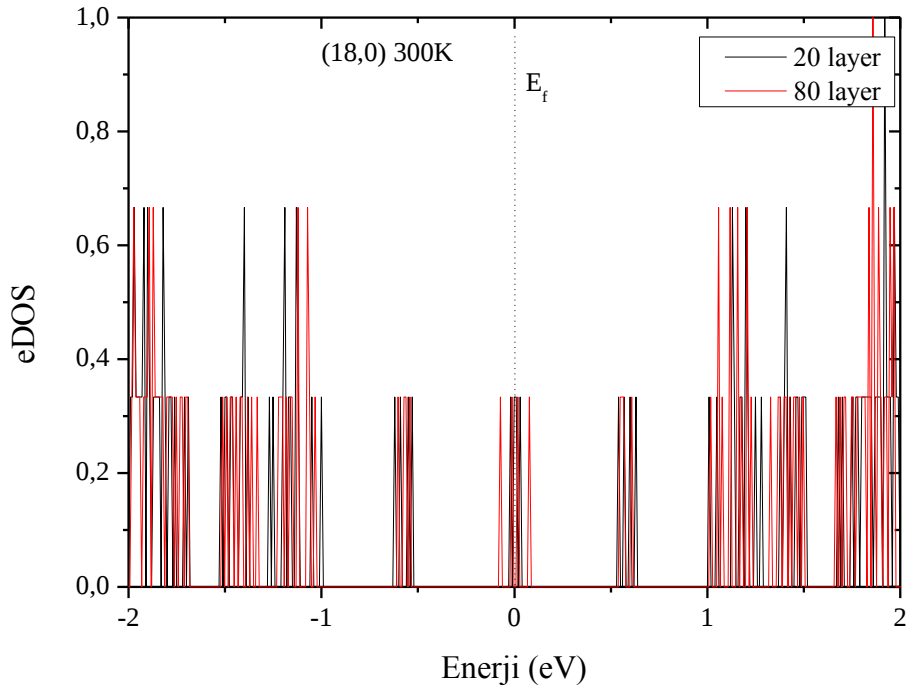
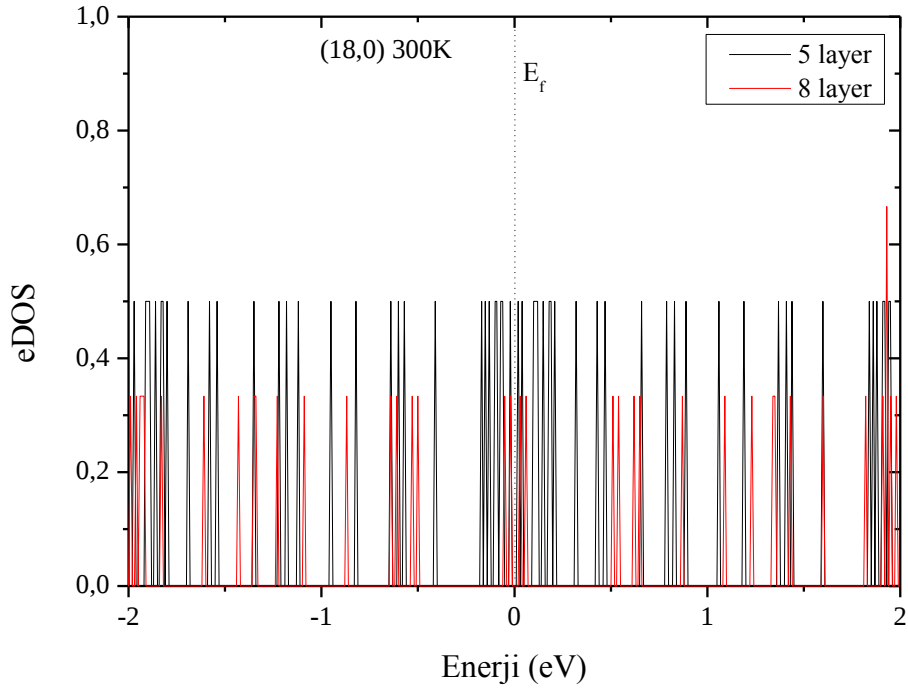
Şekil 5. 61 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta nanokuşak, 8 ve 20 katman simülasyon görüntüleri

Çizelge 5. 6 300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre Fermi enerjilerindeki değişim

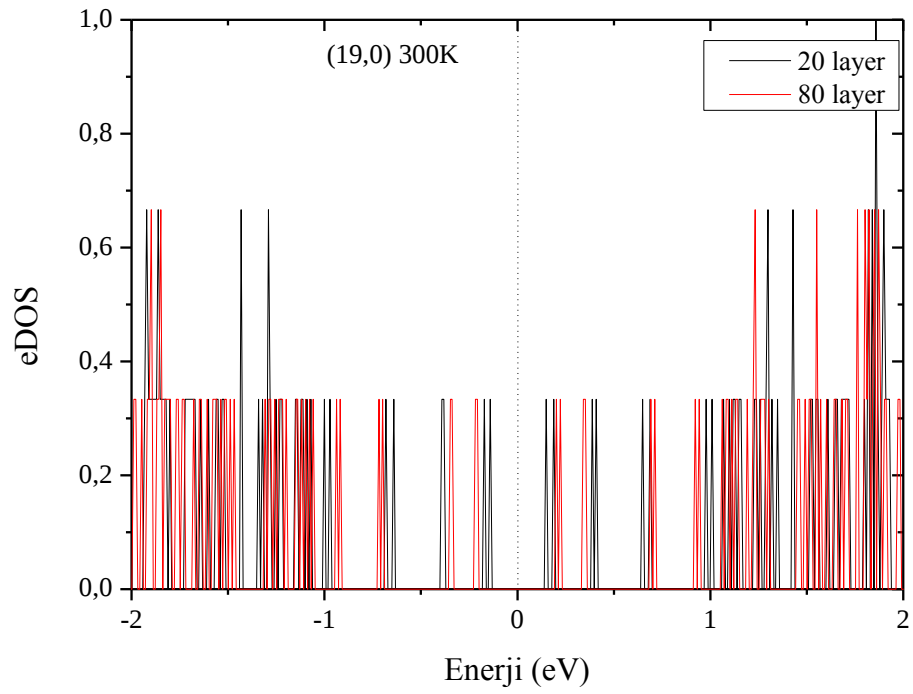
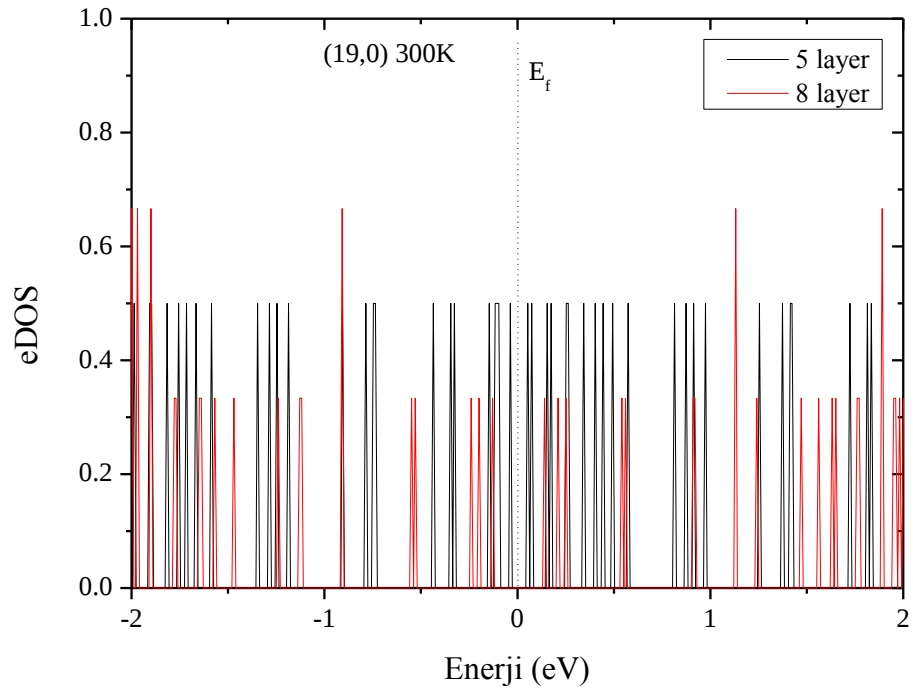
$T = 300K$	E_f			
	(18,0)	(19,0)	(20,0)	(22,0)
Nanokuşak	3,28096	3,35188	3,34293	3,30842
8 Katman	3,72449	3,72785	3,73087	3,72761
20 Katman	3,71467	3,71504	3,71855	3,71520
80 Katman	3,70176	3,70163	3,70545	3,70199

Şekil 5.62'de (18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğu ($eDOS$) grafiği çizilmiştir. Şekildeki kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini (E_f) göstermektedir. Fermi enerji seviyesi sıfır noktasına getirilerek grafikler oluşturulmuştur. Çizelge 5.6'da 300K sıcaklıkta (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre Fermi enerjilerindeki değişim verilmiştir. (18,0) zigzag nanokuşak ve 8 katman (18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu grafiklerinden enerji bant aralıkları 0,01 eV olarak hesaplandı. Benzer şekilde, (18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarındaki elektronik durum yoğunluğu grafiklerinden 20 ve 80 katmanlı TDKNT'lerin enerji bant aralığı (E_g) değerleri hesaplandı. Buna göre (18,0) zigzag TDKNT'nin sırasıyla 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralıkları 0,01 eV değerindedir.

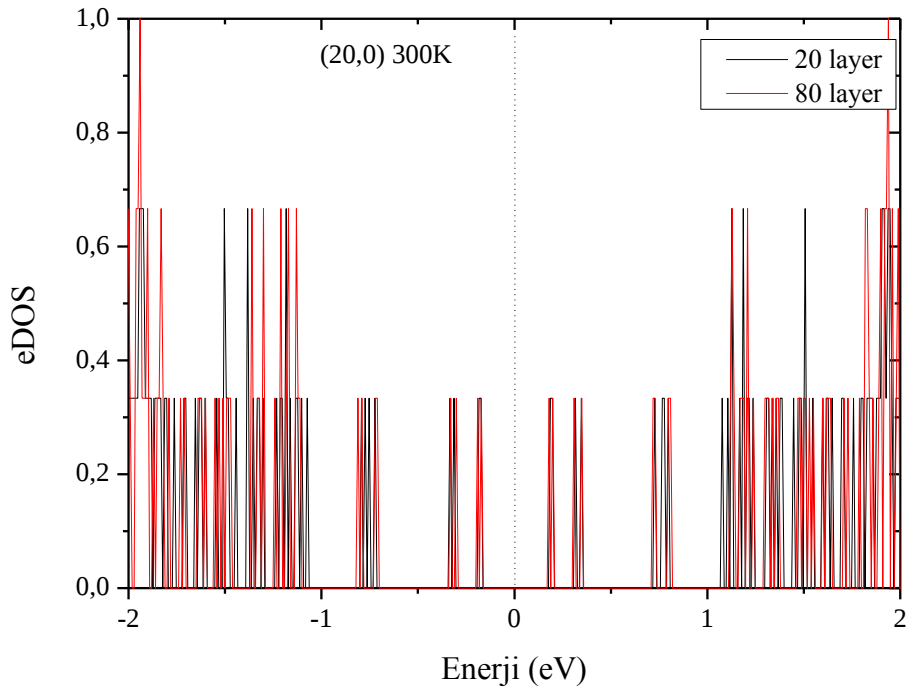
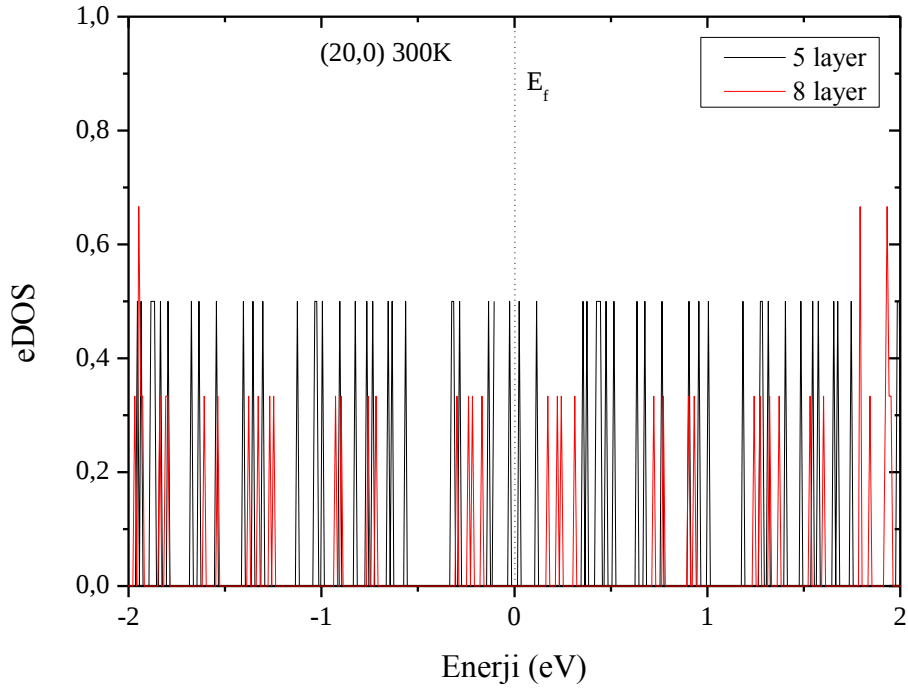
Şekil 5.63'deki histogram grafiklerinden, (19,0) zigzag nanokuşak ve 8 katman (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralıkları sırasıyla 0,04 ve 0,13 eV olarak hesaplandı. TDKNT'nin boyu 20 ve 80 katman olduğunda (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı değerleri sırasıyla 0,34 ve 0,36 eV değerindedir. Şekil 5.64'deki histogram grafiklerinden, (20,0) zigzag TDKNT'nin nanokuşak ve 8 katmandaki enerji bant aralıkları sırasıyla 0,02 ve 0,15 eV değerinde olduğu, 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralığı değerlerinin de sırasıyla 0,34, 0,35 eV olduğu hesaplandı. (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde histogram grafiklerinden nanokuşak ve 8 katman için enerji bant aralığının 0,02 ve 0,14 değerinde olduğu hesaplandı. (22,0) zigzag TDKNT'nin 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralığı sırasıyla 0,27 ve 0,28 eV değerinde olduğu hesaplandı (Şekil 5.65).



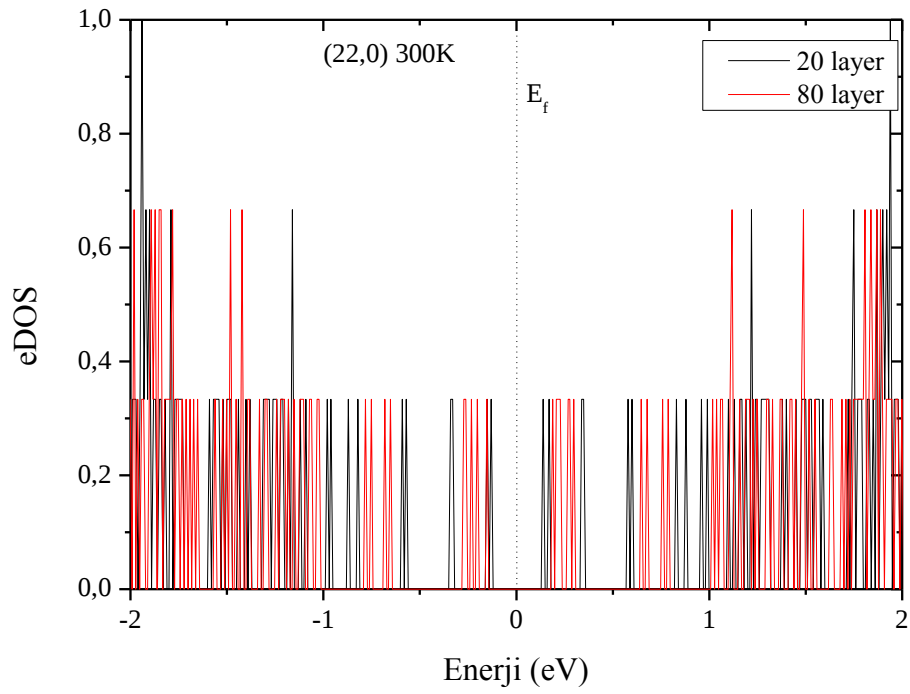
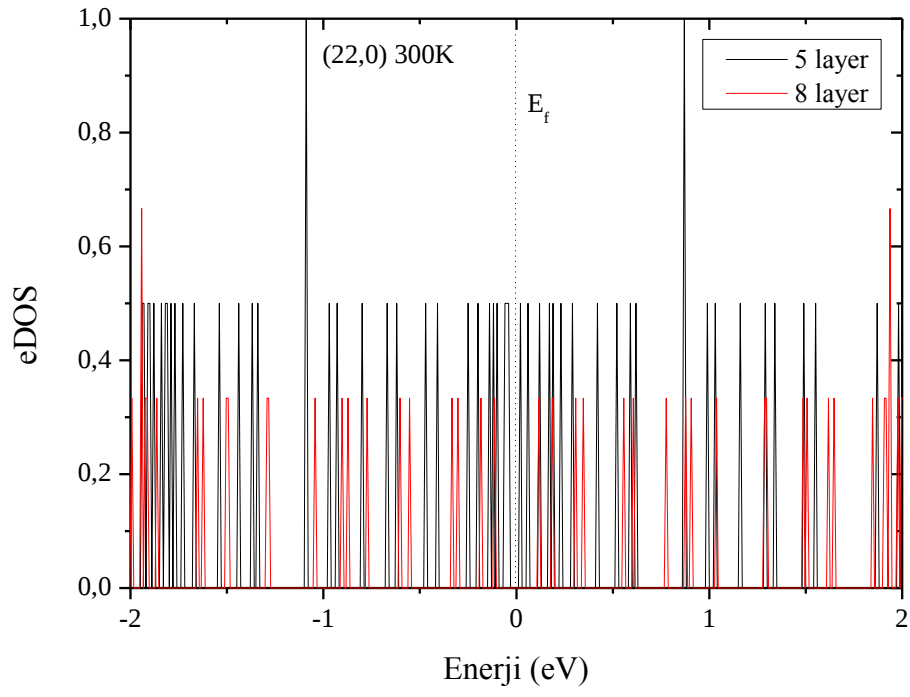
Şekil 5. 62 (18,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim



Şekil 5. 63 (19,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim



Şekil 5. 64 (20,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim



Şekil 5. 65 (22,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişim

5.2.1 Sonuçlar

İletken ve yüksek mukavemetli kompozitler, enerji depolama ve enerji dönüşüm cihazları, sensörler, alan emisyon ekranları, radyasyon kaynakları, hidrojen depolama ortamı, nanometre ölçekli yarı iletken cihazlar ve probalar dahil olmak üzere bir çok potansiyel uygulamalar karbon nanotüpler için önerilmektedir. Karbon nanotüplerin farklı üretim yöntemleriyle çeşitli boylarda üretilmesi hedeflenmektedir. Son yıllarda karbon nanotüplerin boyları üzerine deneysel çalışmalar giderek artmaktadır [83, 91-96]. Simülasyon çalışmalarımda TDKNT'lerin boyunu katman sayısı (n_{layer}) belirlemektedir. Buna göre, yarıçapları 7.05 ile 8.62 Å arasında değişen (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin, n_{layer} parametresine bağlı olarak elektronik özellikleri incelendi. Simülasyon çalışmalarında zigzag TDKNT'ler 300K sıcaklığında 3000 MD adım süresince simüle edilerek, karbon nanotüplerin boyunun enerji bant aralığına etkisi incelendi. Çalışılan nanokuşaklar (5 katmanlı) ve 8-20 ve 80 katmanlı zigzag TDKNT'lerin simülasyon görüntüleri verildi. Yapılan çalışmalarda çalışılan zigzag TDKNT'ler yapısal kararlılıklarını korumaktadır. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag nanokuşaklarla, 8 – 20 ve 80 katmandan oluşan zigzag TDKNT'lerin ortalama enerjilerindeki değişim hesaplandı. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin Fermi enerji seviyeleri belirlendi. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin katman sayılarına bağlı olarak $eDOS$ grafikleri çizildi. Fermi enerjisi civarında $eDOS$ grafiklerinden her bir katman sayısında zigzag TDKNT'lerin E_g değerleri hesaplandı (Çizelge 5.7). Örnek olarak; (19,0) zigzag TDKNT'nin sırasıyla nanokuşak, 8, 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralıkları 0,04, 0,13, 0,34 ve 0,36 eV değerindedir. (19,0) zigzag TDKNT'nin katman sayısına bağlı olarak elektronik durum yoğunluğundaki değişime bakıldığında, 20-80 katmanda enerji bant aralığında 0,02 eV'lik değişim gözlenirken, nanokuşak (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının, 8 katmanlı (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığına kıyasla daha düşük seviyede olduğu gözlemlendi.

Çizelge 5. 7 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta enerji bant aralığının TDKNT'nin boyuna göre değişimi

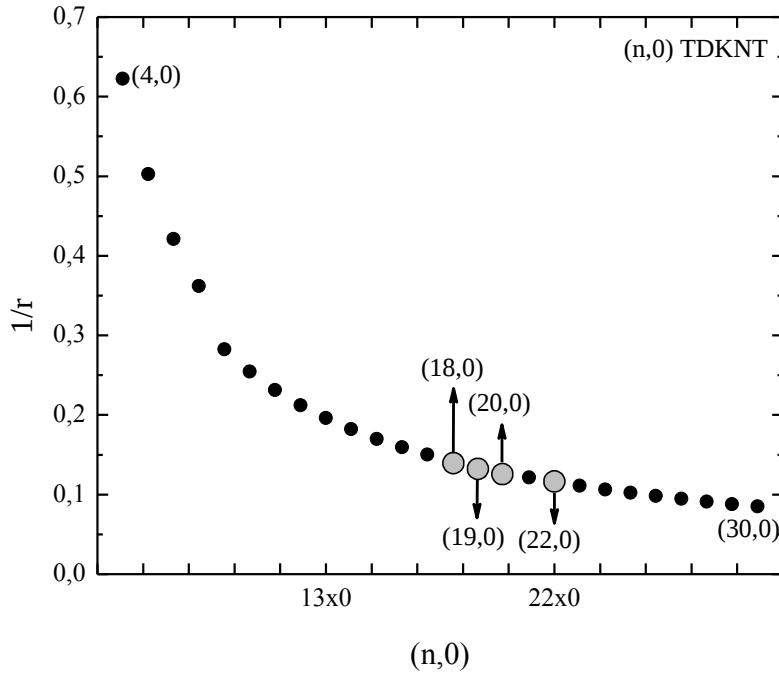
$T = 300K$	E_g (eV)			
	<i>Nanokuşak</i>	<i>8 Katman</i>	<i>20 Katman</i>	<i>80 Katman</i>
(18, 0)	0,01	0,01	0,01	0,01
(19, 0)	0,04	0,13	0,34	0,36
(20, 0)	0,02	0,15	0,34	0,35
(22, 0)	0,02	0,14	0,27	0,28

5.3 Düşük – Yüksek Sıcaklıklarda Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri

TDKNT'ler kullanıldıkları elektronik devrelerde ani olarak yerel sıcaklık artışlarına uğramaktadır. Sıcaklık, TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkilediğinden nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından kritik bir parametredir. Bu yüzden TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklardaki davranışlarının incelenmesi önem kazanmaktadır. Nano-boyutlu malzemelerin üretimi, fiziksel ve kimyasal özelliklerinin laboratuvarla deneysel incelenmesi zor ve pahalı olduğundan bilgisayar simülasyonu ile tasarımları ve incelenmeleri önemlidir.

Doktora tezimde, yarıçapları sırasıyla, 7.05, 7.45, 7.84 ve 8.62 Å olan (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda fiziksel (bağ-açısı dağılım fonksiyonu (*BADF*), bağ-uzunluğu dağılım fonksiyonu (*BUDF*), radyal dağılım fonksiyonu (*RDF*), atomik koordinasyon sayısı (*AKS*)) ve elektronik özellikleri (Fermi enerji seviyesi (E_f), elektronik durum yoğunlukları (*eDOS*), enerji bant aralıkları (E_g)) sıcaklığa bağlı olarak N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak incelendi. Simülasyon çalışmalarında TDKNT'lerin boyunu belirleyen katman sayısı 20 olarak belirlendi. Buna göre (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin atom sayıları sırasıyla 360, 380, 400 ve 440'tır.

Literatürde düşük – yüksek sıcaklıklarda zigzag TDKNT'lerin sistematik olarak çalışılmadığı, çalışılan TDKNT'lerinde sadece küçük yarıçap aralığına sahip TDKNT'lerden seçildiği literatür çalışmalarında görülmektedir [20]. Simülasyon çalışmalarında, büyük yarıçap aralığına sahip TDKNT'lerin literatürde çalışılmamasının temel nedeni, atom sayılarının fazla olması ve bu nedenle simülasyon sürelerinin uzun olmasıdır. Simülasyon çalışmalarında 7-9 Å yarıçapa sahip (*n*, 0) zigzag TDKNT'ler simüle edilmiştir (Şekil 5.66). Diğer bir çalışma zorluğunda sıcaklık değişimini incelemenin zorluğudur. N-Mertebe SBMD simülasyon yöntemi, simülasyon zamanının sistemdeki atom sayısı (*N*) ile doğru orantılı olarak değişmesi, simülasyonların gerçek uzayda yapılıyor olması ve simülasyon yönteminin düşük – yüksek sıcaklık çalışmalarına elverişli olması nedeniyle bu zorlukları ortadan kaldıran önemli bir yöntemdir.



Şekil 5. 66 (n,0) Zigzag TDKNT'lerin yarıçaplarının karşılaştırılması

Simülasyon çalışmalarında, periyodik sınır koşulları KNT eksenine (z – eksenine) boyunca uygulanmıştır. Düşük – yüksek sıcaklık çalışmalarında (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin simülasyonları, moleküler adım zamanı $\Delta t = 1fs$ alınarak 3000 MD adım boyunca yapıldı. Simülasyon süresince (3ps) çalışılan her TDKNT'nin yapısal kararlılığı korunmaktadır.

Düşük sıcaklık çalışmaları, 0.1K'den 20K'lik sıcaklık artışıyla oda sıcaklığına kadar (yaklaşık olarak 300K'e kadar) sistematik olarak çalışıldı. Yüksek sıcaklık çalışmaları, oda sıcaklığından (300K'den) 300K'lik artışlarla yapısal kararlılığın bozulduğu sıcaklık değerine kadar çalışıldı (Çizelge 5.8). Düşük – yüksek sıcaklık simülasyonlarında, ısıtma süreçlerinde elektronik sıcaklık ($k_B T$) değeri çalışılan sıcaklık değerine göre hesaplanmıştır. Örneğin; 300K sıcaklık değerinde $k_B T = 0,025$ eV alınmıştır.

Çizelge 5. 8 Çalışan düşük – yüksek sıcaklık aralıkları

Düşük Sıcaklık Çalışmaları (T(K))			Yüksek Sıcaklık Çalışmaları (T(K))	
0.1	100	200	300	1800
20	120	220	600	2100
40	140	240	900	2400
60	160	260	1200	2700
80	180	280	1500	3000

TDKNT'lerin özellikleri, simetri özelliklerini belirleyen kiral vektörüne ($\vec{C}_h = (n, m)$) bağlı olarak değişmektedir. Zigzag TDKNT'ler $\vec{C}_h = (n, 0)$ notasyonu ile verilir. TDKNT'ler n ve m indislerine bağlı olarak;

- i. $(n - m) = 3q$
- ii. $(n - m) = 3q + 1$
- iii. $(n - m) = 3q + 2$

üç grupta toplanmıştır. $(n - m) = 3q$ grubundaki zigzag TDKNT'ler metalik yarı iletken davranış gösterirken, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT'ler yarı iletken davranış gösterirler. Doktora tezimde düşük – yüksek sıcaklık çalışmalarında çalıştığım (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler bu özellik göz önünde bulundurularak seçilmiştir (Çizelge 5. 9).

Çizelge 5. 9 Zigzag TDKNT'lerin gruplandırılması

	$(n - m) = 3q$	$(n - m) = 3q + 1$	$(n - m) = 3q + 2$
(n, 0)	(18,0)	(19,0), (22,0)	(20,0)

Simülasyon çalışmalarında her bir moleküler dinamik adımda çalışılan TDKNT atomlarının konum ve hızları hesaplanarak kinetik enerji hesabı yapılır. N adım sayısı, $v_i(t_n)$ sistemdeki atomum hızı olmak üzere zamana göre ortalama kinetik enerji;

$$\langle KE_i \rangle = \frac{m}{2N} \sum_n^N v_i^2(t_n) = \left\langle \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle \quad (5.2)$$

hesaplanır. k_B , Boltzmann sabiti olmak üzere;

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle = \frac{3}{2} k_B T_i \quad (5.3)$$

kinetik enerjiden sıcaklığa geçiş yapılmış olur.

$k_B = 8,617332 \times 10^{-5} eVK^{-1}$ olmak üzere, 300K sıcaklığındaki sistemin ortalama kinetik enerjisi;

$$\frac{3}{2} k_B T_i = \frac{3}{2} \cdot 8,617332 \times 10^{-5} eVK^{-1} \cdot 300K = 0,03878$$

olarak hesaplanır.

Paralel $O(N)$ SBMD simülasyon metodunda, itici potansiyel (U_{rep}), kinetik enerji (E_{kin}) ve bant yapısı enerjisi (E_{bs}) toplam enerjiyi oluşturmaktadır. Sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T' 'nin değişimi Şekil 5.67 – 5.70'de gösterilmiştir.

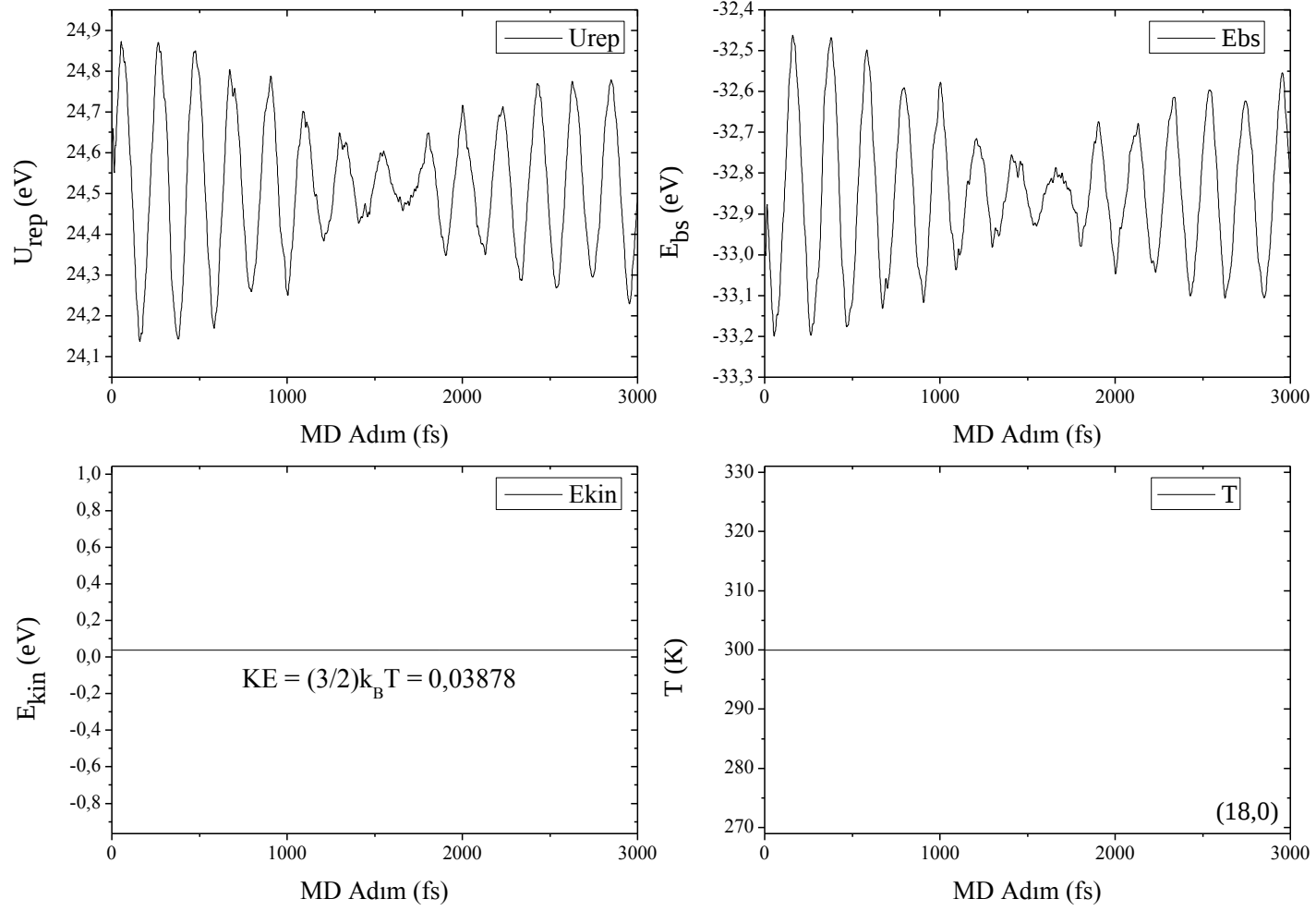
Simülasyonlarda, elektronik durum yoğunlukları aşağıdaki formüller kullanılarak hesaplanmaktadır;

$$\rho(\epsilon) = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{N(\epsilon - \epsilon) - N(\epsilon)}{\epsilon} \quad (5.4)$$

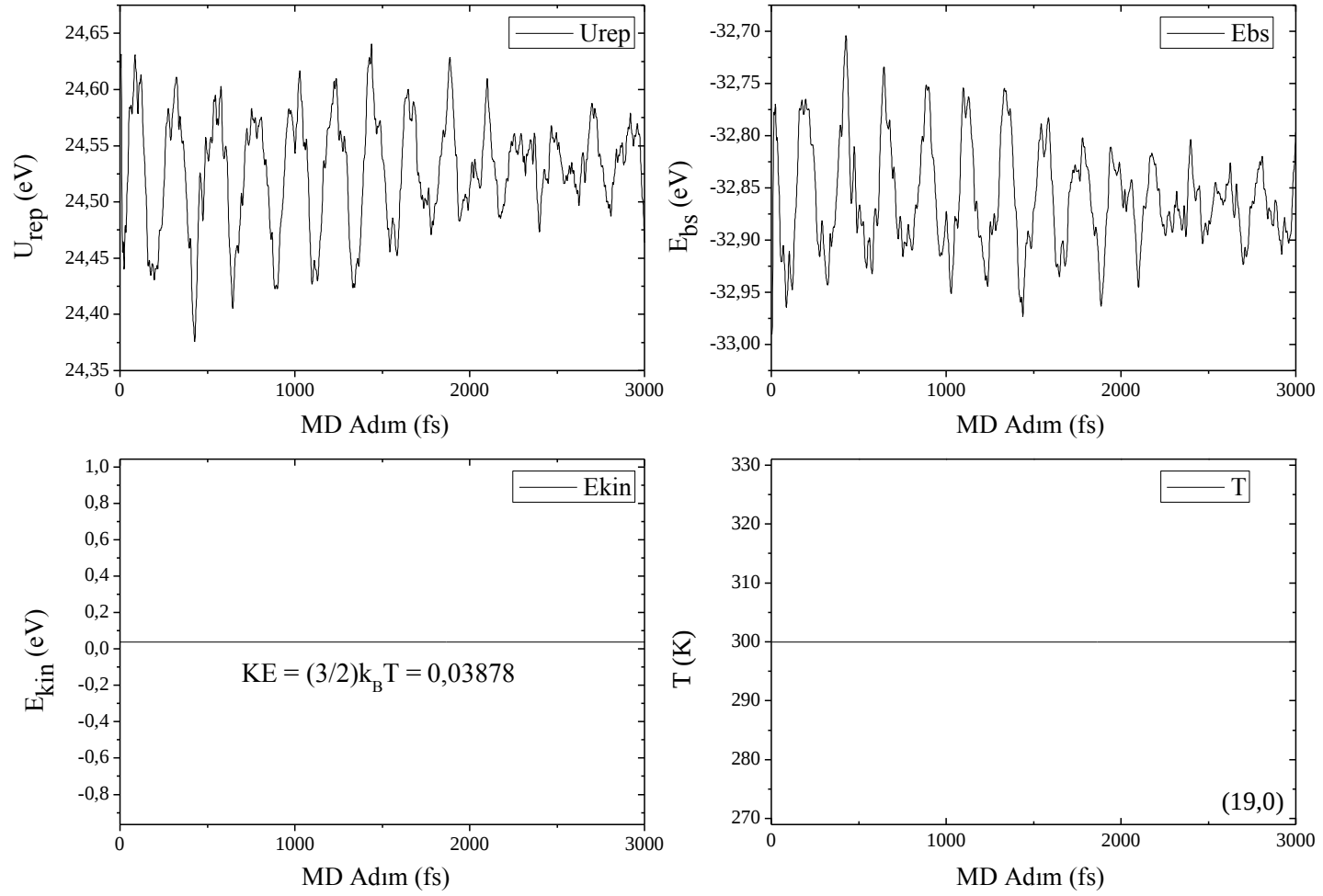
N sistemdeki elektron sayısı olmak üzere;

$$N(\epsilon) = \sum_{i=1}^{N_{cell}} \sum_{j=1}^{4N_{at}} \frac{2}{1 + f\left(\frac{E - \epsilon_i}{k_{BT}}\right)} * \sum_{j=1}^{4N_{at}} |H(j, i)|^2 \quad (5.5)$$

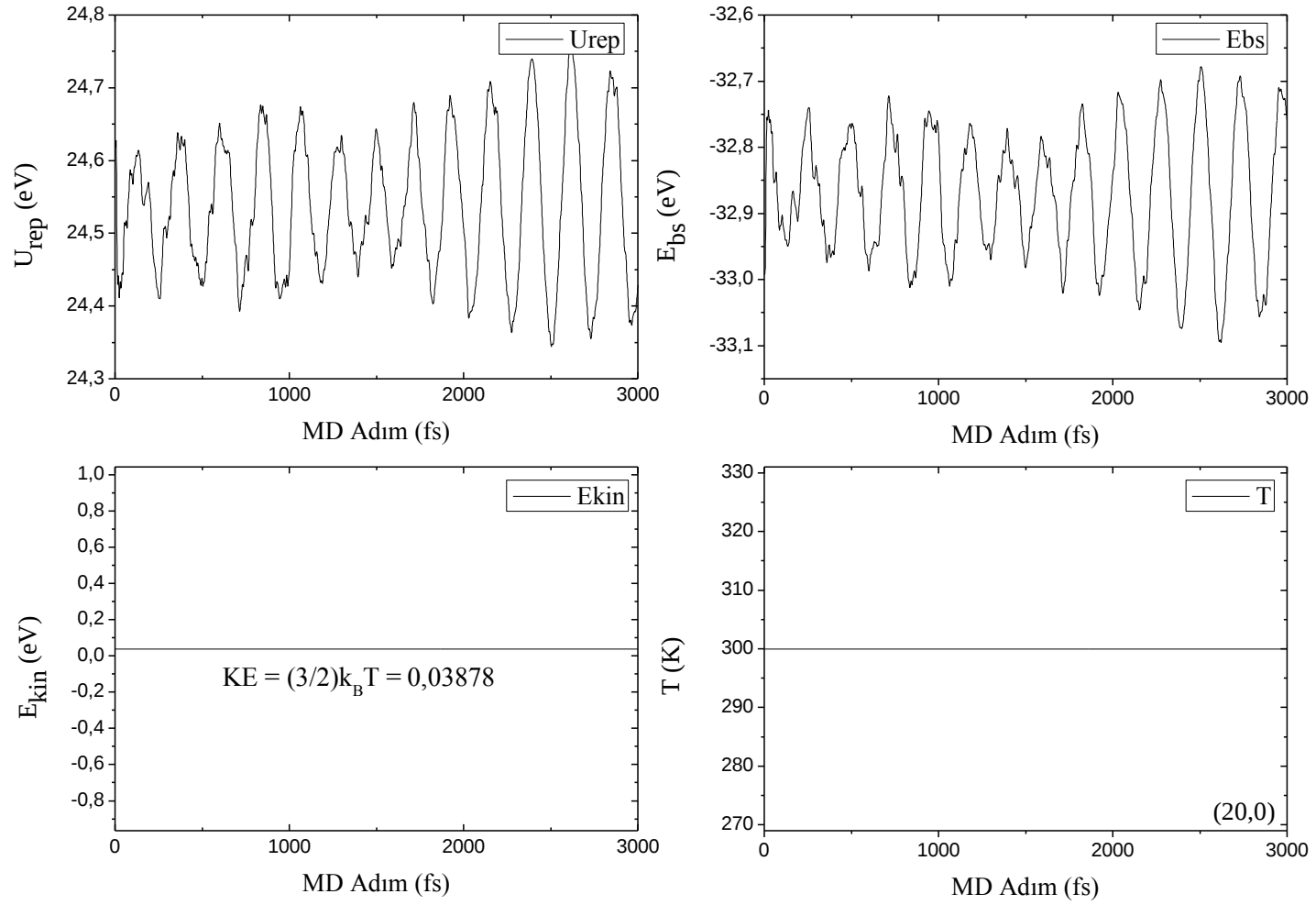
olarak hesaplanır [54].



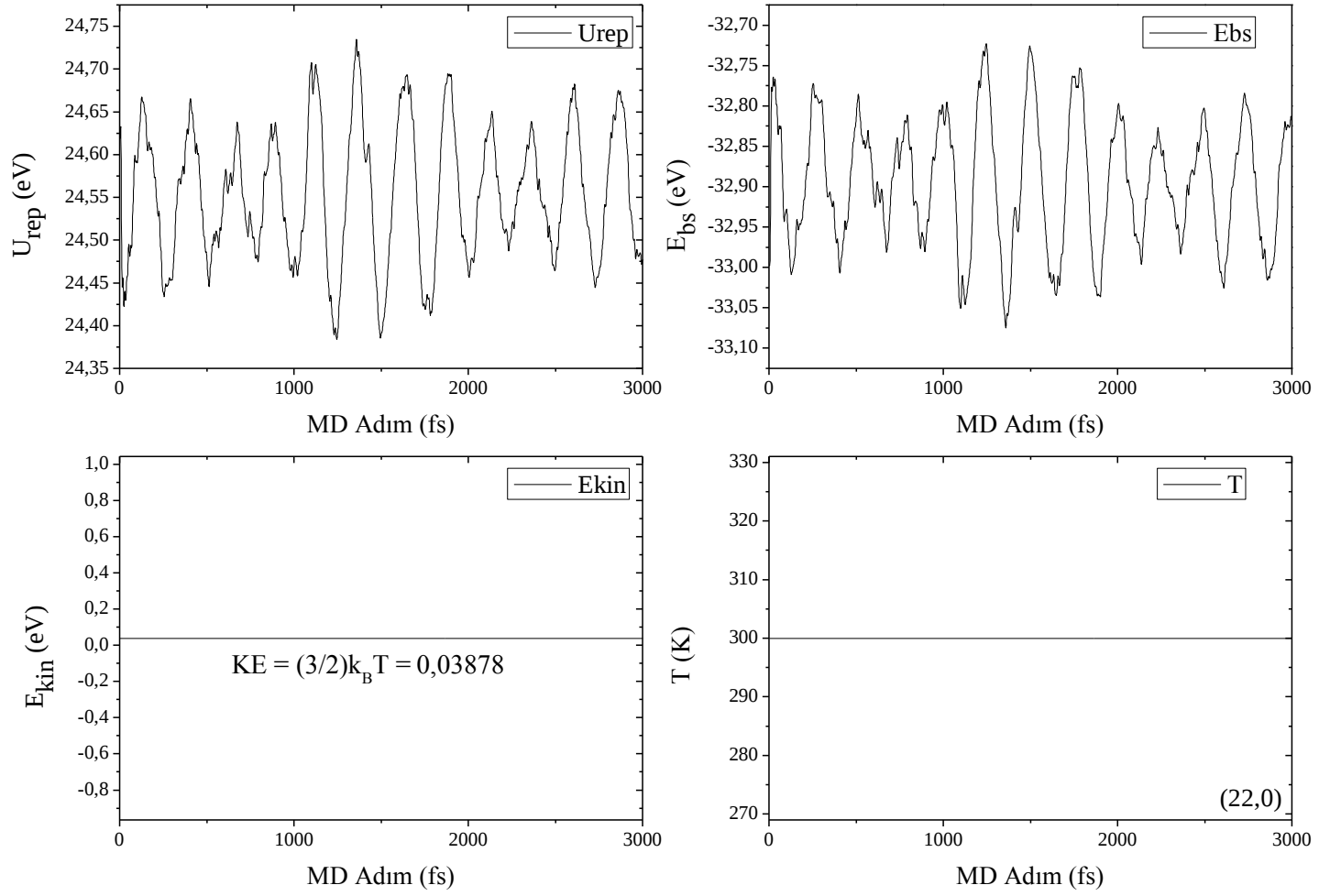
Şekil 5. 67 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi



Şekil 5. 68 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi



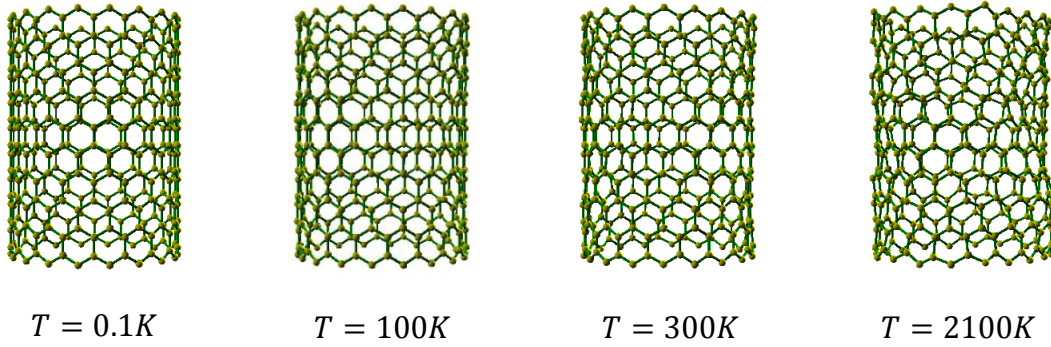
Şekil 5. 69 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi



Şekil 5. 70 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta denge durumunda U_{rep} , E_{bs} , E_{kin} ve T 'nin değişimi

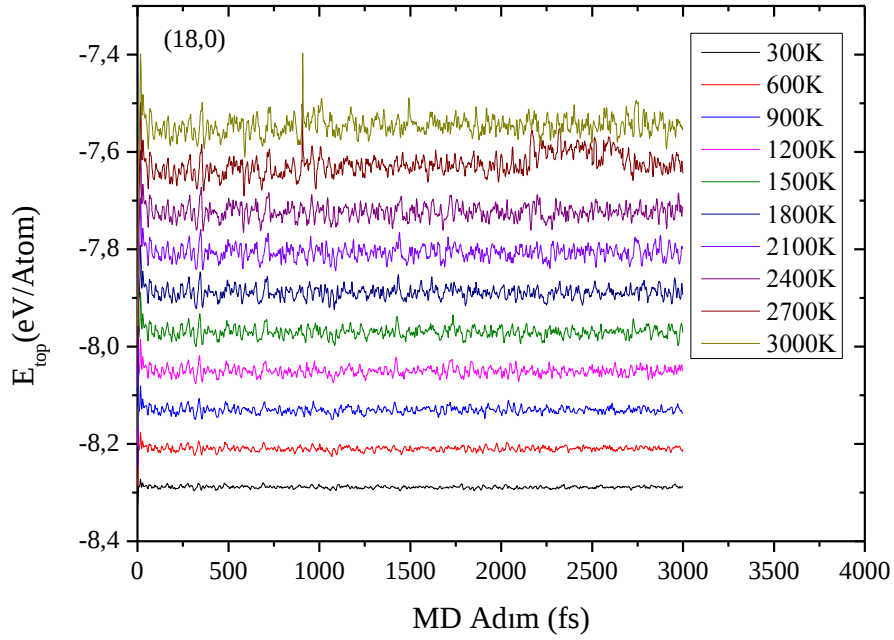
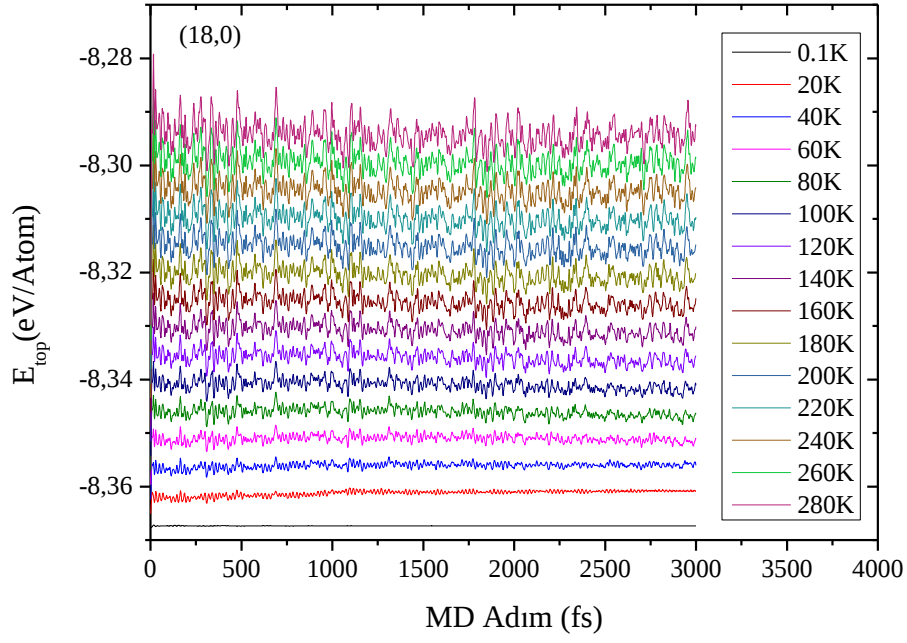
5.3.1 (18,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüpün Fiziksel ve Elektronik Özellikleri

(18,0) zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklık çalışmaları 0.1K'den 3000K'e kadar incelendi. Düşük sıcaklık çalışmaları 0,1K'den 20K'lik sıcaklık artışıyla oda sıcaklığına kadar, yüksek sıcaklık çalışmaları ise 300K'den TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar 300K'lik sıcaklık artışıyla sistematik olarak çalışıldı. (18,0) zigzag TDKNT'nin simülasyon görüntüleri Şekil 5.71'de gösterilmiştir.

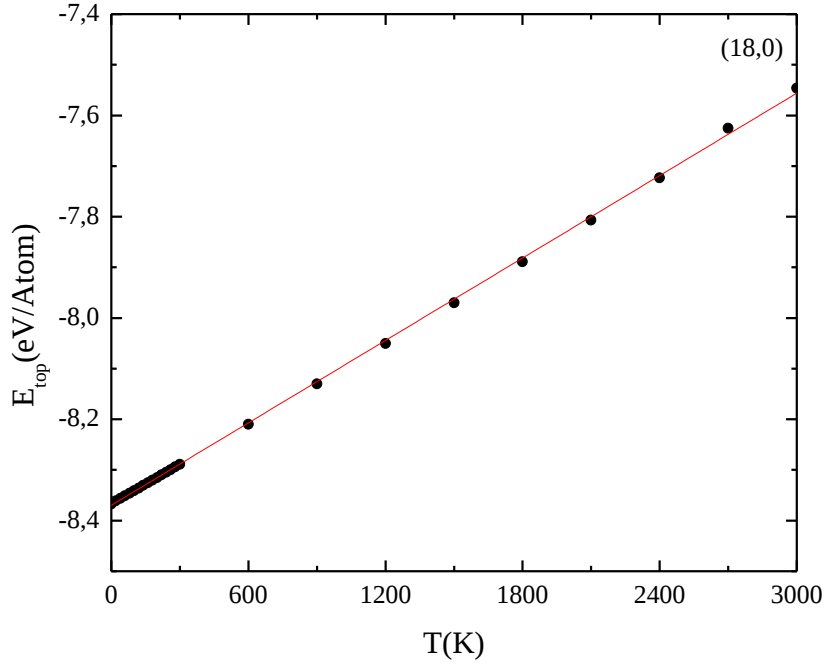
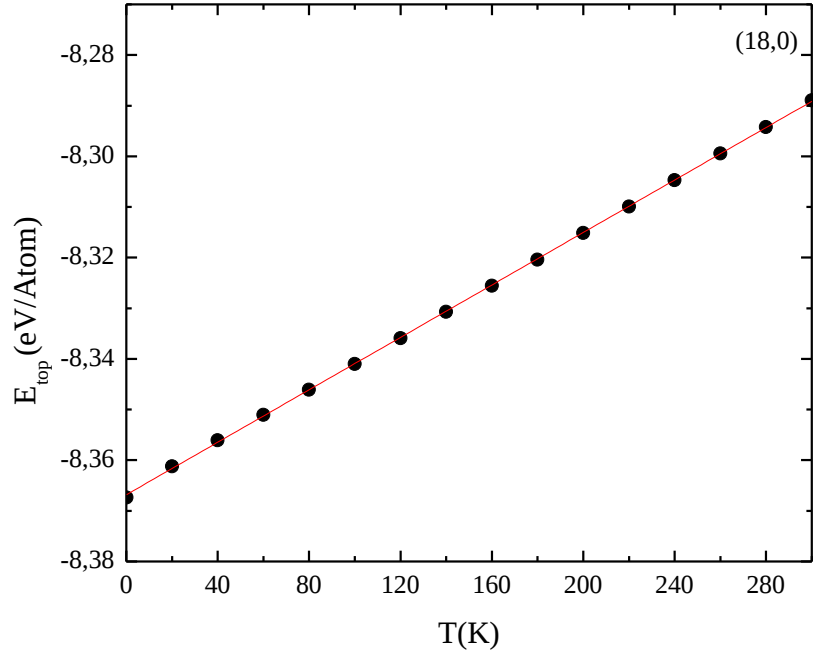


Şekil 5. 71 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 100, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri

Şekil 4.9'da sistemin 300K sıcaklık değerinde, 1fs moleküler dinamik adım zamanı için 3000 MD adımı süresince kararlı enerji seviyesinde olduğu görülmektedir. Şekil 4.9'daki lineer fit, moleküler dinamik adım boyunca ortalama enerjiyi göstermektedir. (18,0) zigzag TDKNT 3000 MD adım boyunca ortalama -8,28895 eV değerinde salınım yapmaktadır. Düşük – yüksek sıcaklıklarda simülasyon süresince toplam enerjideki değişim Şekil 5.72'de gösterilmiştir. Çalışmaların yapıldığı sıcaklık değerlerinde yapısal kararlılık korunmaktadır.

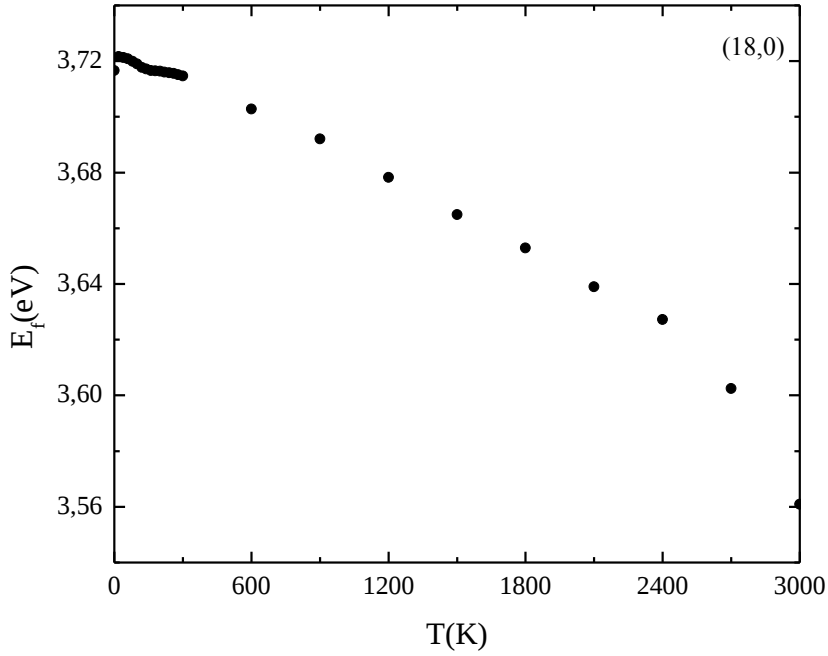


Şekil 5. 72 Simülasyon süresince (18,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi



Şekil 5. 73 (18,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi

(18,0) zigzag TDKNT'nin her bir sıcaklık değeriinde toplam enerjisinin ortalama değeri alınarak atom başına ortalama toplam enerji değeri hesaplanmıştır. (18,0) zigzag TDKNT için düşük – yüksek sıcaklıklarda ortalama toplama enerji değişimini gösterilmiştir (Şekil 5.73). Şekilden de görüldüğü üzere, sıcaklık arttıkça atom başına düşen toplam enerji artmıştır. Toplam enerji sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak artmaktadır.

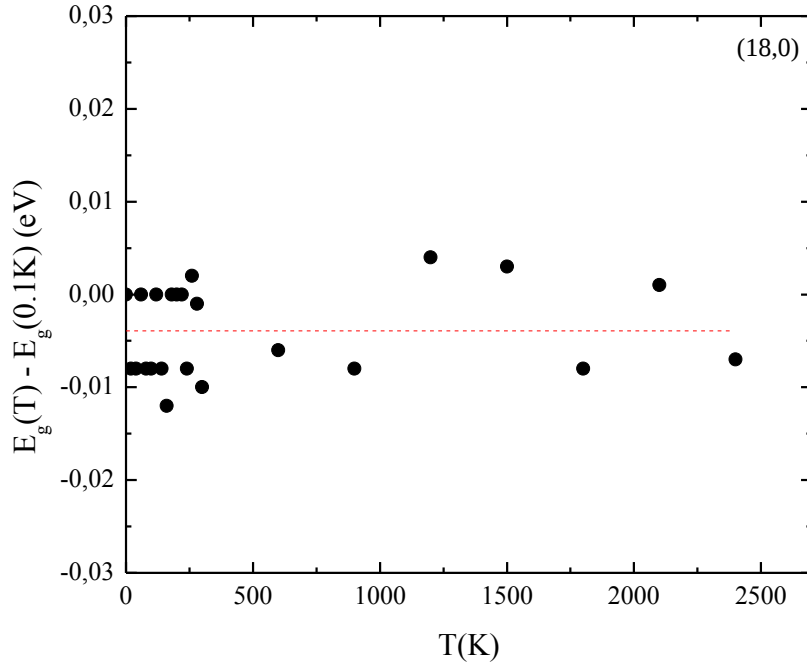


Şekil 5. 74 (18,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi

(18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık değerlerinde sistematik olarak çalışılarak oluşturuldu. Şekil 5.74'de düşük – yüksek sıcaklıklardaki Fermi enerjisindeki değişim görülmektedir. 300K - 3000K yüksek sıcaklık aralığında Fermi enerjisi sıcaklığa bağlı olarak lineer azalmaktadır. 0.1K – 300K düşük sıcaklık aralığında önce artan sonra azalan bir davranış görülmektedir.

(18,0) zigzag TDKNT için Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık değerleri için hesaplanmıştır. Düşük – yüksek sıcaklık aralığında (18,0) zigzag TDKNT'nin *eDOS* grafikleri çizilmiştir. Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerine bakılarak (18,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralıkları hesaplanmıştır. Şekil 5.75'de (18,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. $(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT metalik davranış sergilemektedir. (18,0) zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklığında enerji bant aralığı 0.02eV

iken bu değ er 300K sıcaklığında 0.01eV, 1200K sıcaklığında 0.024eV değ erindedir. Sıcaklığa baėlı olarak enerji bant aralığındaki değ işim incelendiėinde, (18,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının 0.024 – 0.008 eV aralığında değ iştii g r ld .



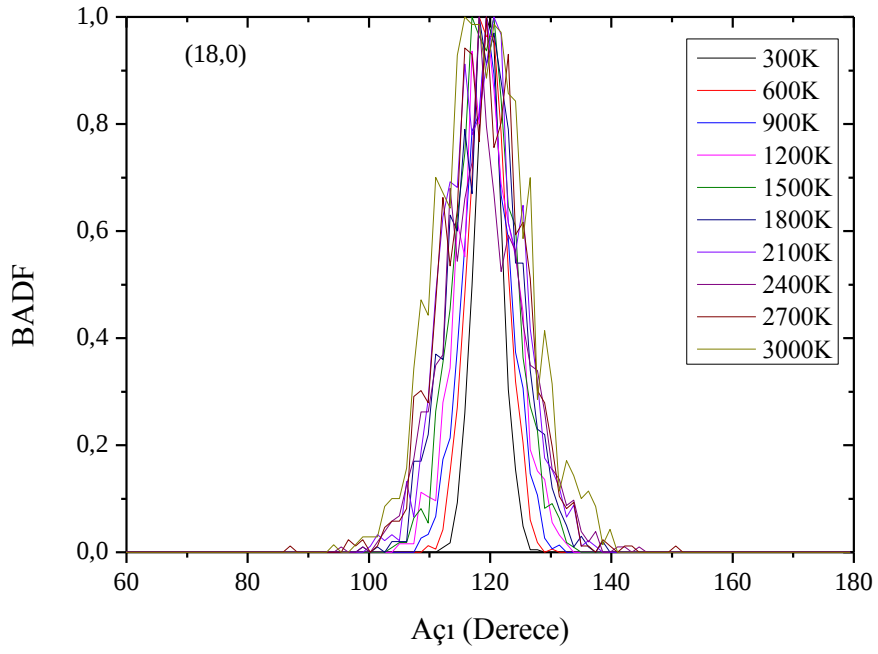
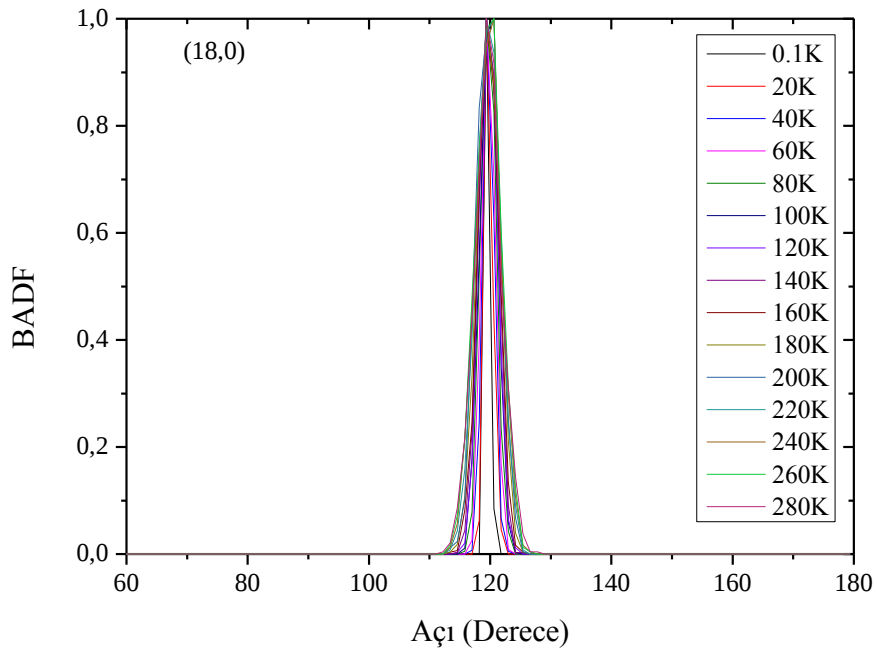
 ekil 5. 75 (18,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değ iřimi

(18,0) zigzag TDKNT'nin d ř k – y ksek sıcaklıklarda fiziksel  zelliklerindeki değ iřim grafiklerle incelenmiřtir ( ekil 5.76 – 5.79).  ekil 5.76'da (18,0) zigzag TDKNT'nin baė – a ısı daėılım fonksiyonunun sıcaklığa g re değ iřimi g r lmektedir. TDKNT'i oluřturan grafin levhanın altıgen  rg s ndeki karbon atomları baėlar arasındaki a ı 120 'dir. 300K sıcaklıkta denge durumunda ($\varepsilon = 0$) (18,0) TDKNT'nin i in altıgen  rg deki baė a ısı daėılım fonksiyonu 119.4  değ erinde keskin bir tepe noktası verdi. Sıcaklık artıřına baėlı olarak atomlar arasındaki kinetik enerjinin artması tepe noktasından sapmaları meydana getirmiřtir. Y ksek sıcaklıklarda daėılımın geniřliėinin arttıėı g r lmektedir. Bu durum (18,0) zigzag TDKNT'lerin yapısıyla uyumludur [97]. Y ksek sıcaklıklarda baė a ısı daėılım fonksiyonu 115.8  – 120.6  aralığında tepe noktaları vermektedir.

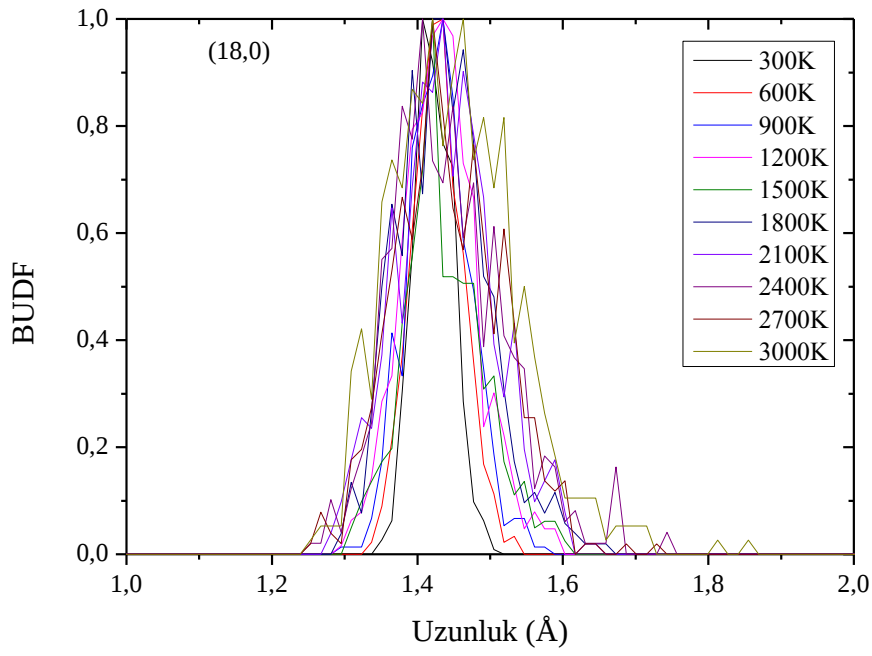
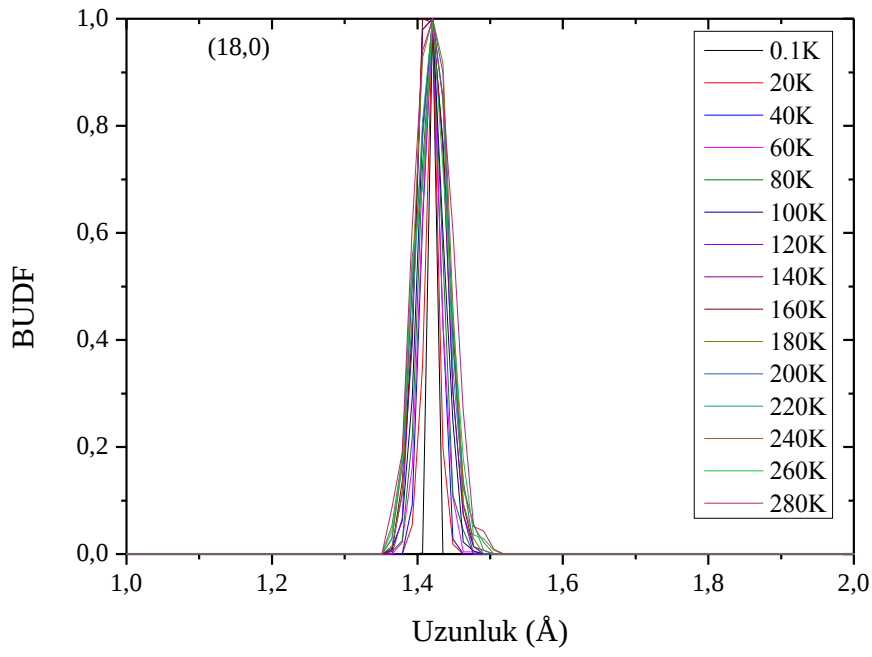
Şekil 5.77’de (18,0) zigzag TDKNT’nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. 300K’de sıcaklık değerinde bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonu 1.407Å’da keskin bir tepe verdi. (18,0) zigzag TDKNT’e uygulanan sıcaklık değerine göre de bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun değişim gösterdiği, yüksek sıcaklıklara çıkıldığında dağılımın genişliğinin arttığı görülmektedir.

Radyal dağılım fonksiyonu TDKNT içerisindeki referans alınan bir karbon atomunun komşu atomlarla olan mesafelerini göstermektedir. Şekil 5.78’deki radyal dağılım fonksiyonuna bakıldığında, 300K’de atomlar arası uzaklıklara ait ilk üç tepenin, sırasıyla 1.42, 2.44 ve 2.78Å değerlerinde olduğu görülmektedir. Bu durum (18,0) zigzag TDKNT’lerin yapısıyla uyumludur. Uygulanan sıcaklığa bağlı olarak atomların konumlarındaki değişimler nedeniyle tepe noktalarında değişimler gözlemlendi.

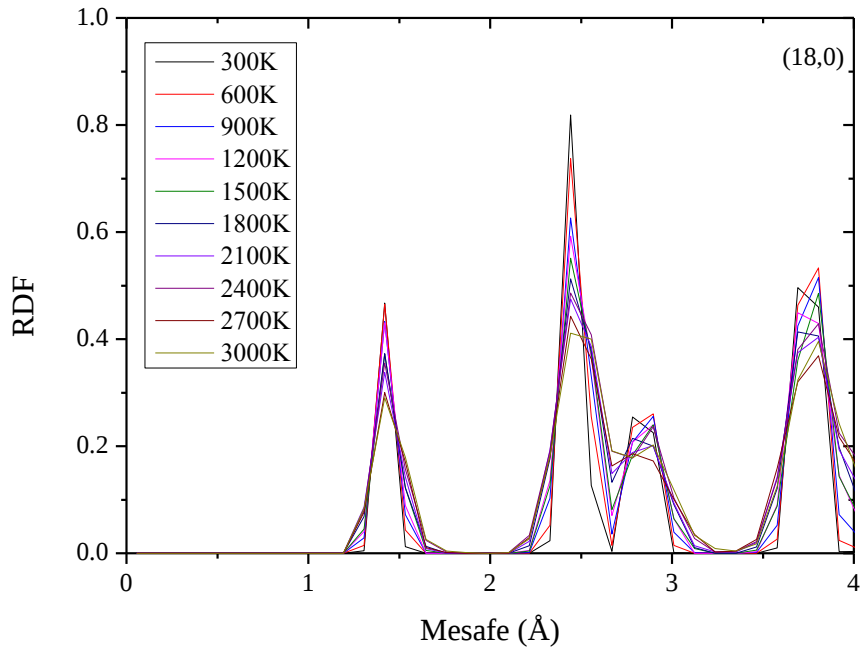
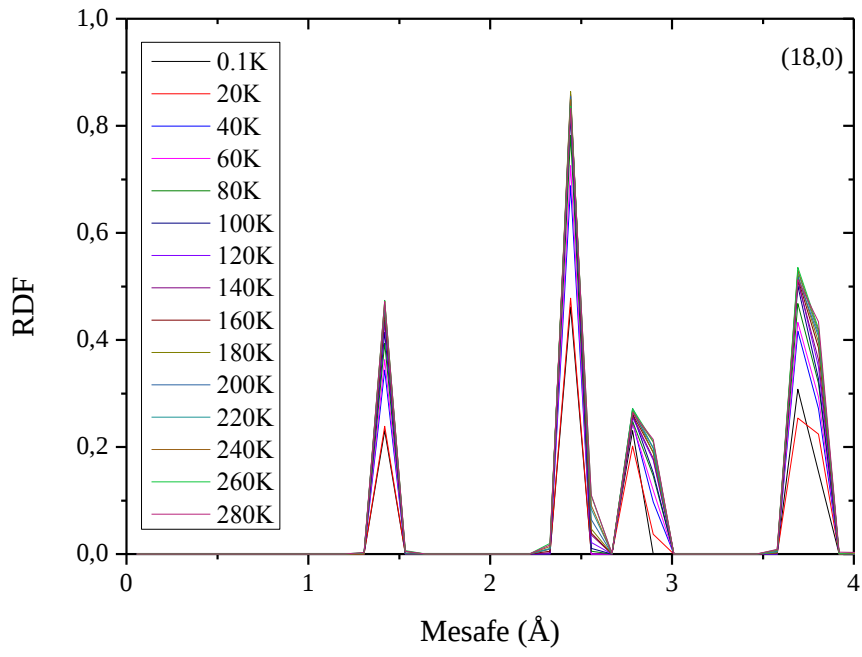
Şekil 5.79’da (18,0) zigzag TDKNT’nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. Altıgen örgüdeki her karbon atomu komşu atomlarla üç bağ yapmaktadır. Atomik koordinasyon sayısı, düşük – yüksek sıcaklıklarda atomların komşu atomlarla üç bağ yaptığını göstermektedir. 2700K sıcaklık değerinden itibaren yapıdan atomlar kopmaya başlamaktadır. Bu nedenle 2700 – 3000K sıcaklık değerinden itibaren bazı atomlar ikili bağ yapmaya başlamışlardır.



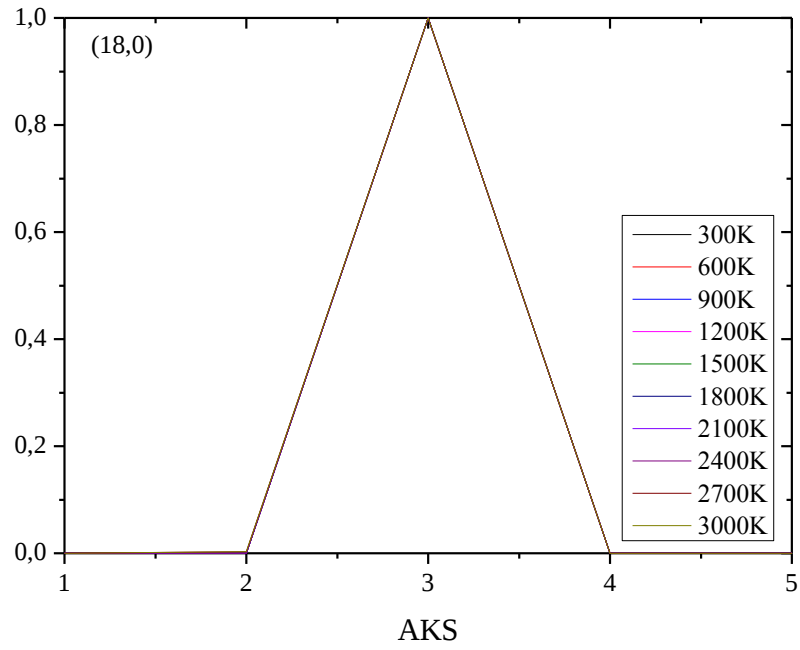
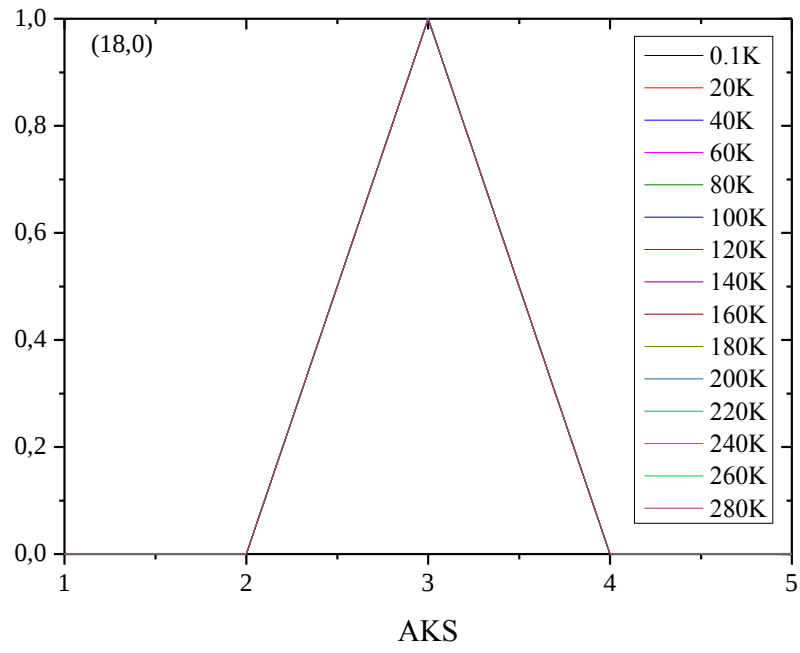
Şekil 5. 76 (18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 77 (18,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



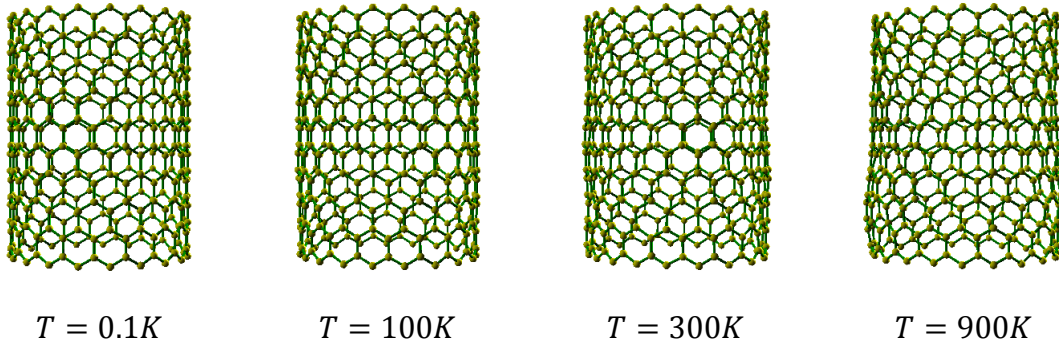
Şekil 5. 78 (18,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



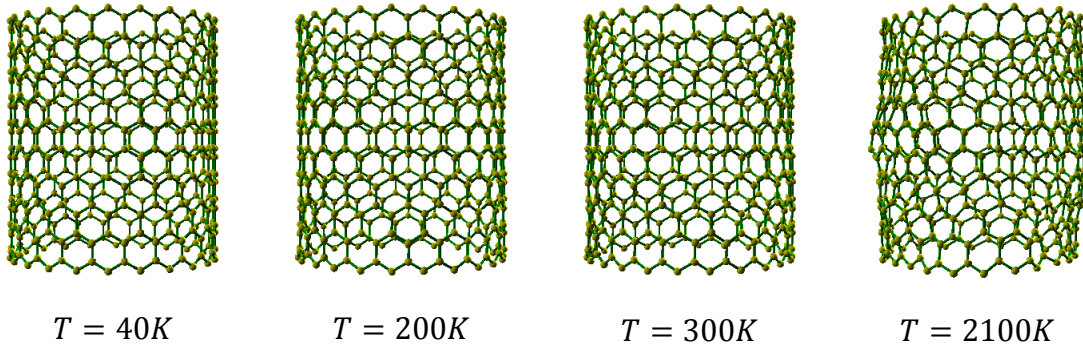
Şekil 5. 79 (18,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi

5.3.2 (19,0) ve (22,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sıcaklık (düşük – yüksek) çalışmaları 0.1K'den 3000K'e kadar incelendi. 0,1K'den 20K'lik sıcaklık artışıyla oda sıcaklığına kadar düşük sıcaklık çalışmaları, 300K'den TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar yüksek sıcaklık çalışmaları 300K'lik sıcaklık artışıyla çalışıldı. Şekil 5.80 ve 5.81'de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin çeşitli sıcaklıklarda simülasyon görüntüleri gösterilmiştir.



Şekil 5. 80 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 100, 300 ve 900K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri



Şekil 5. 81 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 40, 200, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri

Şekil 4.9 ve 4.10'da, (19,0) ve (22,0) TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerinde, 1fs moleküler dinamik adım zamanı için 3000 MD adımı süresince kararlı enerji seviyesinde olduğu görülmektedir. Şekillerdeki lineer fit, moleküler dinamik adım boyunca ortalama enerjiyi göstermektedir. Buna göre sırasıyla, (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler ortalama -8,29277 ve -8,30136 eV değerlerinde salınım yapmaktadır. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda simülasyon süresince toplam enerjilerindeki değişim Şekil 5.82 ve 5.86'de gösterilmiştir. Şekil 5.82 ve 5.86'da yüksek sıcaklıklarda (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin yapısının bozulduğu durumlar Bölüm 5.4 “Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Dayanıklılıkları” bölümünde anlatılacaktır.

Şekil 5.83 ve 5.87'de sırasıyla (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin, her bir sıcaklık değerinde toplam enerjisinin ortalama değeri alınarak atom başına ortalama toplam enerji değeri hesaplanmıştır. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler için düşük – yüksek sıcaklıklarda ortalama toplam enerji değişimini gösterilmiştir (Şekil 5.83 – 5.87). Şekilden de görüldüğü üzere, sıcaklık artışına bağlı olarak atom başına düşen toplam enerji artmıştır. Toplam enerji sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak artmaktadır.

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık değerlerinde sistematik olarak çalışılarak Şekil 5.84 ve 5.88 oluşturuldu. Sırasıyla Şekil 5.84 ve 5.88'de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklardaki Fermi enerjisindeki değişim görülmektedir. (19,0) TDKNT için, Fermi enerjisi, düşük sıcaklıklarda doğrusal olmayan bir davranış sergilerken, yüksek sıcaklıklarda sıcaklığa bağlı olarak doğrusal azalmaktadır. (22,0) TDKNT için, düşük – yüksek sıcaklık aralığında Fermi enerjisi sıcaklığa bağlı olarak doğrusal bir şekilde azalmaktadır.

(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler için Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık değerleri için hesaplanmıştır. Düşük – yüksek sıcaklık aralığında (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin *eDOS* grafikleri çizilmiştir. Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerine bakılarak (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıkları hesaplanmıştır.

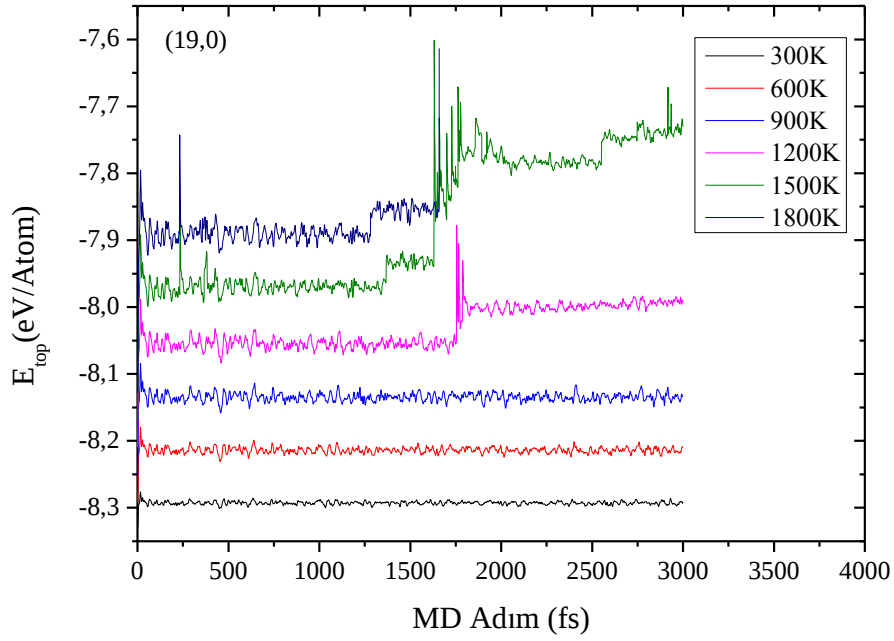
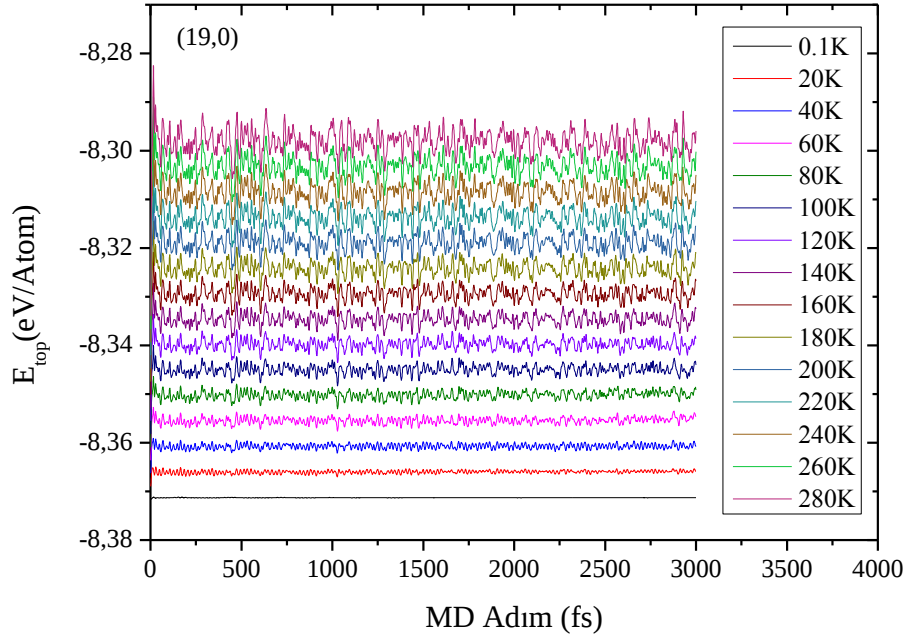
Yarı iletkenlerin enerji bant aralığı sıcaklık artışına bağlı olarak azalma eğilimindedir. Sıcaklık yükseldiğinde, atomik titreşimlerin genliği artar ve daha büyük atomlar arası mesafeye yol açar. Örgü fononları, serbest elektronlar ve boşluklar arasındaki etkileşim küçük ölçeklide

olsa enerji bant aralığını etkiler. Enerji bant aralığının sıcaklıkla olan ilişkisi α ve β malzeme sabitleri olmak üzere Varshni'nin ampirik ifadesiyle;

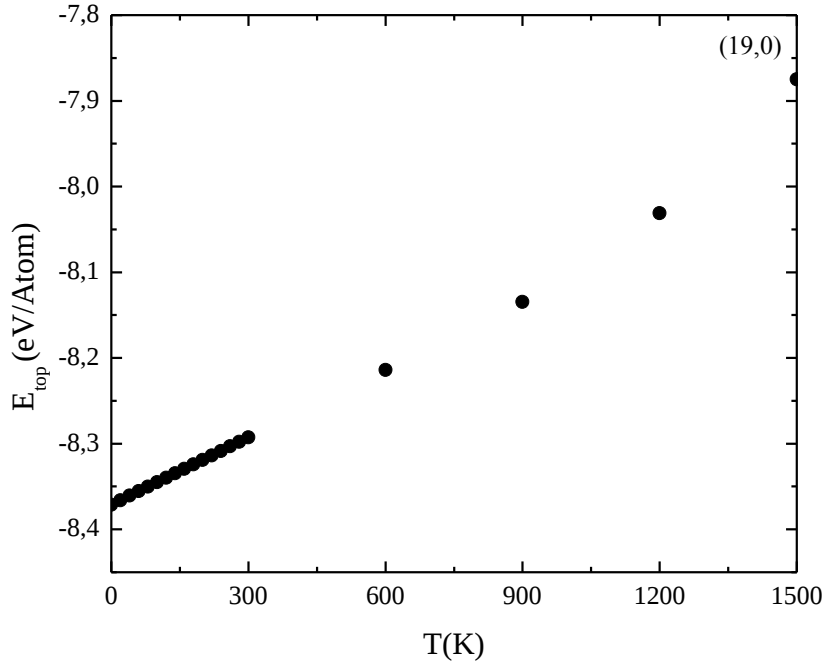
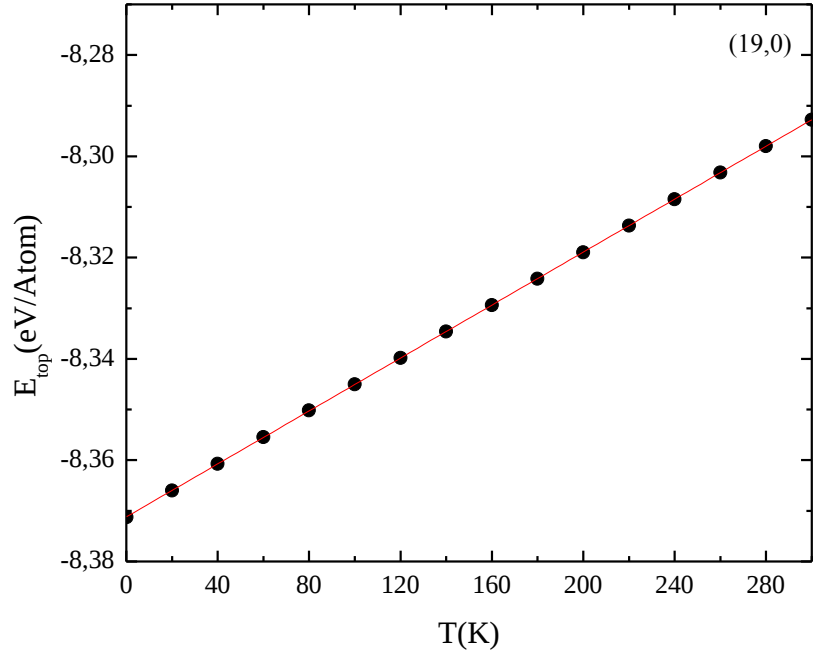
$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (5.6)$$

verilir [98].

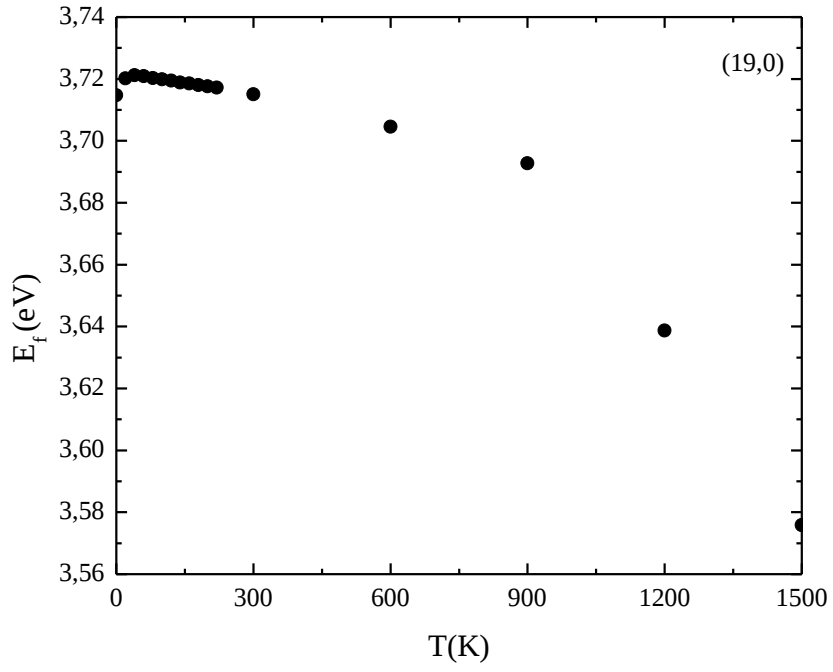
Şekil 5.85'de (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. 300K sıcaklık değerinde, $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) zigzag TDKNT'ler yarı iletken davranış sergilemektedir. Bu sıcaklık değerinde (19,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı 0.34eV olarak hesaplanmıştır. 300 – 1500K yüksek sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığı sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak azalmaktadır. 0.1 – 300K düşük sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığının tekdüze (monotonic) olmayan ayrı bir davranış sergilediği gözlemlenmiştir. $(n - m) = 3q + 1$ grubuna bir başka örnekte (22,0) zigzag TDKNT'dir. Şekil 5.89'da (22,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. (22,0) zigzag TDKNT, 300K sıcaklık değerinde 0.27eV enerji bant aralığına sahip yarı iletken davranış sergilemektedir. 300 – 2100K yüksek sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığı sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak azalmaktadır. Düşük sıcaklık bölgesindeki davranış literatürde Rodrigo B. Capaz [20] vd. tarafından yapılan çalışmalar ile uyumludur.



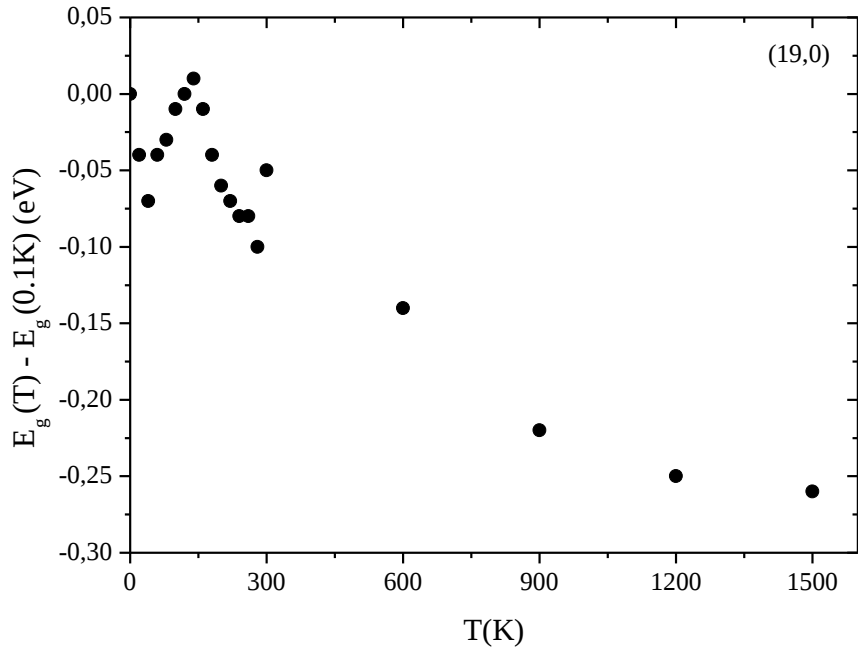
Şekil 5. 82 Simülasyon süresince (19,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi



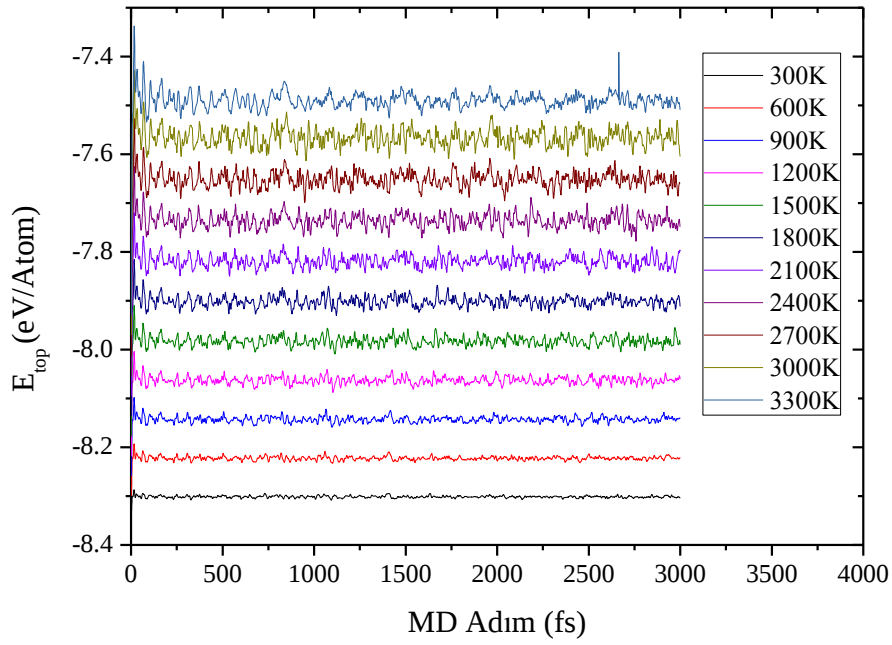
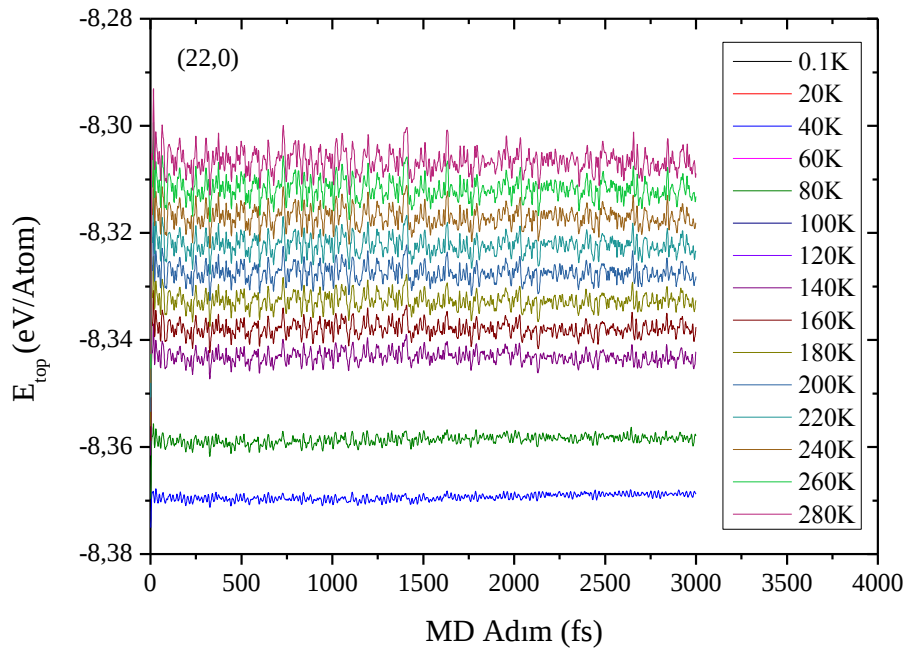
Şekil 5. 83 (19,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



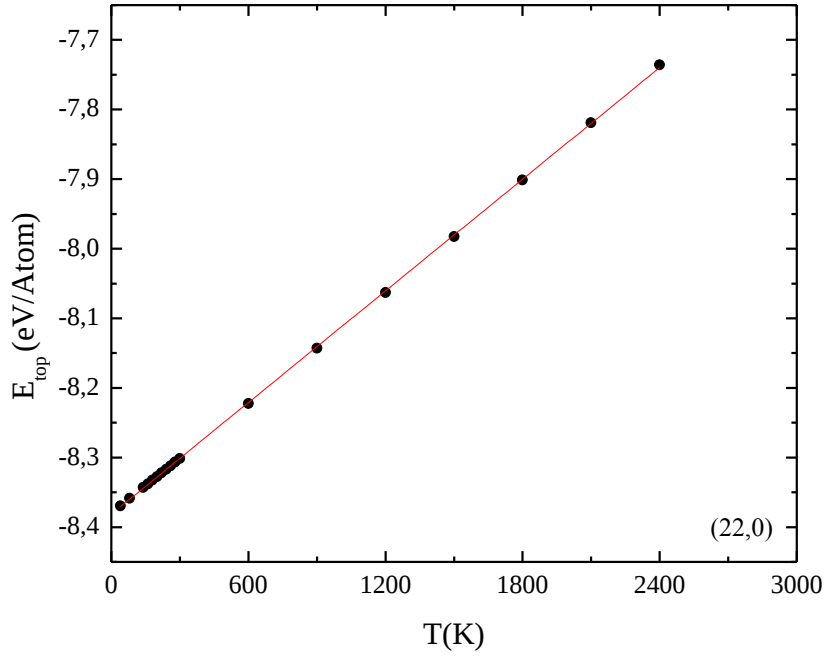
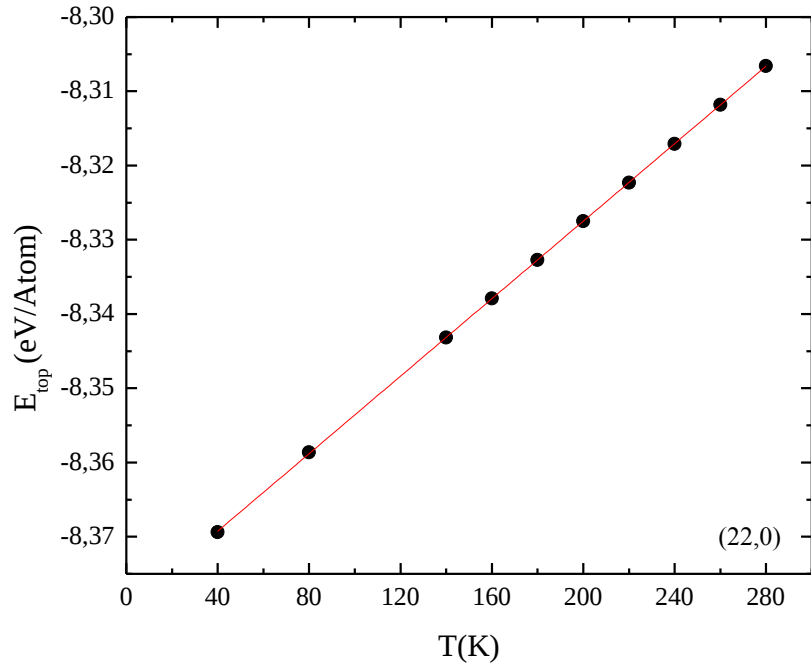
Şekil 5. 84 (19,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



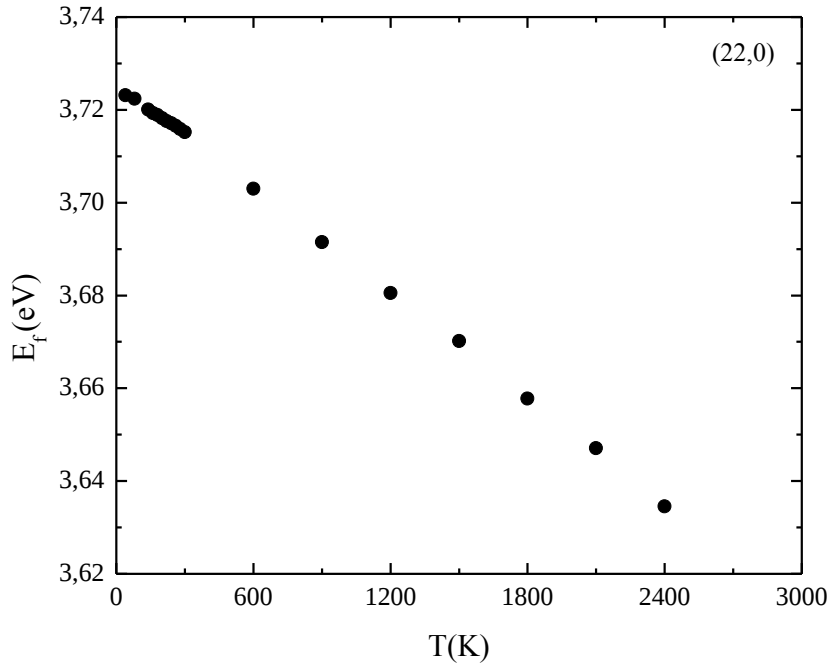
Şekil 5. 85 (19,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi



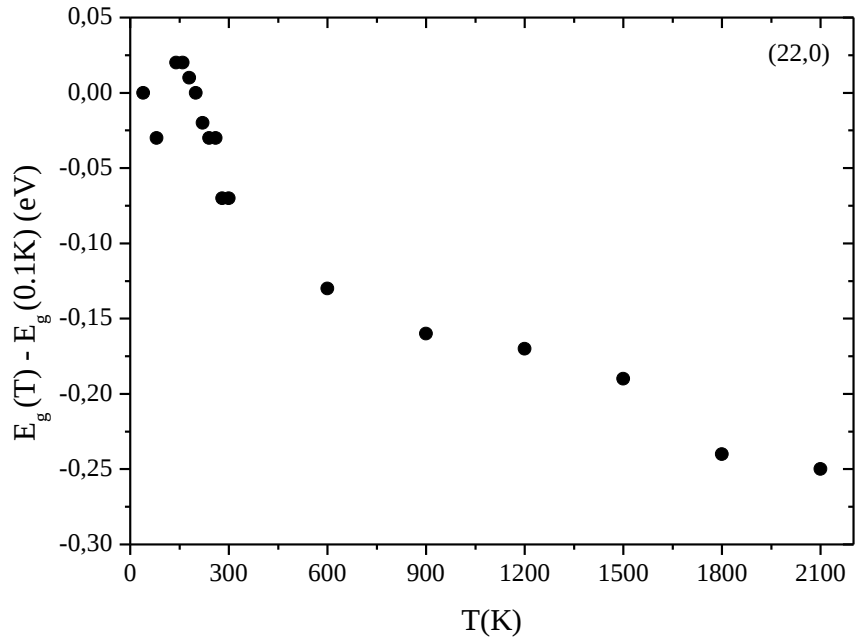
Şekil 5. 86 Simülasyon süresince (22,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi



Şekil 5. 87 (22,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



Şekil 5. 88 (22,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



Şekil 5. 89 (22,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi

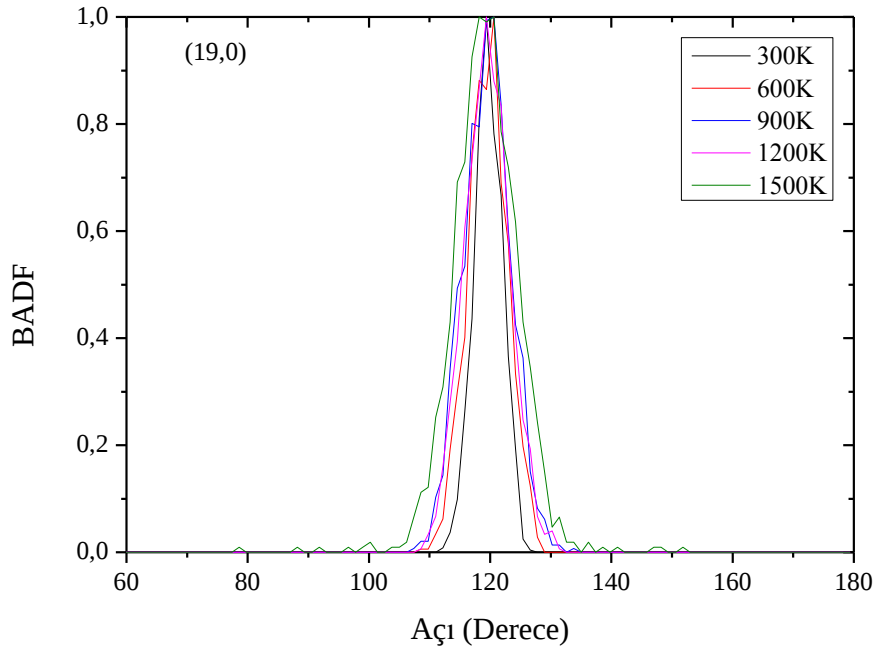
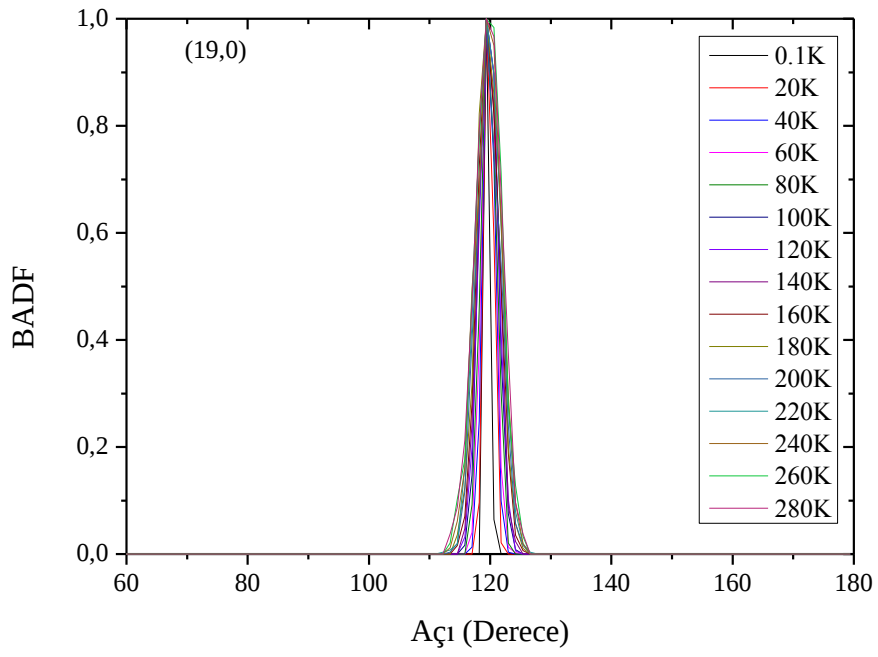
(19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda fiziksel özelliklerindeki değişim Şekil 5.90 – 5.97'deki grafiklerle gösterilmiştir.

300K sıcaklıkta denge durumunda ($\varepsilon = 0$) (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin altıgen örgüdeki bağ açısı dağılım fonksiyonu 119.4° açıda keskin bir tepe noktası verdi. Şekil 5.90 ve 5.91'de sırasıyla, (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. Simülasyon sonuçları, (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin geometrik yapısıyla uyumludur [97].

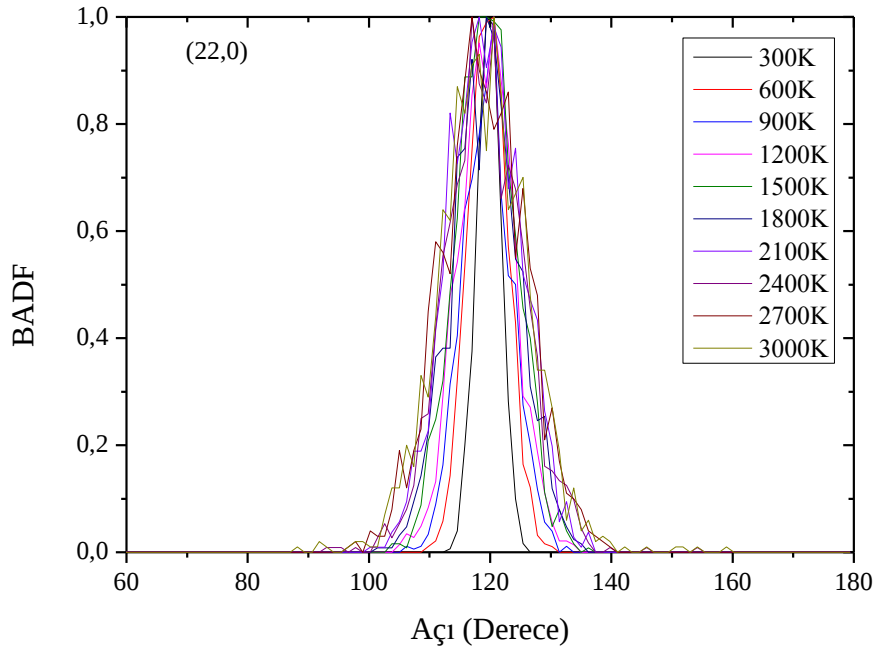
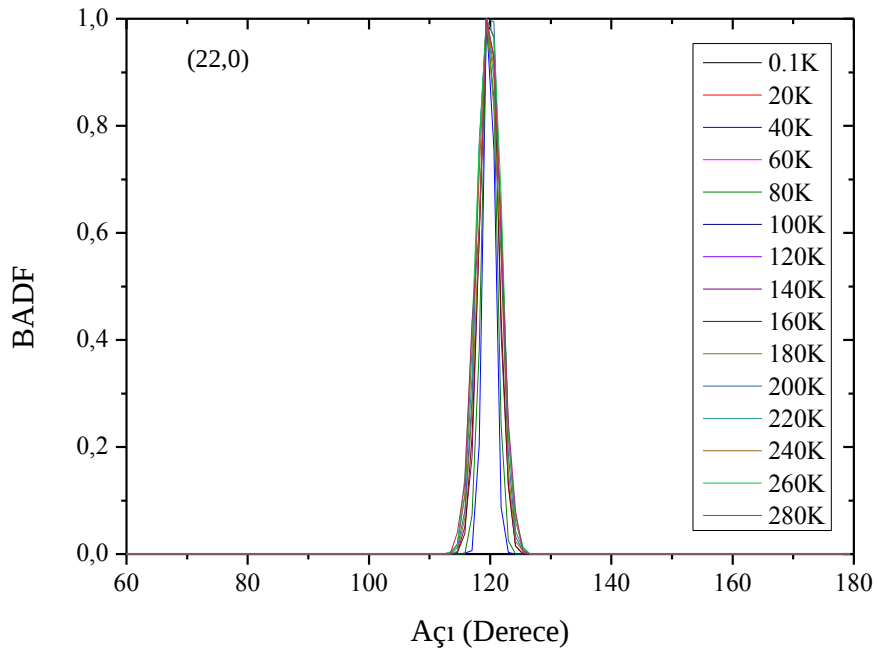
Şekil 5.92 ve 5.93'de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler için, 300K sıcaklık değerinde, altıgen örgüdeki karbon atomları arasındaki bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonu $1.421\text{\AA}$ 'da keskin bir tepe verdi. (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere uygulanan sıcaklık değerine göre de bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun değişim gösterdiği görüldü.

Şekil 5.94 ve 5.95'deki radyal dağılım fonksiyonlarına bakıldığında, 300K'de atomlar arası uzaklıklara ait ilk üç tepenin, (19,0) zigzag TDKNT için sırasıyla 1.42, 2.44 ve $2.78\text{\AA}$ değerlerinde olduğu, (22,0) zigzag TDKNT içinse sırasıyla 1.49, 2.48 ve $2.77\text{\AA}$ değerlerinde olduğu görülmektedir. Uygulanan sıcaklığa bağlı olarak atomların konumlarındaki değişimler nedeniyle tepe noktalarında değişimler gözlemlendi.

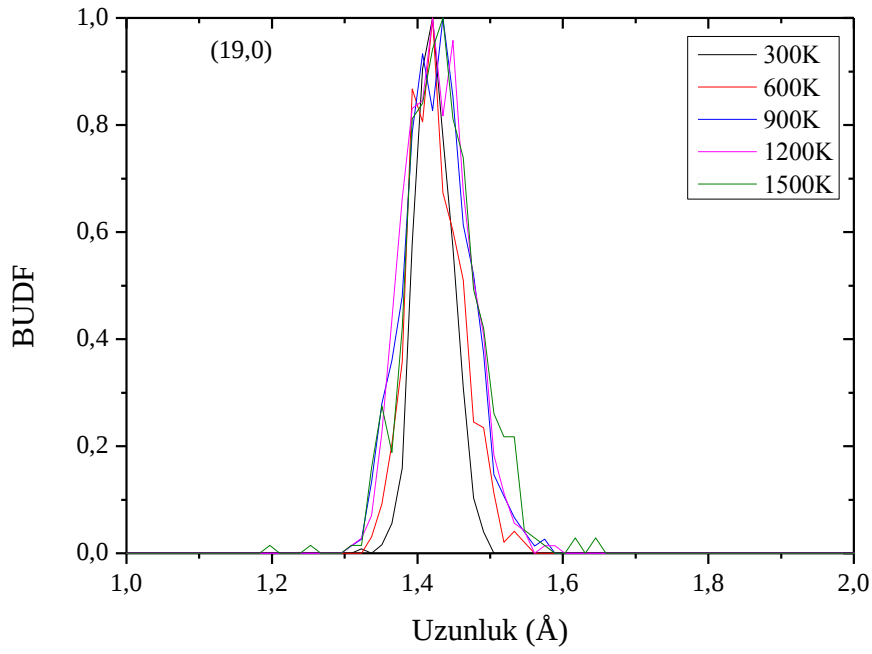
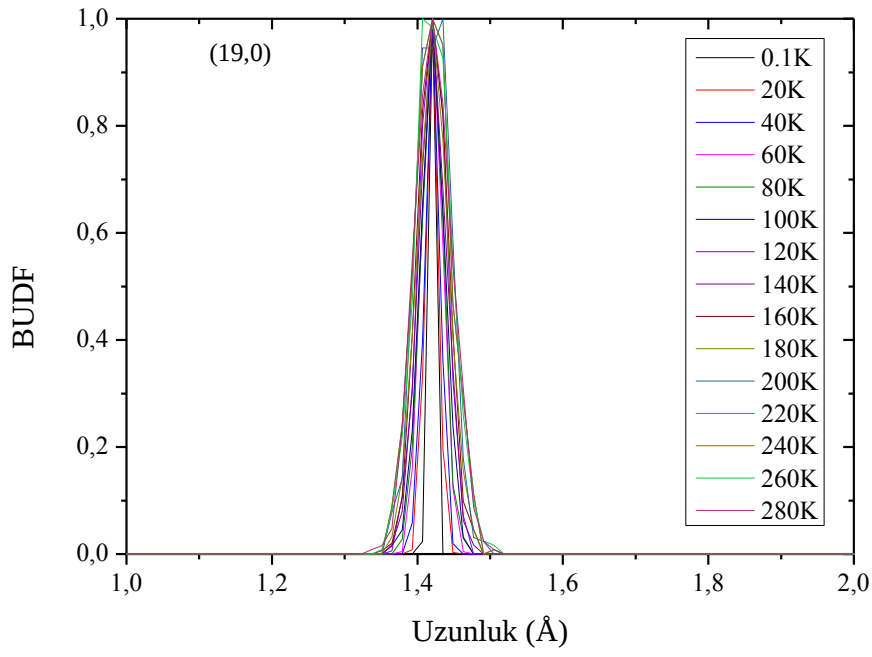
Şekil 5.96 ve 5.97'de (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. Şekil 5.96'da düşük sıcaklıklarda (19,0) zigzag TDKNT atomlarının komşu atomlarla 3 bağ yaptığı, yüksek sıcaklıklarda ise atom kopmalarından dolayı azda olsa ikili bağlar yaptığı görülmektedir.



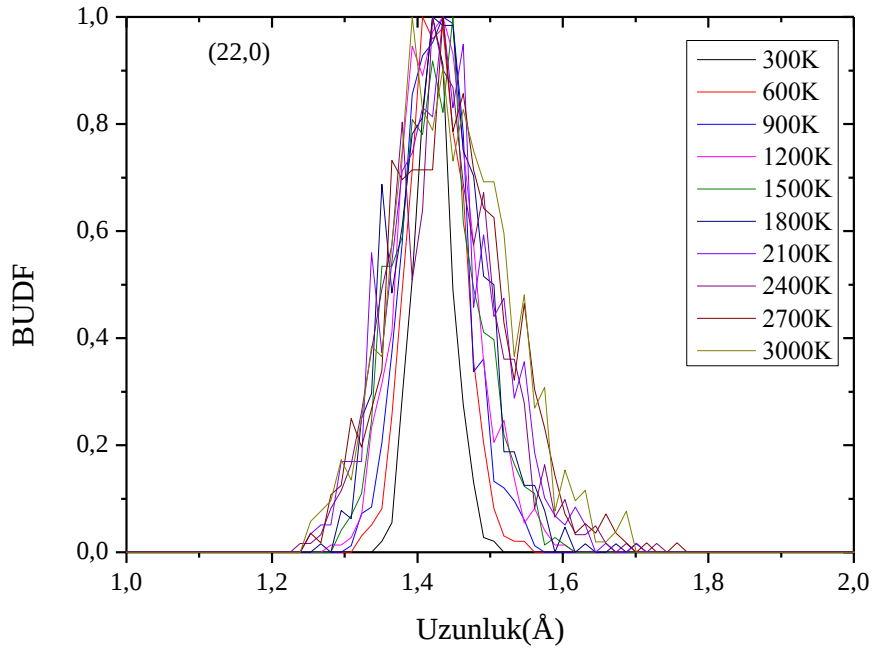
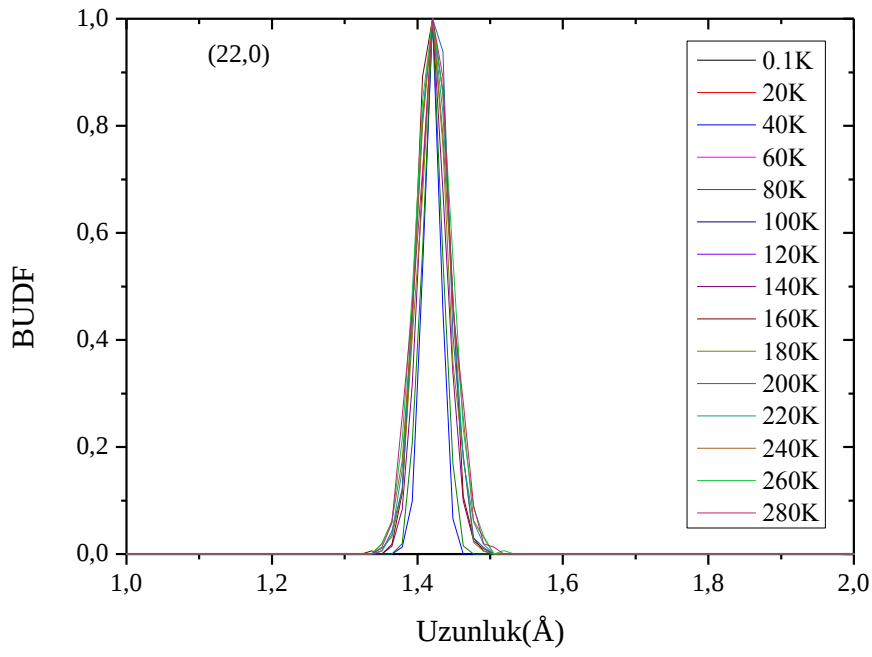
Şekil 5. 90 (19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



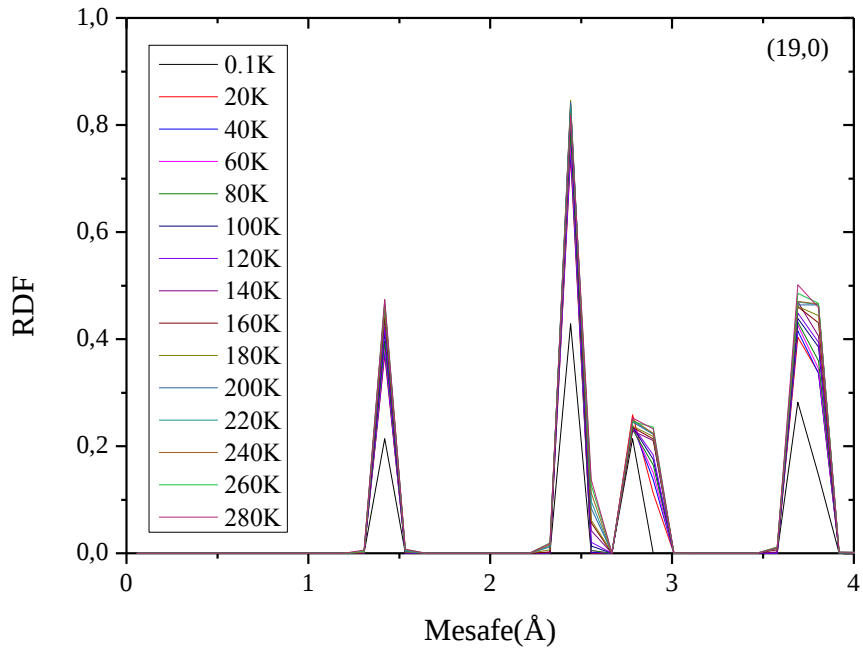
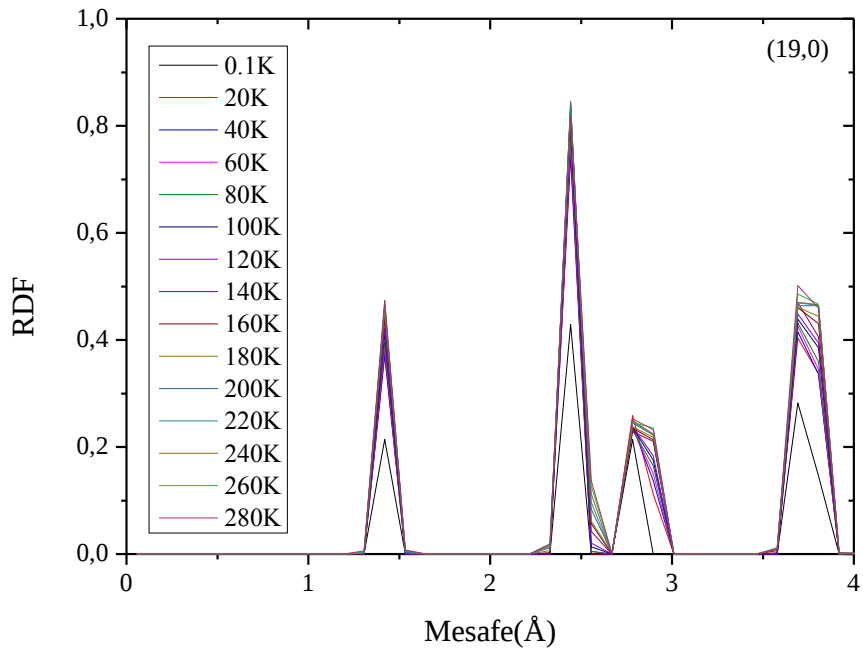
Şekil 5. 91 (22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



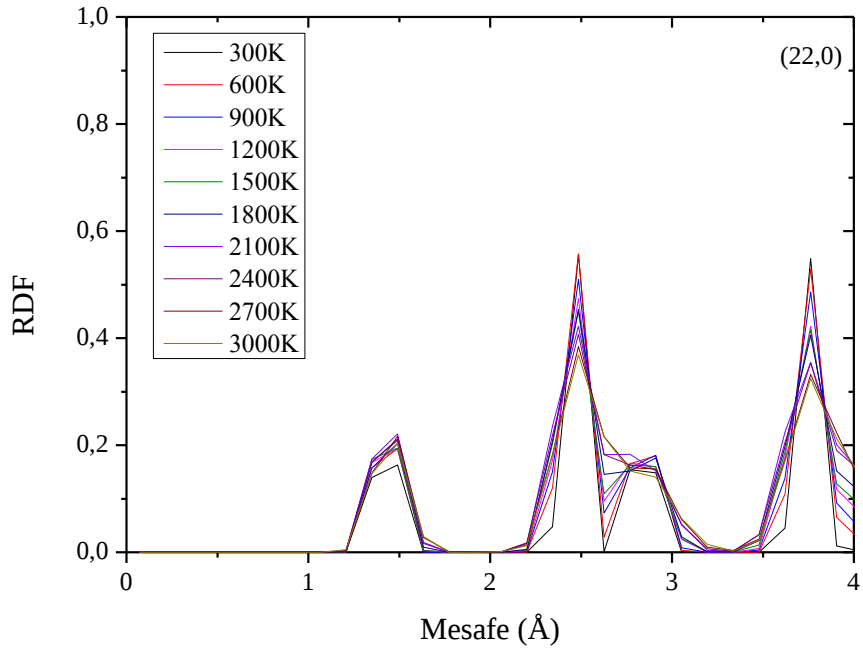
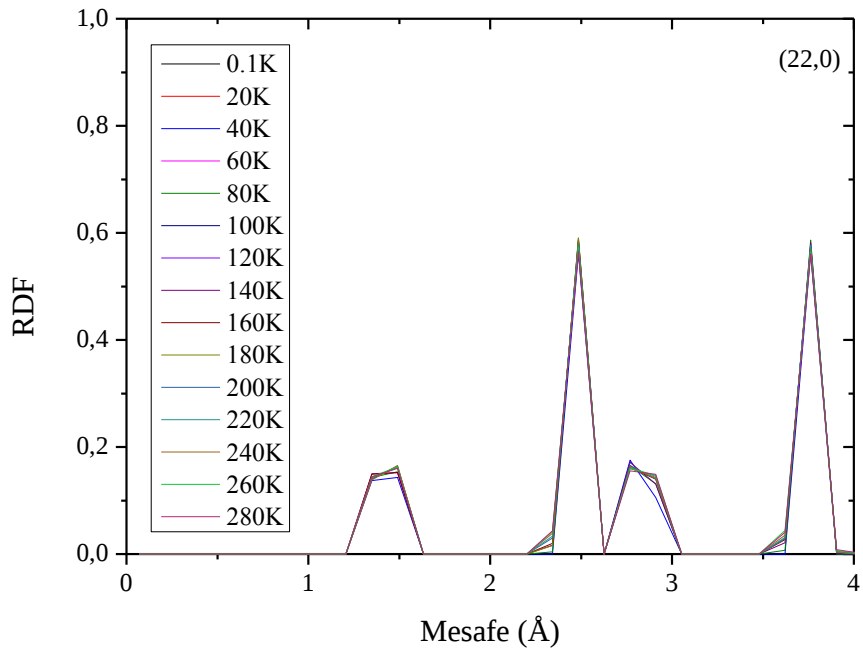
Şekil 5. 92 (19,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



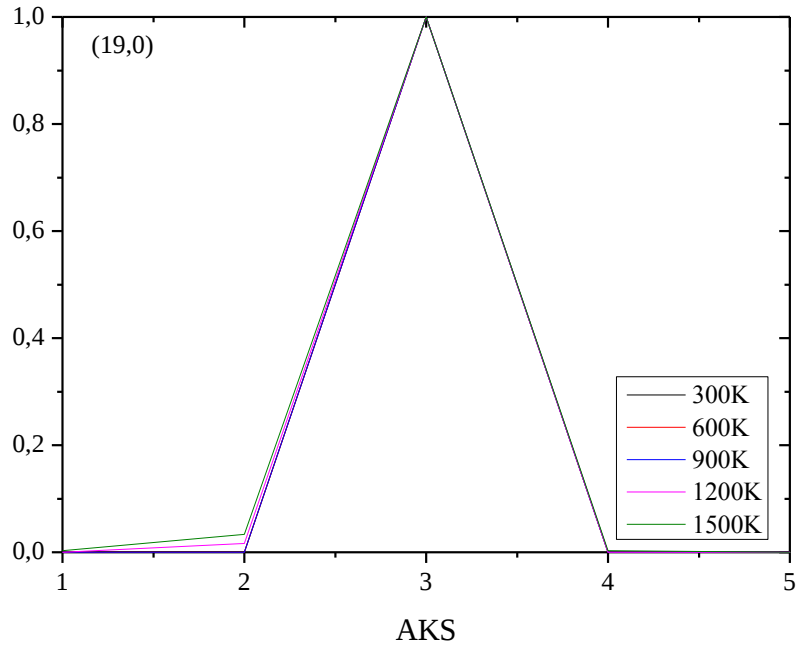
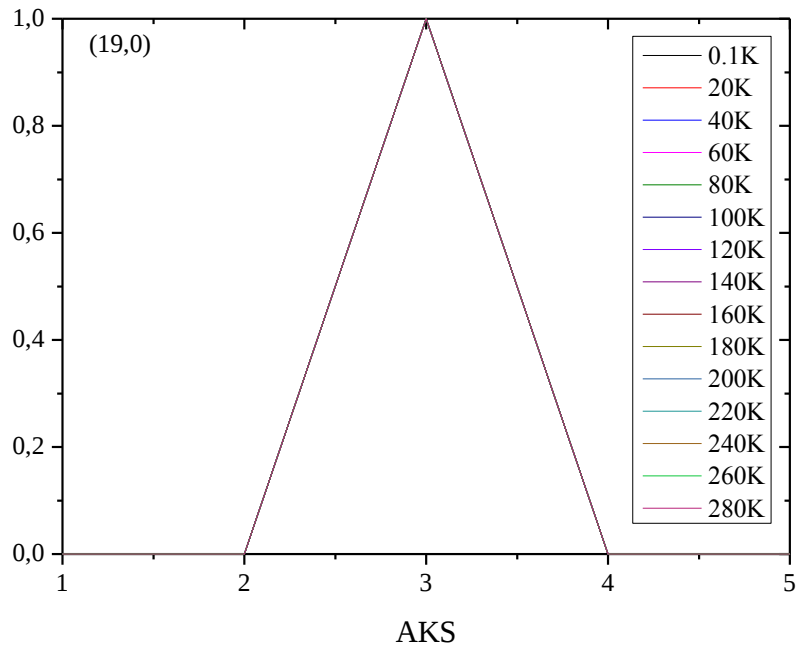
Şekil 5. 93 (22,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



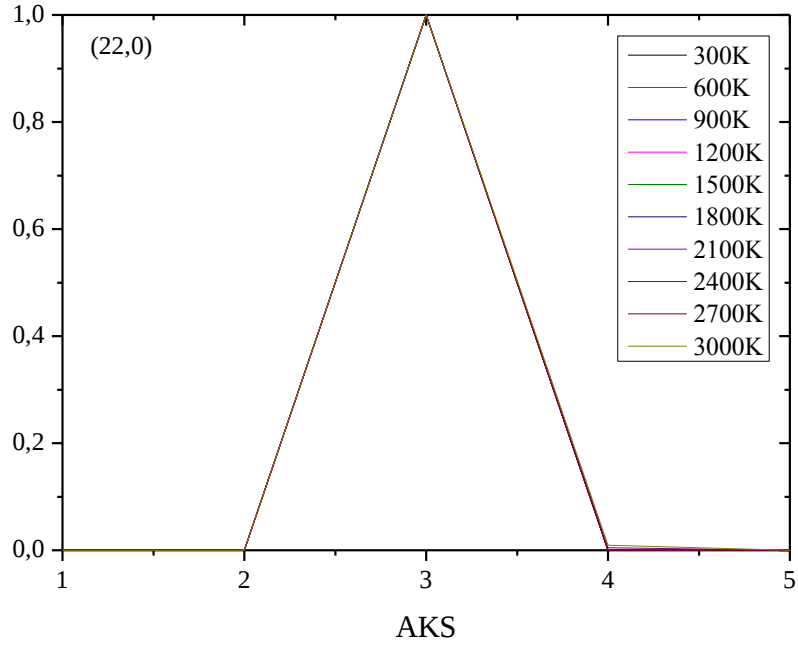
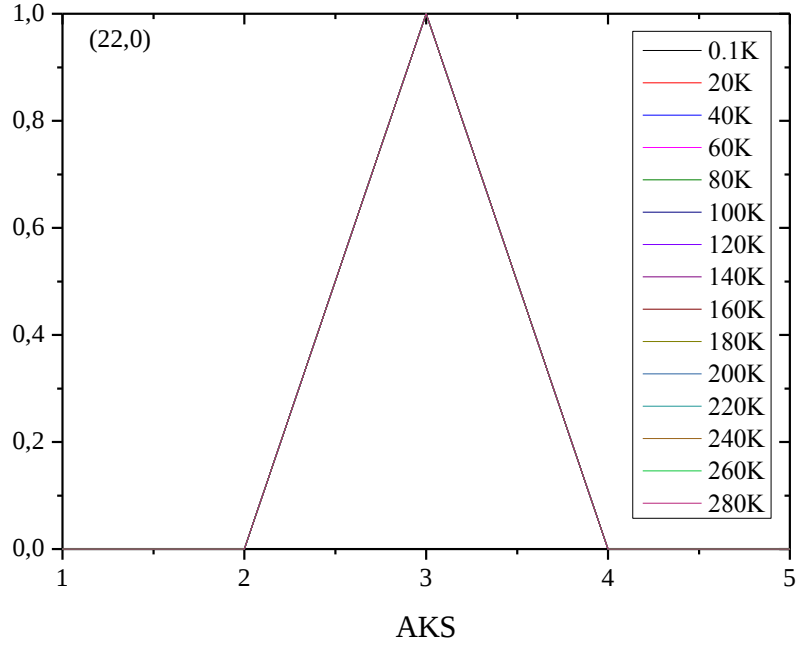
Şekil 5. 94 (19,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 95 (22,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



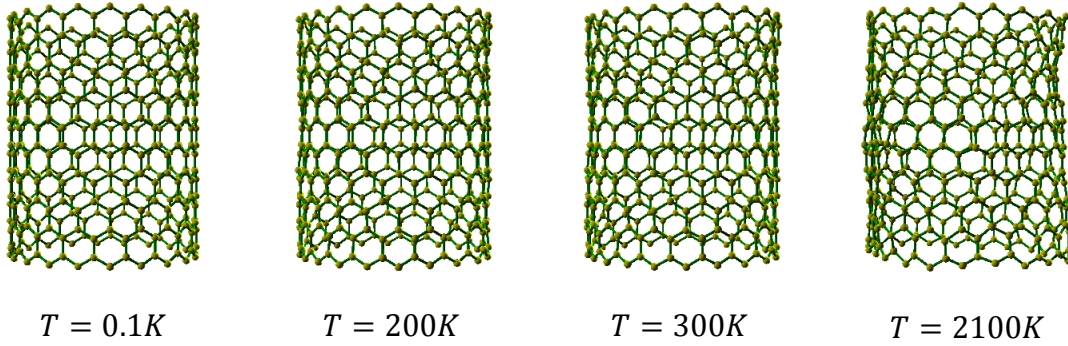
Şekil 5. 96 (19,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 97 (22,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi

5.3.3 (20,0) Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Fiziksel ve Elektronik Özellikleri

$(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT'lere örnek olarak bu çalışmada (20,0) zigzag TDKNT çalışılmıştır. Düşük sıcaklık çalışmaları 0,1K'den 20K'lik sıcaklık artışıyla oda sıcaklığına kadar, yüksek sıcaklık çalışmaları ise 300K'den TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar 300K'lik sıcaklık artışıyla çalışıldı.



Şekil 5. 98 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1, 200, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri

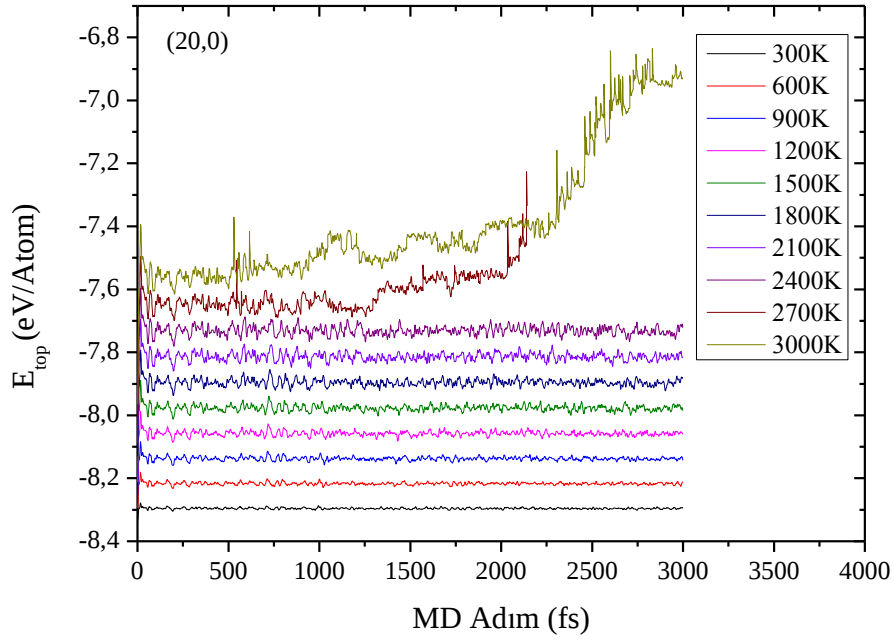
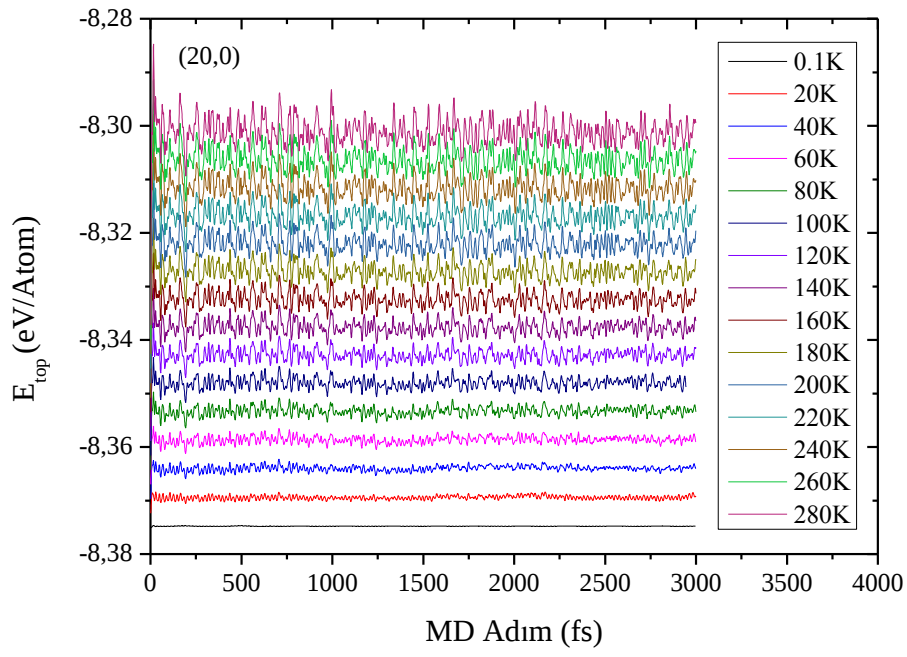
Şekil 5.98'de 0.1, 200, 300 ve 2100K sıcaklık değerlerinde (20,0) zigzag TDKNT'nin simülasyon görüntüleri gösterilmiştir. Şekil 4.10'da 3000 moleküler dinamik adım süresince (20,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde toplam enerjisinin değişimi görülmektedir. Şekil 4.10'da sistemin, 1fs moleküler dinamik adım zamanı için 3000 MD adımı süresince kararlı enerji seviyesinde olduğu görülmektedir. (20,0) zigzag TDKNT ortalama -8,29582 eV değerinde salınım yapmaktadır. Düşük – yüksek sıcaklıklarda simülasyon süresince toplam enerjideki değişim Şekil 5.99'da gösterilmiştir. Çalışmaların yapıldığı sıcaklık değerlerinde yapısal kararlılık korunmaktadır. Yüksek sıcaklıklara (2700 – 3000K) çıkıldığında yapısal kararlılığın bozulduğu görülmektedir. Şekil 5.99'da (20,0) zigzag TDKNT'nin yapısının bozulduğu durumlar Bölüm 5.4 “Zigzag TDKNT'lerin Dayanıklılıkları” bölümünde anlatılacaktır.

Şekil 5.100'de, (20,0) zigzag TDKNT'nin, düşük – yüksek sıcaklıklarda ortalama toplam enerji değişimini gösterilmiştir. Sıcaklık artışına bağlı olarak atom başına düşen toplam enerji doğrusal olarak artmaktadır.

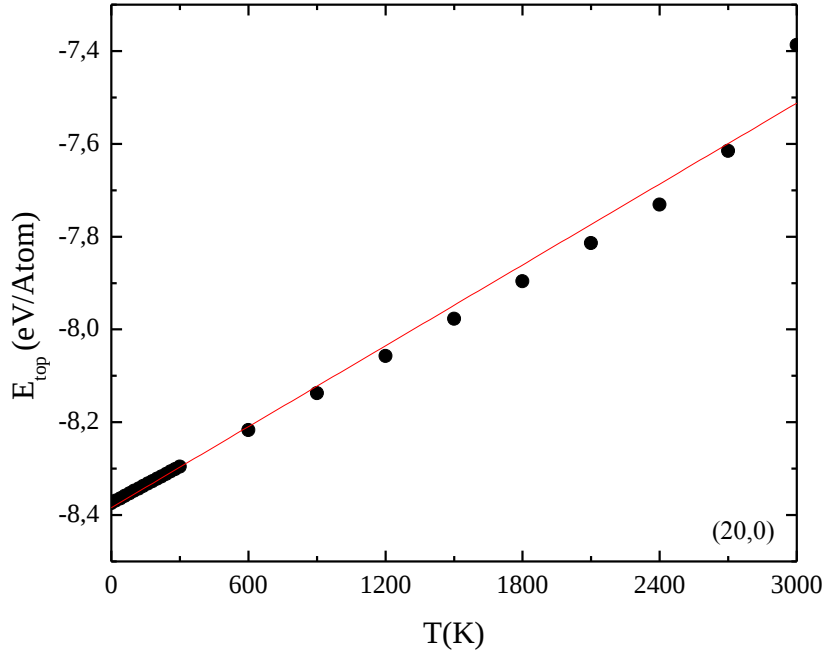
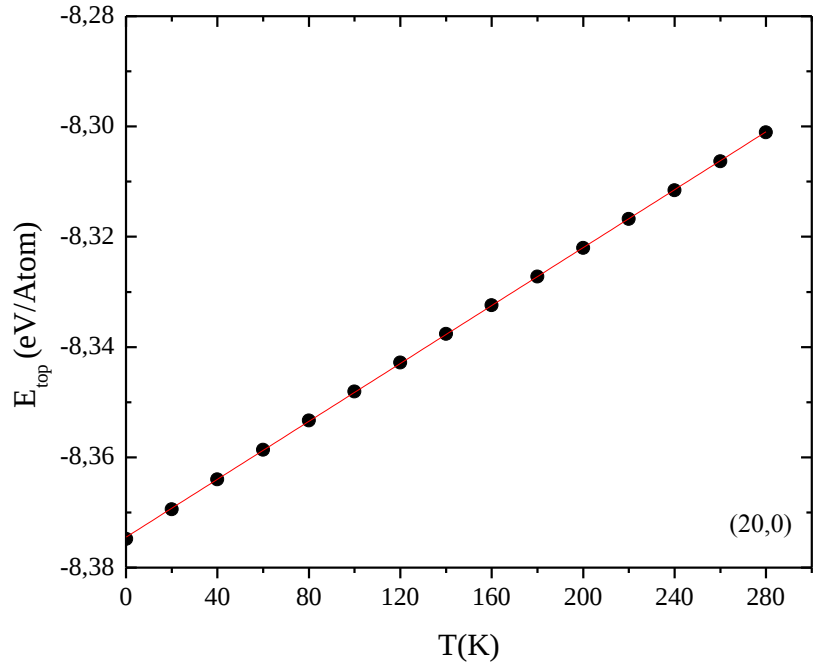
Şekil 5.101'de, (20,0) zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklardaki Fermi enerjisindeki değişim görülmektedir. (20,0) TDKNT için, Fermi enerjisi, düşük sıcaklıklarda doğrusal

olmayan bir davranış sergilerken, yüksek sıcaklıklarda sıcaklığa bağlı olarak doğrusal azalmaktadır.

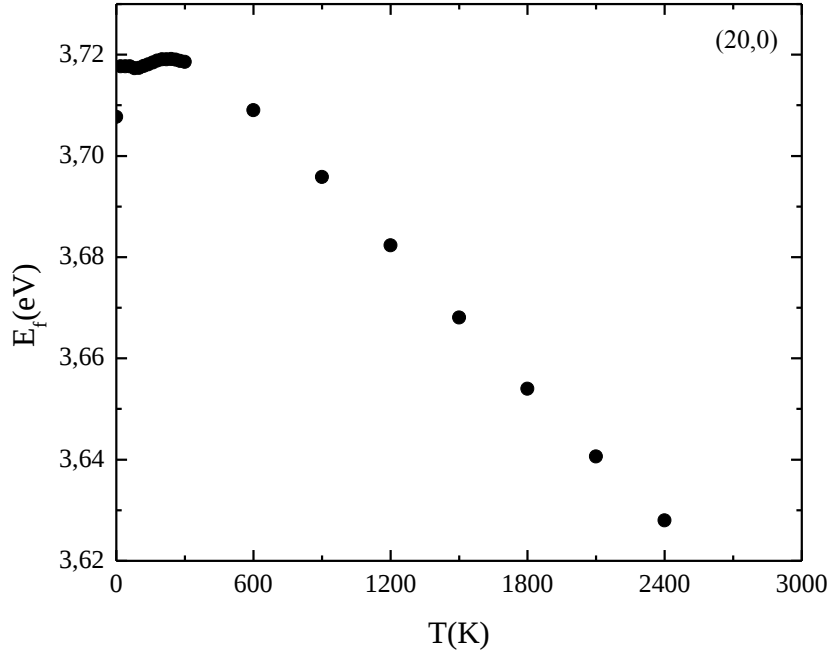
Şekil 5.102’de, (20,0) zigzag TDKNT’nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi gösterilmiştir. 300K sıcaklık değerinde, $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT’ler yarı iletken davranış sergilemektedir. Bu sıcaklık değerinde (20,0) zigzag TDKNT’nin enerji bant aralığı 0.34eV olarak hesaplanmıştır. 300 – 2100K yüksek sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığı sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak azalmaktadır. 0.1 – 300K düşük sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığının tekdüze (monotonic) olmayan ayrı bir davranışı sergilediği gözlemlenmiştir.



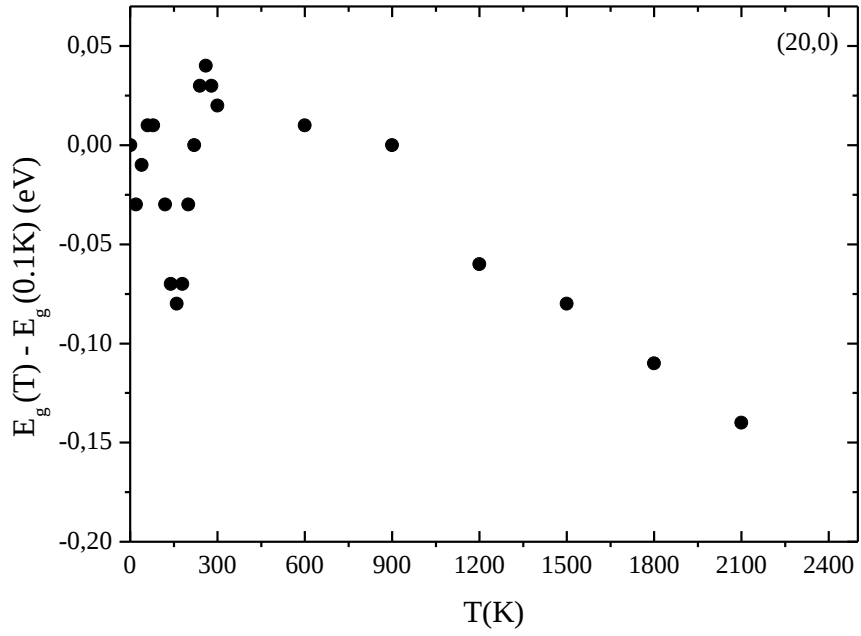
Şekil 5. 99 Simülasyon süresince (20,0) Zigzag TDKNT'nin düşük – yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin değişimi



Şekil 5. 100 (20,0) Zigzag TDKNT'nin ortalama toplam enerjisinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



Şekil 5. 101 (20,0) Zigzag TDKNT'nin Fermi enerjinin düşük – yüksek sıcaklıklardaki değişimi



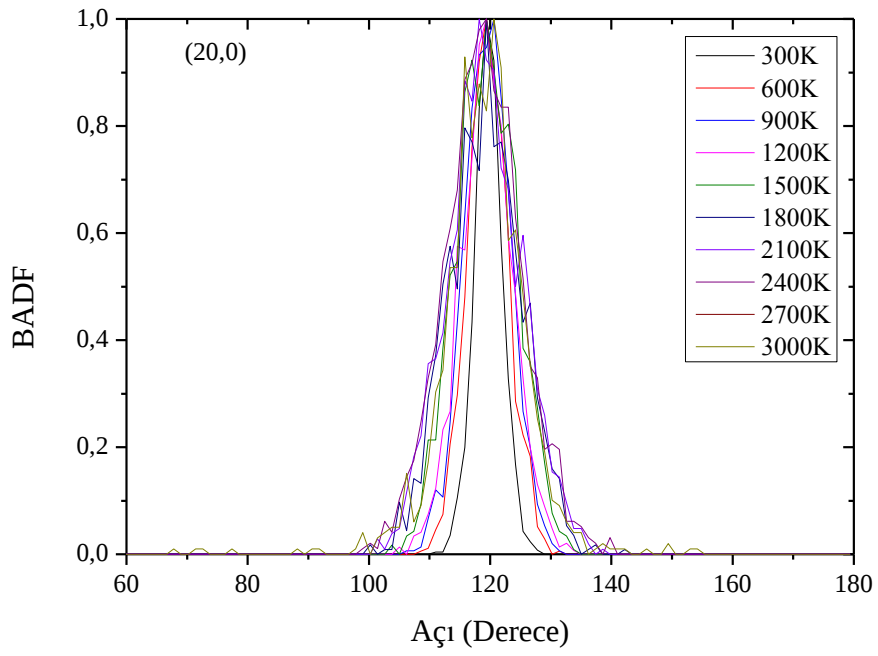
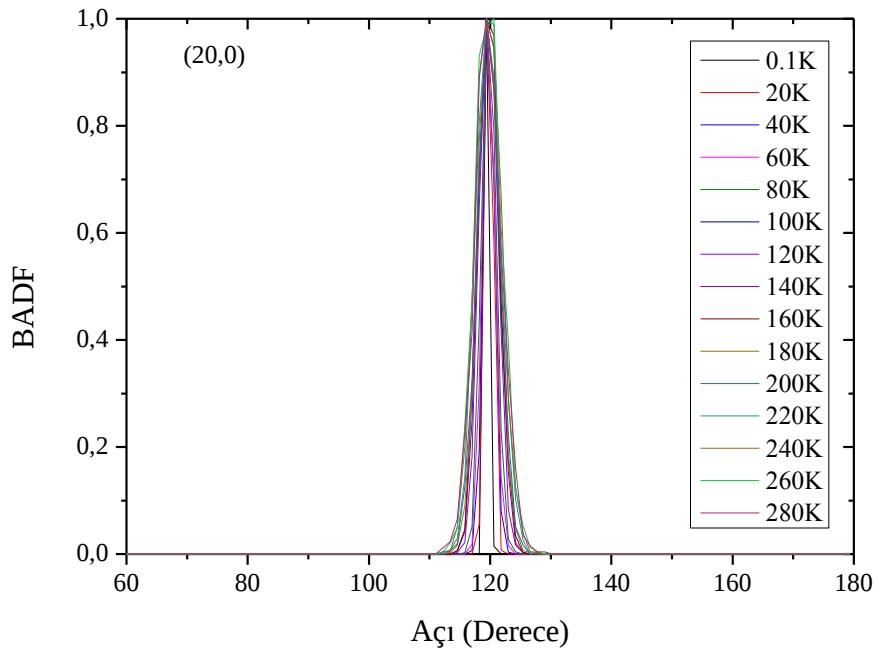
Şekil 5. 102 (20,0) Zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklıkla değişimi

(20,0) zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi Şekil 5.103'de verilmiştir. Benzer şekilde, 300K sıcaklıkta $\varepsilon = 0$ durumunda, altıgen örgüdeki bağ açısı dağılım fonksiyonu 119.4° açıda keskin bir tepe noktası verdi.

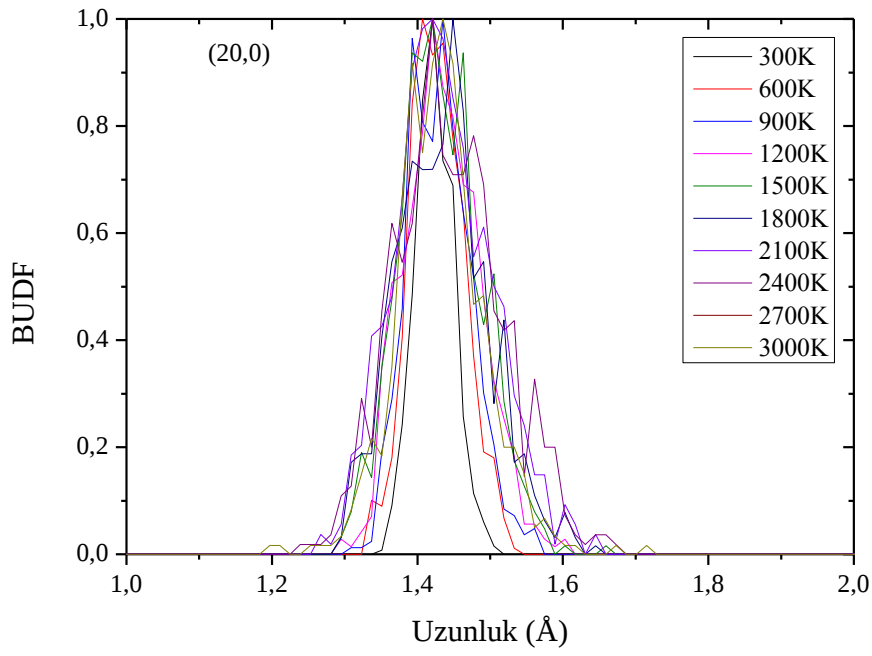
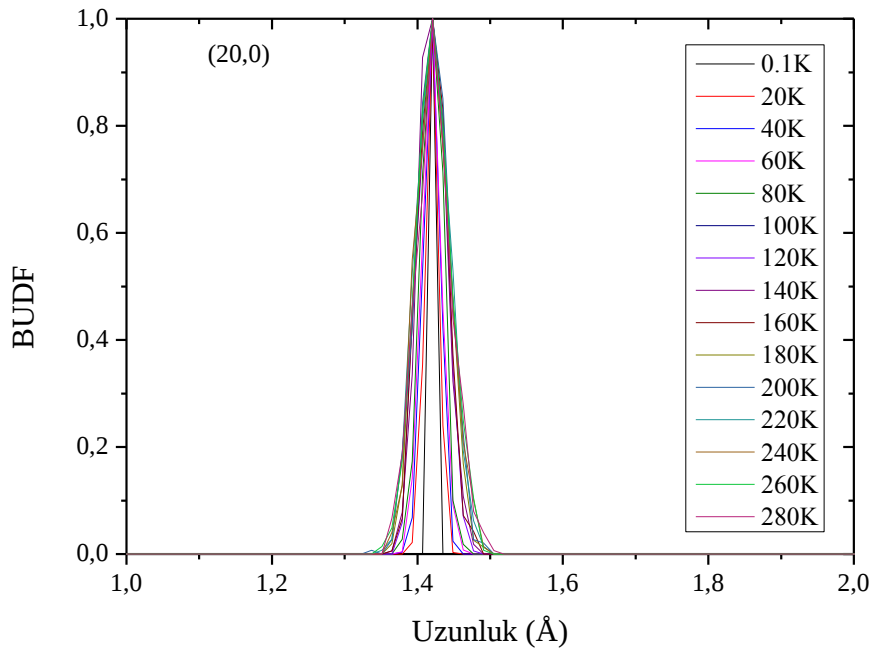
Şekil 5.104'de (20,0) zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. (20,0) zigzag TDKNT için, 300K sıcaklık değerinde, altıgen örgüdeki karbon atomları arasındaki bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonu $1.421\text{\AA}$ 'da keskin bir tepe verdi. (20,0) zigzag TDKNT'e uygulanan sıcaklık değerine göre de bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun değişim gösterdiği görüldü.

300K sıcaklıkta $\varepsilon = 0$ durumunda, karbon atomları arası uzaklıklara ait ilk üç tepenin, sırasıyla 1.46, 2.49 ve $2.87\text{\AA}$ değerlerinde olduğu görüldü. Uygulanan sıcaklığa bağlı olarak atomların konumlarındaki değişimler nedeniyle tepe noktalarında değişimler gözlemlendi (Şekil 5.105).

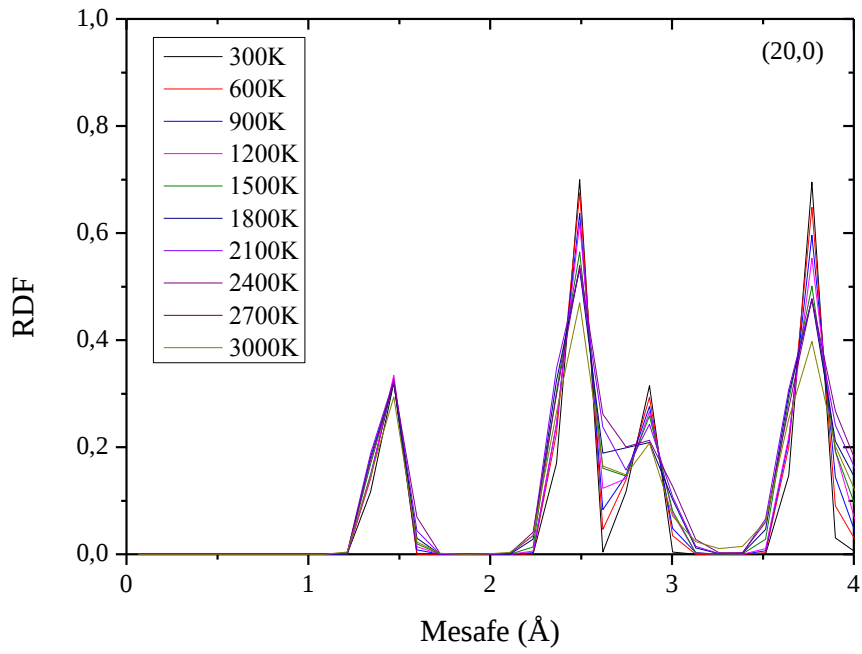
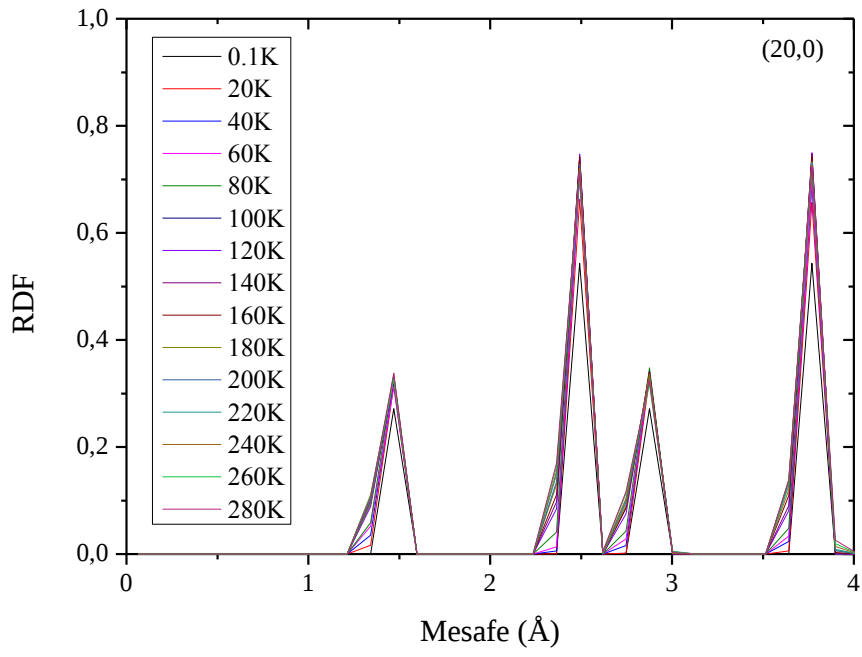
Şekil 5.106'da (20,0) zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi görülmektedir. Yüksek sıcaklıklarda atom kopmalarından dolayı (20,0) TDKNT'nin ikili bağ yaptığı görülmektedir.



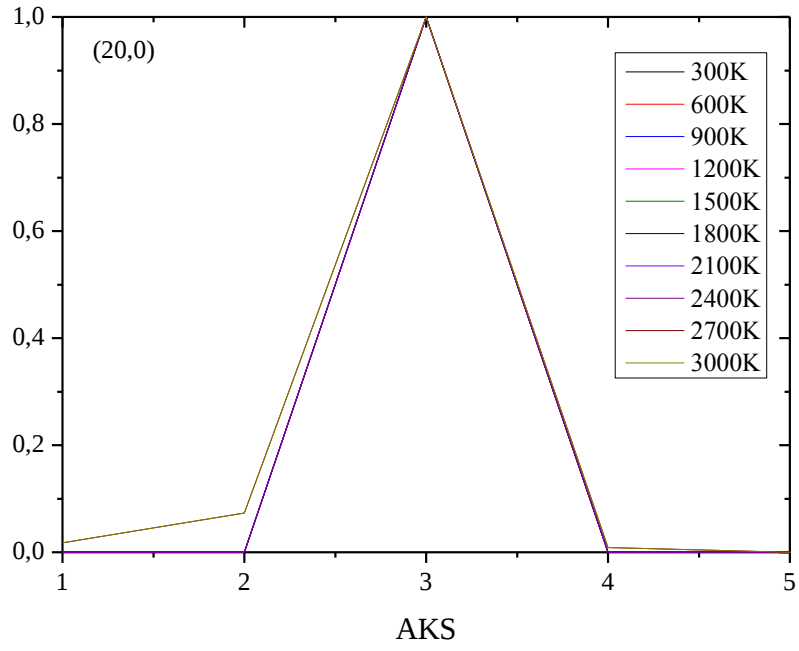
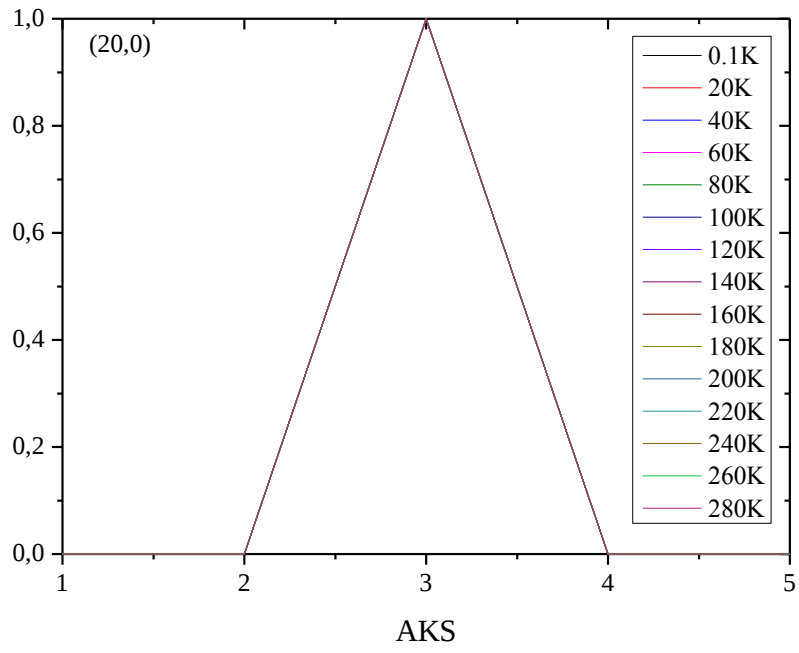
Şekil 5. 103 (20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – açısı dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 104 (20,0) Zigzag TDKNT'nin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 105 (20,0) Zigzag TDKNT'nin radyal dağılım fonksiyonunun sıcaklığa göre değişimi



Şekil 5. 106 (20,0) Zigzag TDKNT'nin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi

5.3.4 Sonuçlar

$(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundan seçilen (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda yapısal kararlılığı koruduğu durumlarda fiziksel ve elektronik özellikleri incelendi. Yapısal kararlılığın korunmadığı yüksek sıcaklıklarda sistemin fiziksel özellikleri ve dayanıklılık çalışmaları Bölüm 5.4 “Zigzag TDKNT'lerin Dayanıklılıkları” bölümünde incelendi. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 3000 MD adım süresince kararlı enerji seviyesinde olduğu görüldü. Çalışılan TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda atom başına ortalama enerjileri hesaplanarak, sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak arttığı gösterildi. Her bir TDKNT için Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık aralığında hesaplanmıştır. Düşük sıcaklıklarda Fermi enerjisi doğrusal olmayan bir sergilerken, yüksek sıcaklıklarda doğrusal bir şekilde azalmaktadır. Fermi enerjisi civarında durum yoğunluğu grafiklerine bakılarak (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıkları hesaplanmıştır. $(n - m) = 3q$ grubundaki TDKNT'ler metalik davranış sergilerken, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki TDKNT'ler yarı iletken davranış gösterirler. Simüle edilen TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının sıcaklığa bağlı değişimi incelendi. $(n - m) = 3q$ grubundaki metalik (18,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının sıcaklığa bağlı olarak belirgin bir şekilde değişmediği görüldü. Diğer yandan, $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0), $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) yarı iletken zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıklarının sıcaklıkla değişimi incelendiğinde, düşük sıcaklık bölgesinde tekdüze (monotonic) olmayan bir aile davranışı sergilediği gözlemlenmiştir. Çalışılan TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda enerji bant aralığı Varshni'nin ampirik ifadesine benzer şekilde doğrusal olarak azaldığı görülmüştür. Bu sonuçlar literatürde farklı modellerle simüle edilen sonuçlarla uyumluluk içerisindedir [20].

(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin BADF, BUDF, RDF ve AKS gibi fiziksel özellikleri düşük – yüksek sıcaklıklarda incelendi. TDKNT'ler için altıgen örgüdeki bağ – açısı dağılım fonksiyonunun 119.4° açıda, bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonunun $1.421\text{\AA}$ 'da keskin bir tepe noktası verdiği görüldü. Sıcaklık artışına bağlı olarak atomlar arasındaki kinetik enerjinin artması tepe noktasından sapmalar meydana getirmiştir. Yüksek sıcaklıklarda BADF ve BUDF'lerin genişliklerinin arttığı görüldü. Uygulanan sıcaklığa bağlı olarak referans alınan atomun komşu atomlarla olan mesafelerindeki değişim RDF eğrilerinde gösterildi. Çalışılan TDKNT'lerin atomik koordinasyon sayısının sıcaklığa göre değişimi incelenerek, altıgen

örgüdeki her karbon atomunun komşu atomlarla 3 bağ yaptığı görülmüştür. Yüksek sıcaklıklarda atom kopmalarından dolayı azda olsa ikili bağlar yaptığı görülmüştür. Bu durum TDKNT'lerin yapısıyla uyumludur [97].

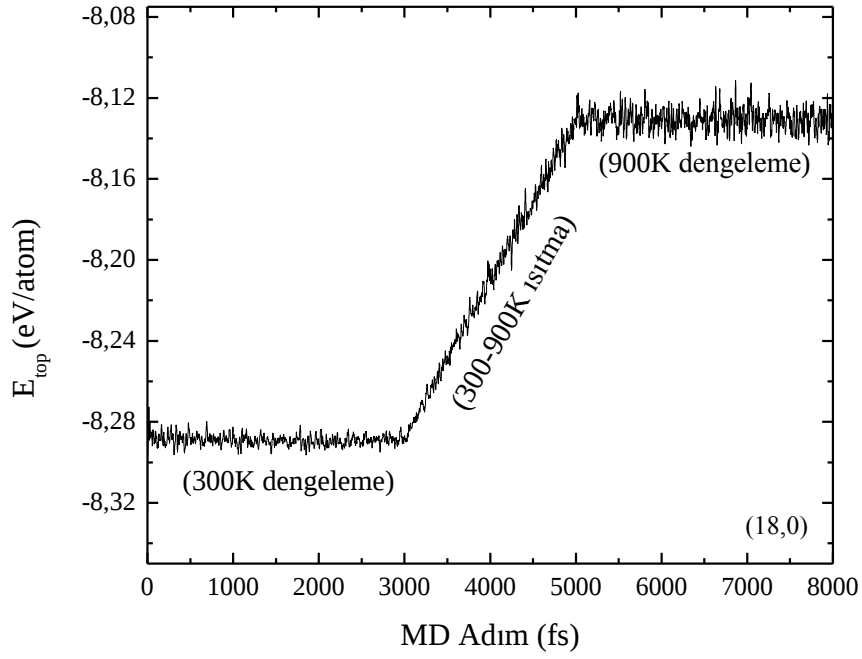
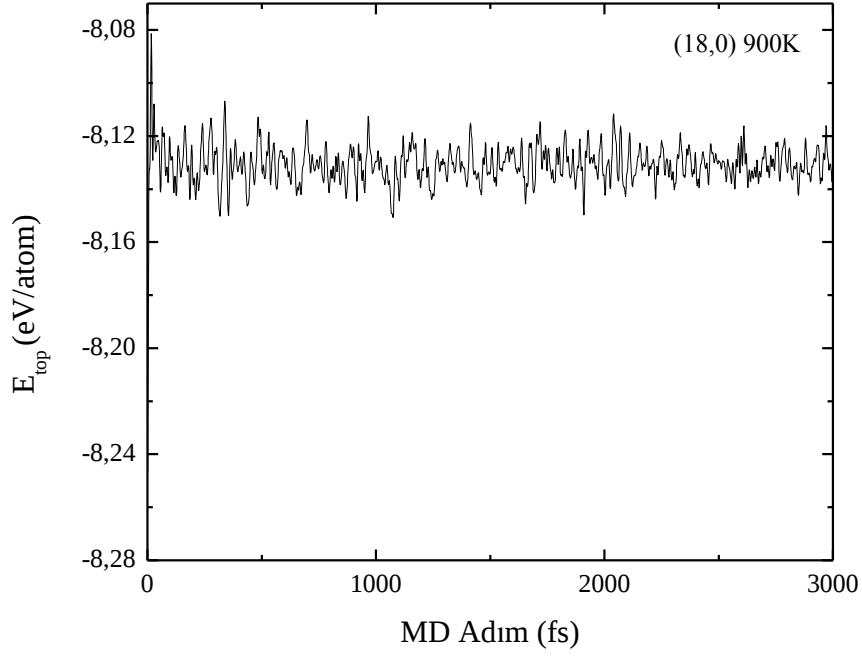
5.4 Zigzag Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Dayanıklılıkları

Tek duvarlı ve çok duvarlı karbon nanotüpler dayanıklı yapıları nedeniyle atomik kuvvet mikroskobu (AFM) gibi görüntüleme cihazlarında nanouç (nanoprobe) olarak kullanılmaktadır [99-101]. Nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından sıcaklık ve gerinim TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkileyen kritik parametrelerdir. TDKNT'ler teknolojideki kullanım alanlarına bağlı olarak sıcaklık ve gerinim etkilerine maruz kalmaktadırlar. Bu nedenle sıcaklık ve gerinime bağlı olarak TDKNT'lerin dayanıklılık çalışmaları teknolojik açıdan önem kazanmaktadır. N-Mertebe sıkı-bağ moleküler dinamik yöntemi kullanılarak sırasıyla 360, 380, 400 ve 420 atomlu 20 katmanlı (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sıcaklık, germe – sıkıştırma ve sıcaklığa bağlı olarak germe – sıkıştırma etkisinde dayanıklılık çalışmaları incelendi. Bu yöntemle (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'lerin sıcaklık ve gerinime karşı gösterdikleri davranış ayrıntılı bir şekilde incelendi.

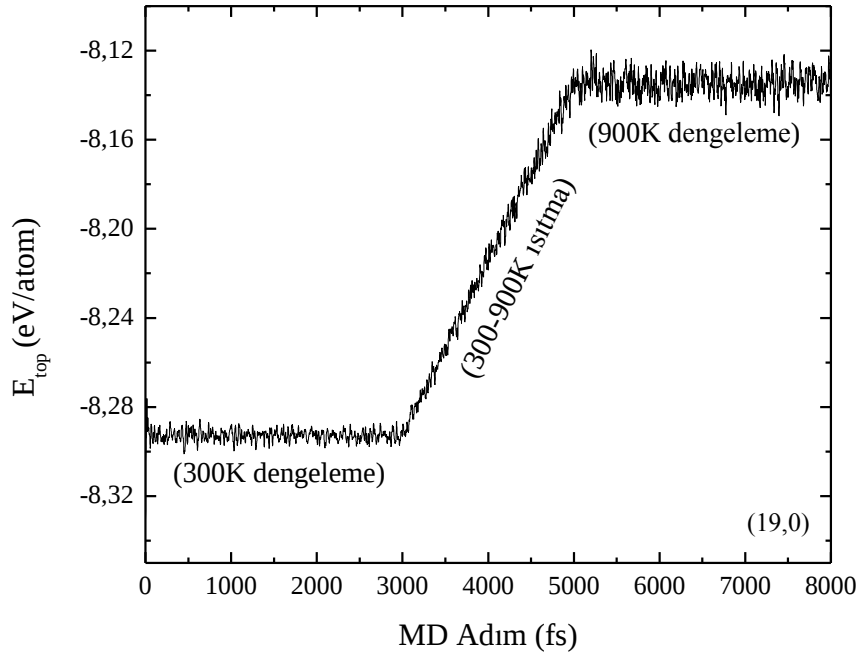
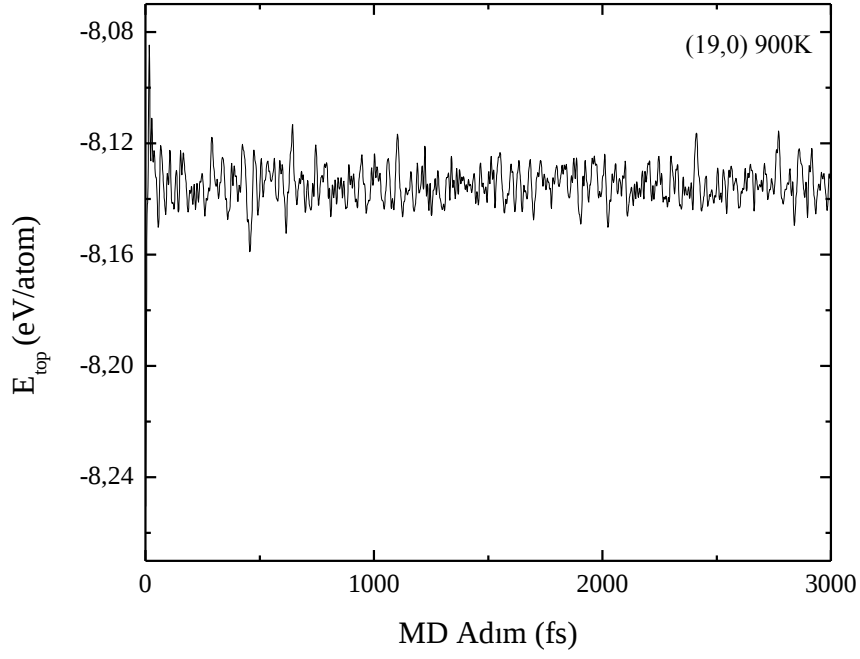
5.4.1 Yüksek Sıcaklıklarda Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler

Günümüz teknolojisinde, KNT'ler bilinen en sağlam malzeme olma özelliğine sahiptirler. Doktora tezimde, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'ler incelenerek, bu KNT'lerin hangi sıcaklıklara kadar kararlılıklarını koruduklarını, hangi sıcaklık değerinden sonra yapılarında bozulma olduğu detaylı bir şekilde incelenmiştir. Simülasyon çalışmalarında, sıcaklık parametresi düşük – yüksek sıcaklık olmak üzere iki grupta toplandı. Düşük sıcaklık çalışmalarında sıcaklık aralığı 0.1K'den 300K'e kadar 20K aralıklarla 16 farklı veri noktası alınarak incelenmiştir. Düşük sıcaklıkta TDKNT'lerin yapılarında herhangi bir deformasyon olmadığı yapılan çalışmalardan alınan sonuçlardan görülmektedir. Yüksek sıcaklık çalışmalarında, sıcaklık aralığı 300K'den başlayarak 3000K'e kadar 300K aralıklarla 8 farklı veri noktası alınarak incelenmiştir. Yüksek sıcaklığa maruz kalan TDKNT'lerin farklı sıcaklıklarda kendilerine has dayanıklılıkları oldukları yapılan çalışmalar sonucunda görülmüştür.

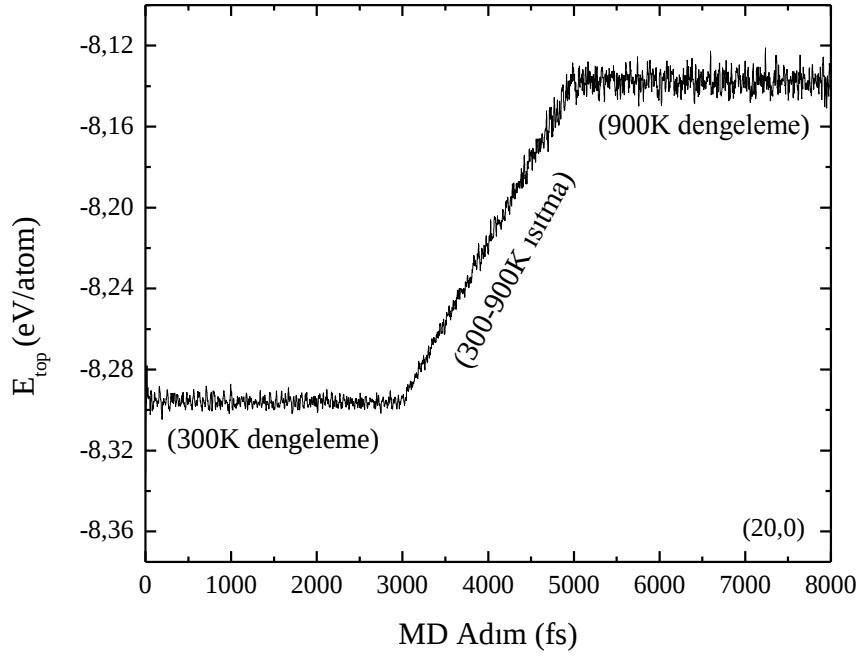
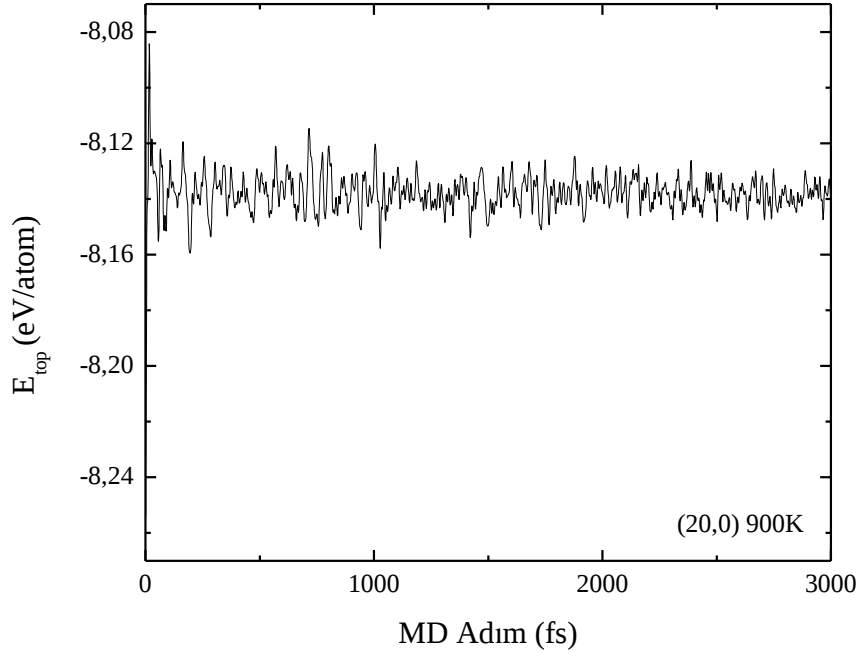
Simülasyon çalışmalarında ısıtma işlemi iki farklı yöntemle TDKNT'ler üzerine uygulandı. Bunlardan birincisi ısısal dengeleme, ikincisi aşamalı ısıtma yöntemidir. Isısal dengeleme yönteminde, simüle edilen TDKNT istenilen sıcaklık değerinde 3ps süresince dengeleme işlemine maruz bırakılmıştır. Aşamalı ısıtma yönteminde ise, sistem istenilen sıcaklık değerine aşamalı olarak çıkartılmakta ve sistemin istenilen sıcaklıkta dengelenmesi sağlanmaktadır. Şekil 5.107- 5.110'da (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 900K sıcaklıkta toplam ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle denge durumlarındaki enerji grafikleri çizilmiştir. Toplam enerjiler bu sıcaklık değerinde ortalama bir değerde kararlı olarak salınım yapmaktadır. Dayanıklılık çalışmalarında TDKNT'ler ısısal dengeleme yöntemiyle dengeye getirilerek simüle edildi.



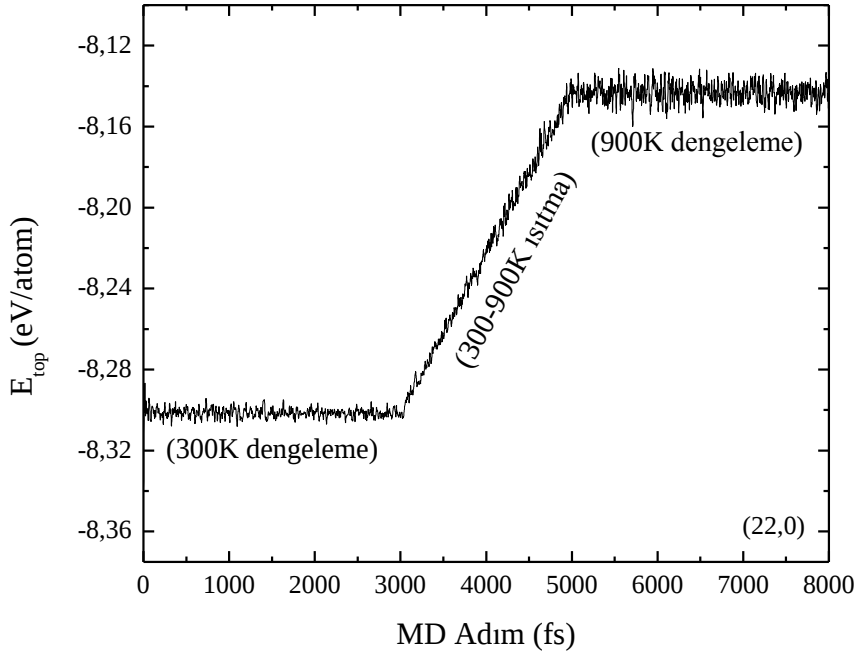
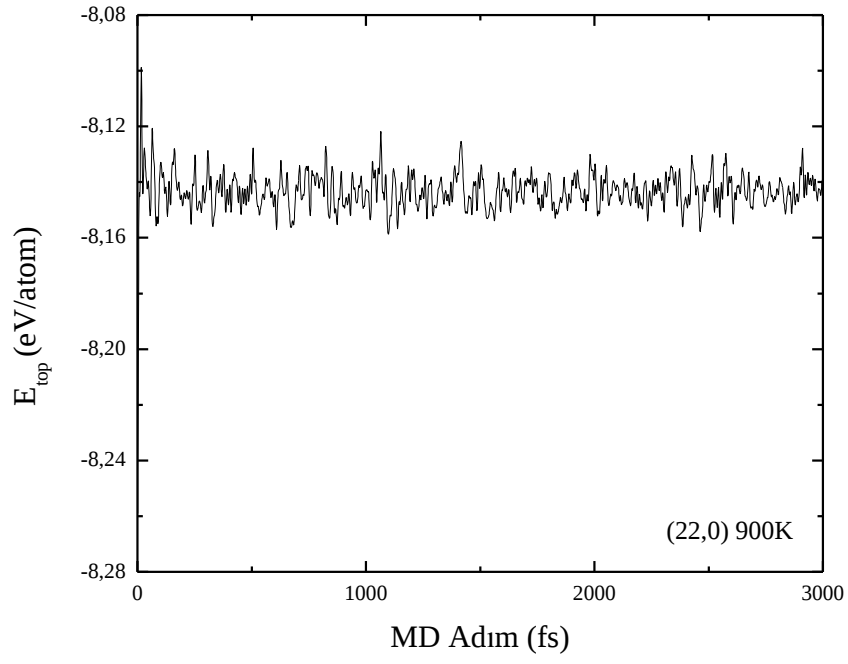
Şekil 5. 107 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi



Şekil 5. 108 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi

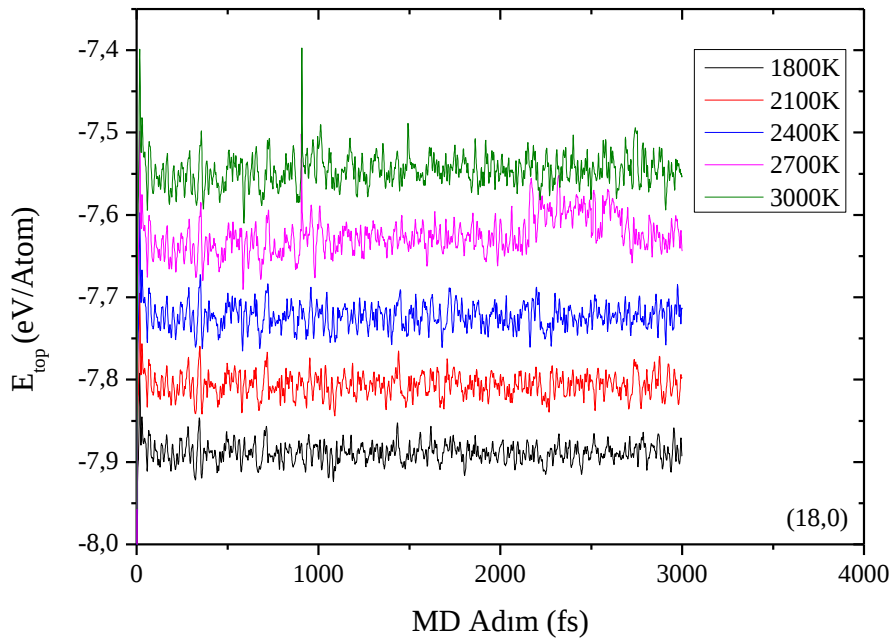


Şekil 5. 109 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi

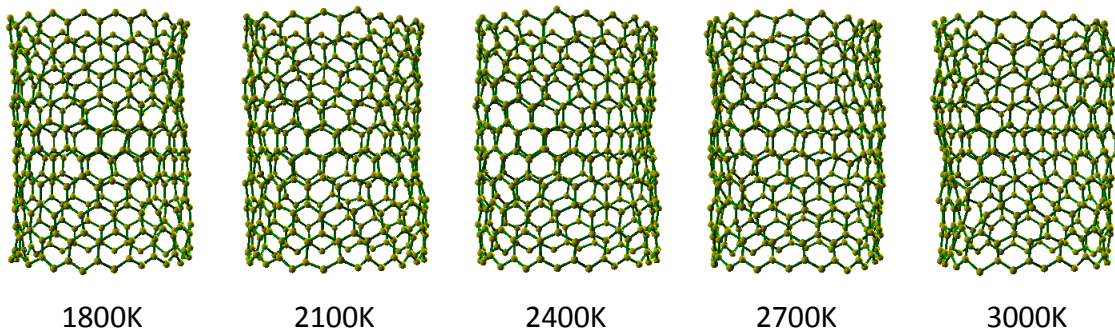


Şekil 5. 110 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklığında ısısal dengeleme ve aşamalı ısıtma yöntemiyle toplam enerjisinin değişimi

Yüksek sıcaklık değerlerine çıktığımızda enerji grafiklerinde denge durumundaki enerji değerinden ani sapmalar, farklı enerji değerlerinde düzensiz salınımlar vb. farklılıklar göze çarpmaktadır. Enerji grafiklerindeki bu düzensizlik yapısal kararlılığın bozulduğu durumları göstermektedir. Dengeden ani sapmalar sistemden atom veya atomların koptuğunu göstermektedir. TDKNT'lerin enerji grafikleri çizilip, denge durumlarından olan sapmalar belirlendikten sonra belirlenen sıcaklık değerinde TDKNT'lerin simülasyon görüntüleri alınarak sistemden kopan atom ve/veya atomların tespiti yapılmıştır.

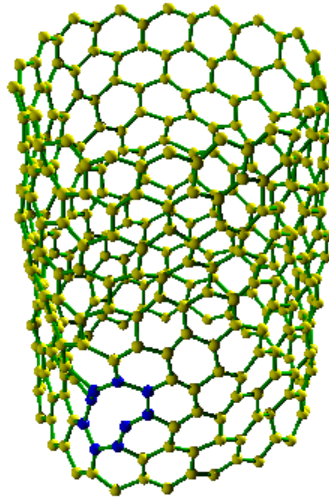


Şekil 5. 111 (18,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi



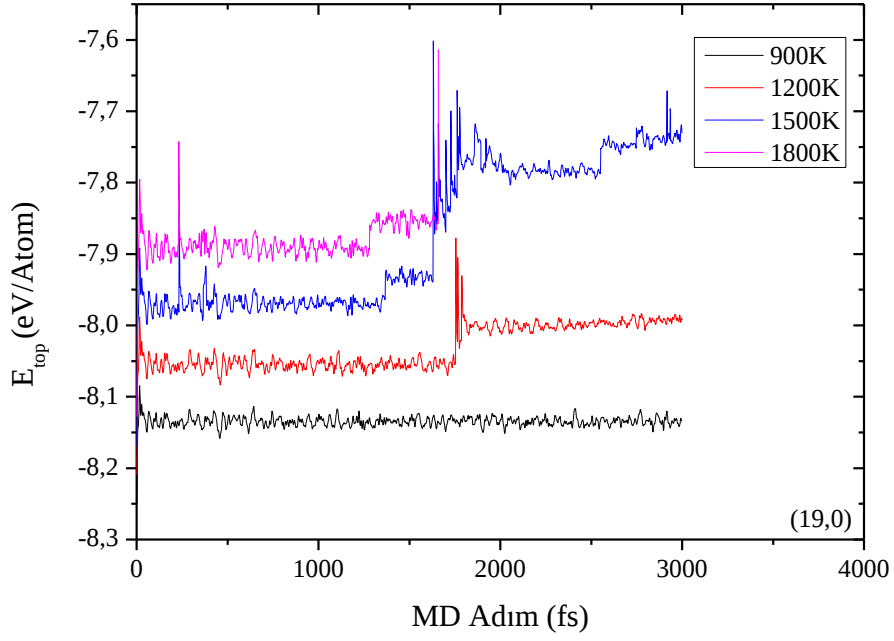
Şekil 5. 112 (18,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri

Şekil 5.111’de (18,0) zigzag TDKNT’nin 1800 – 3000K sıcaklık değerlerinde toplam enerjisindeki değişim görülmektedir. (18,0) zigzag TDKNT 1800, 2100 ve 2400K sıcaklık değerlerinde sırasıyla -7,88889, -7, 80678 ve -7,72340 eV ortalama enerji değerlerinde salınım yapmaktadır. 2700K ve 3000K sıcaklıklara gelindiğinde 750 – 1000 moleküler dinamik adımları arasında denge durumundan ani sapmaların, 2700K’de 2000 – 3000 moleküler dinamik adımları arasında ise sistemin denge durumundan saptığı ve denge durumundan farklı bir değerde salınım yaptığı gözükmemektedir. Şekil 5.112’de (18,0) zigzag TDKNT’nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri gösterilmiştir. Şekil 5.113’de (18,0) zigzag TDKNT’nin yapısal kararlılığının bozulduğu andaki simülasyon görüntüsü görülmektedir. 2700K sıcaklıkta (18,0) zigzag TDKNT için 0.75 – 1fs zaman aralığında sistemden atom kopmaları meydana gelmiştir. Şekil 5.113’deki mavi renkle işaretli bölgeden atom kopmaları başlamıştır.



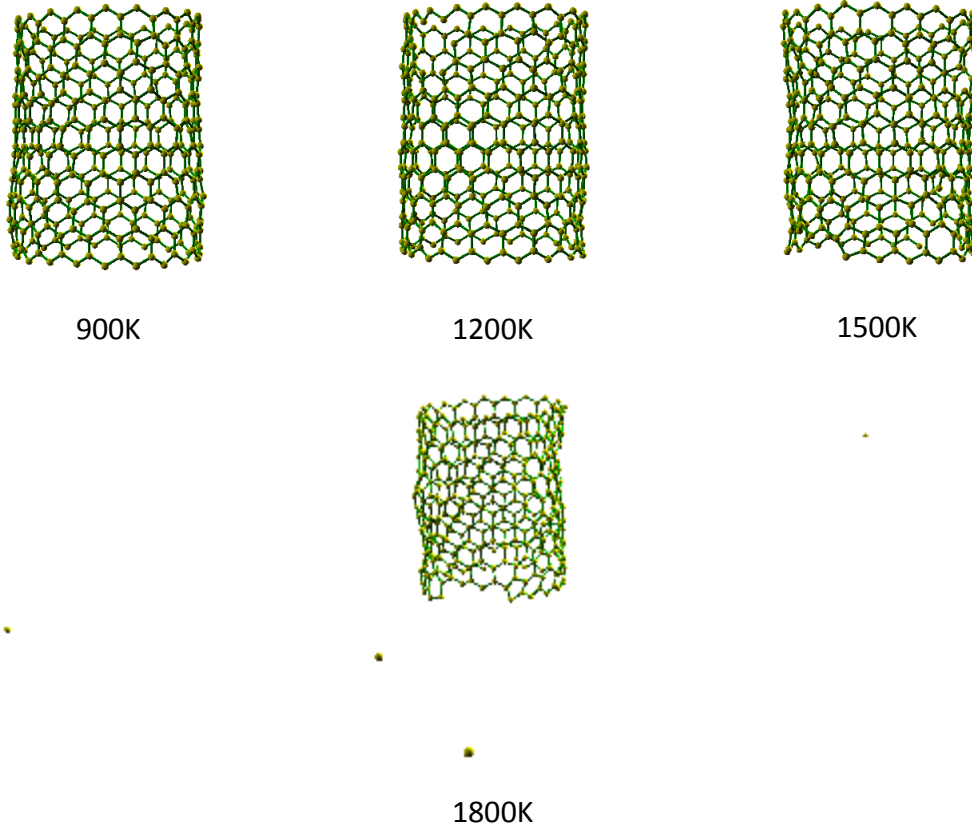
Şekil 5. 113 (18,0) Zigzag TDKNT’nin 3000K’de yapısal kararlılığının bozulduğu simülasyon görüntüsü

Şekil 5.114’de (19,0) zigzag TDKNT’nin 900 – 1800K sıcaklık değerlerinde toplam enerjisindeki değişim görülmektedir. (19,0) zigzag TDKNT 900K sıcaklık değerinde -8,13456 eV ortalama enerji değerinde salınım yapmaktadır. 1200 – 1500K sıcaklıklarda 1000 – 2000 MD adım aralığında, 1500K sıcaklıkta 0 – 500 MD adım ve 1500 MD adımdan sonra denge durumundan sapmalar ve atom kopmaları görülmektedir.



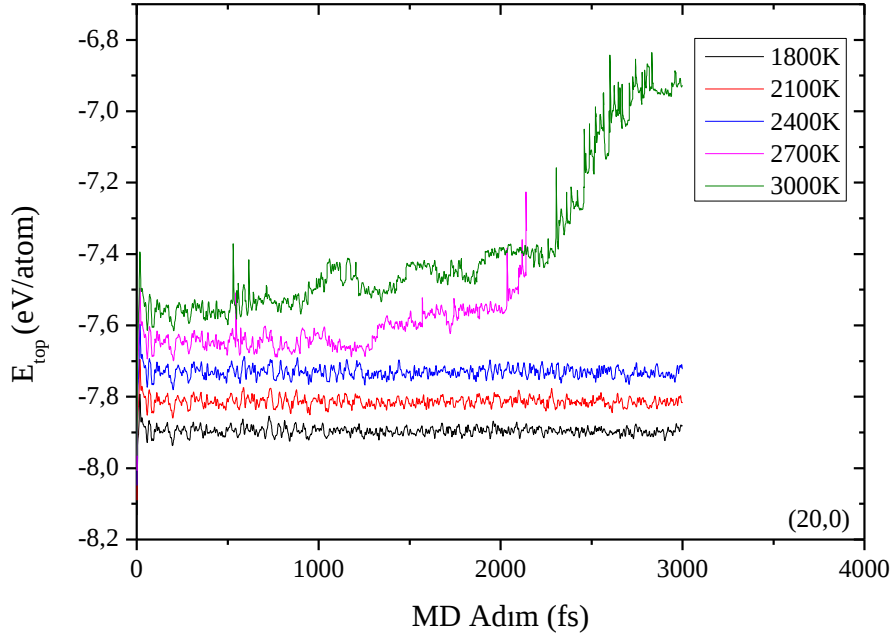
Şekil 5. 114 (19,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi

Şekil 5.115'de (19,0) zigzag TDKNT'nin farklı sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri görülmektedir. Şekillerde sistemde meydana gelen deformasyon (atom kopmaları) görülmektedir.



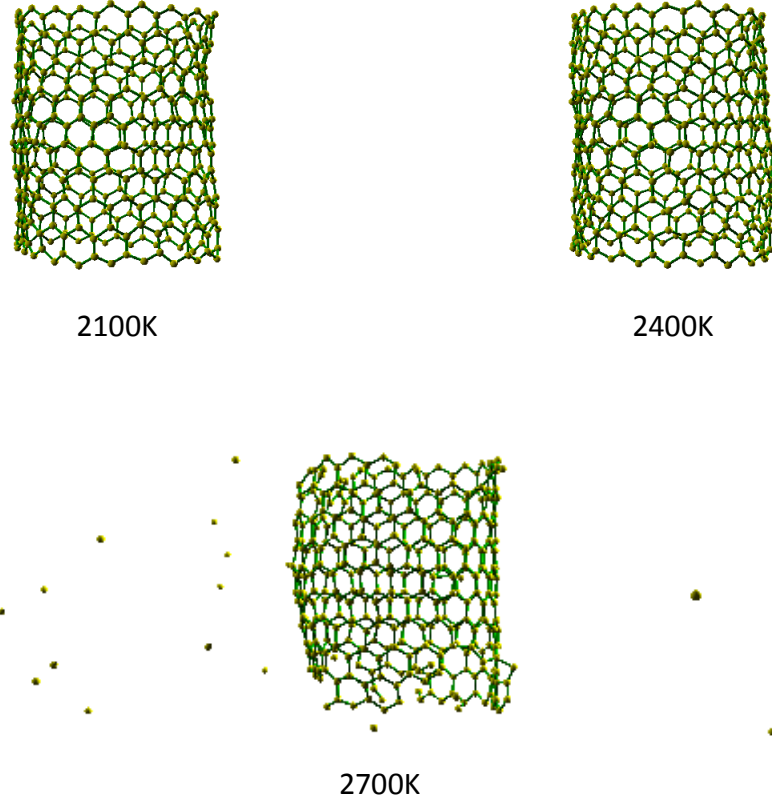
Şekil 5. 115 (19,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri

(19,0) zigzag TDKNT'de 1200K sıcaklıktan itibaren yapının farklı bölgelerinden atomlar kopmaya başlamış, sıcaklık artışıyla birlikte 1800K'de yapı tamamen deforme olmuştur (Şekil 5.115). (20,0) zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda (1800 – 3000K) toplam enerjisindeki değişim görülmektedir (Şekil 5.116). (20,0) zigzag TDKNT 1800, 2100, ve 2400K sıcaklık değerlerinde sırasıyla -7,89590, -7, 81378 ve -7,73083 eV ortalama enerji değerlerin salınım yapmaktadır. Şekil 5.116'da 2400K sıcaklık değerine kadar yapıda bir bozulmanın olmadığı, sıcaklık değerinin artırılmasıyla 2700K sıcaklık değerinde yapısal kararlılığın bozulduğu görülmektedir. 2700 – 3000K sıcaklıklarda ilk 500 MD adım aralığından sonra (20,0) zigzag TDKNT'nin enerji grafiğinde denge durumundan sapmaların olduğu görülmektedir. Şekil 5.117'de (20,0) zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri görülmektedir.

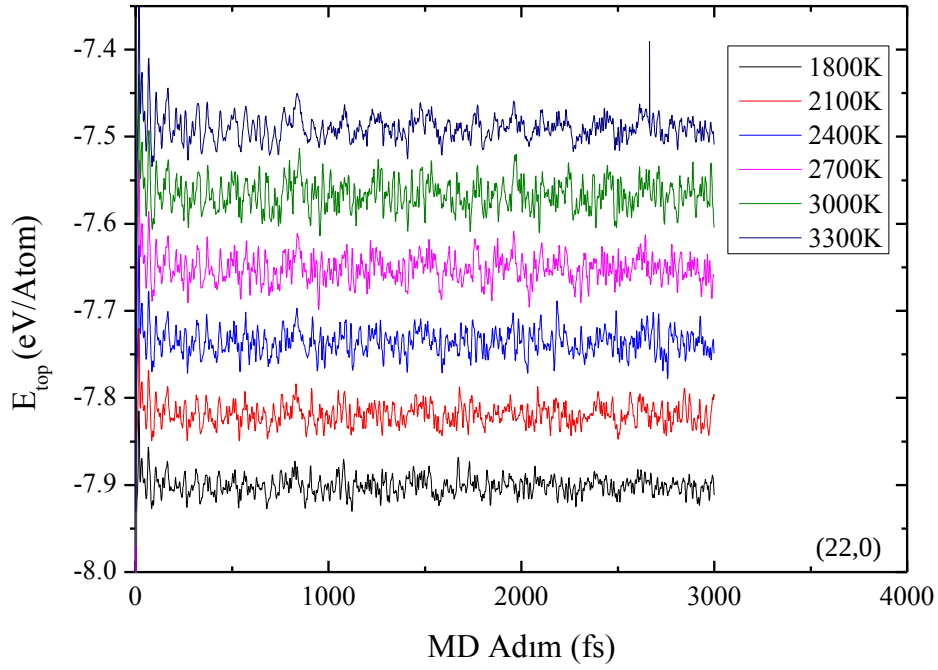


Şekil 5. 116 (20,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi

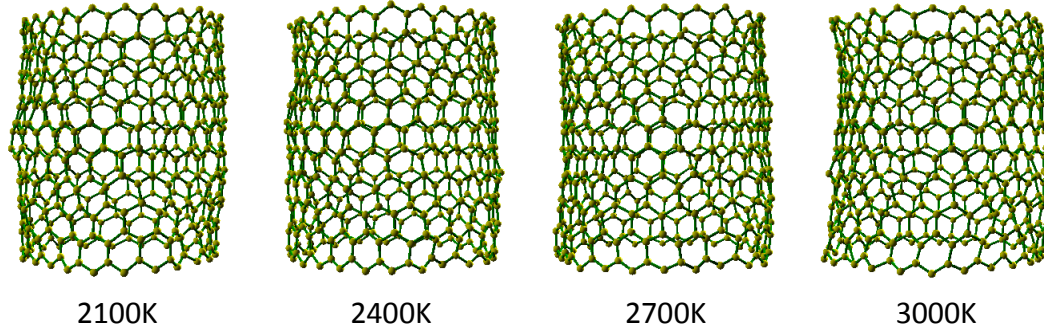
(20,0) zigzag TDKNT, 2400K'e kadar yapısal kararlılığını korurken, sıcaklık artışına bağlı olarak 2700K'den sonra yapıdan atomların koptuğu ve yapısal kararlılığın bozulduğu görülmüştür (Şekil 5.117).



Şekil 5. 117 (20,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri



Şekil 5. 118 (22,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin zamana göre değişimi



Şekil 5. 119 (22,0) Zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklardaki simülasyon görüntüleri

Şekil 5.118'de (22,0) zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjisinin simülasyon zamanına göre değişimi görülmektedir. (22,0) zigzag TDKNT 1800, 2100, ve 2400K sıcaklıklarında sırasıyla -7,90124, -7,81911 ve -7,73591 eV ortalama enerji değerinde salınım yapmaktadır. Şekil 5.119'da (22,0) zigzag TDKNT'nin yüksek sıcaklık değerlerindeki simülasyon görüntüleri görülmektedir. 3300K sıcaklıkta (22,0) zigzag TDKNT için 2.5 – 3fs zaman aralığında sistemden atom kopmaları meydana gelmektedir.

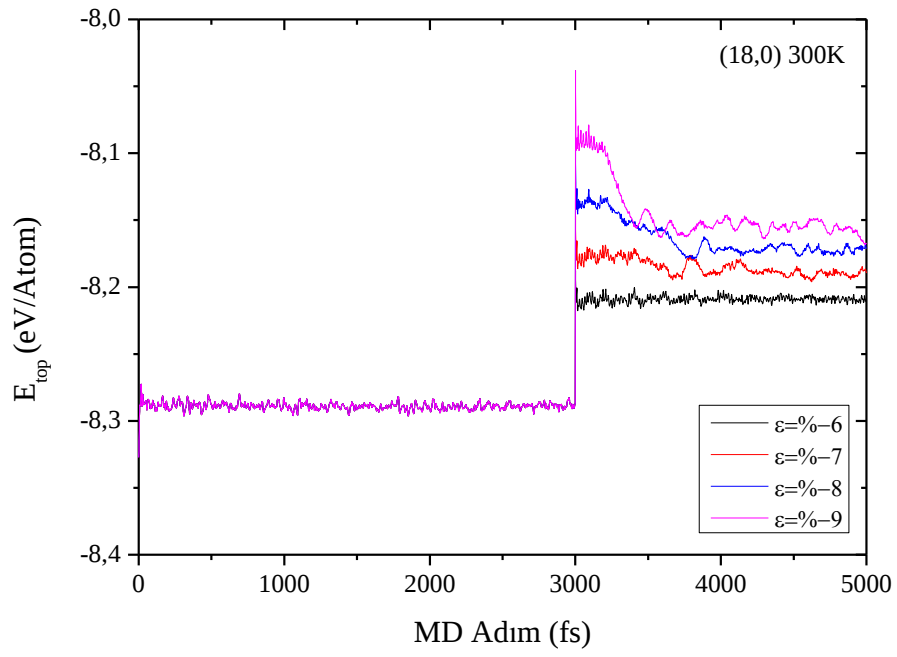
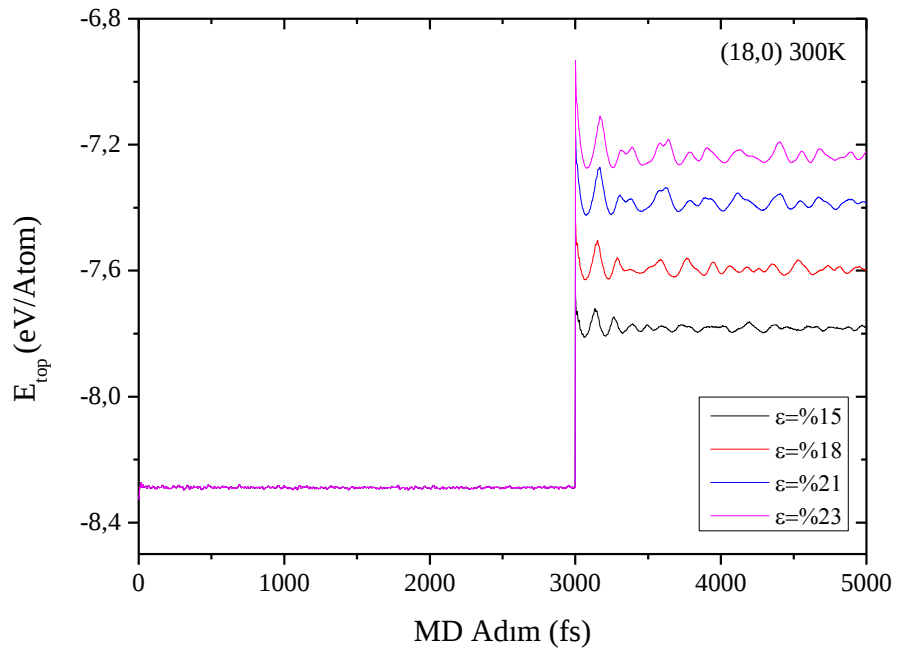
5.4.2 300K Sıcaklığında Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler

TDKNT'ler boylarına, çaplarına ve kiralitelerine bağlı olarak üzerlerine uygulanan gerinim altında yüksek dayanıklılığa sahip malzemelerdir. TDKNT'ler üzerine uygulanan germe – sıkıştırma deformasyonları ile elektronik özelliklerinin değişebilir olması ve bu elektronik özellikleri nedeniyle geleceğin elektronik aygıt tasarımlarında kullanılacak olması nedeniyle, bu yapıların dayanıklılık çalışmalarını önemli kılmaktadır.

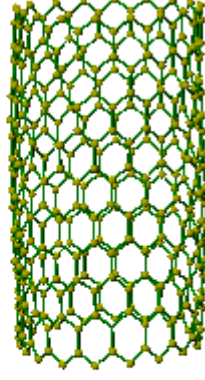
Simülasyonlarda, TDKNT'lere germe – sıkıştırma gerinimleri tüp eksenini boyunca (5.1) eşitliğiyle uygulanmıştır. Simülasyon çalışmalarında, “negatif” gerinim değerleri aksiyel sıkıştırmayı, “pozitif” gerinim değerleri de aksiyel germeyi ifade etmektedir. TDKNT'lerin gerinim değerleri z – doğrultusunda % boy artışı olarak uygulandı.

Germe – sıkıştırma çalışmaları 300K sıcaklık değerinde (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere germe için %1'den %23'e, sıkıştırma için de %1'den %9'a kadar gerinimler uygulanarak çalışılmıştır.

Şekil 5.120'de (18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi gösterilmiştir. 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi altında 3ps süresince çizilen simülasyon görüntülerinden $\varepsilon = \%21$ değerinde tüp eksenini boyunca daralmaların olduğu fakat yapının bozulmadığı, $\varepsilon = \%23$ değerinde tüp ekseninden atom kopmalarının başladığı görüldü (Şekil 5.121).

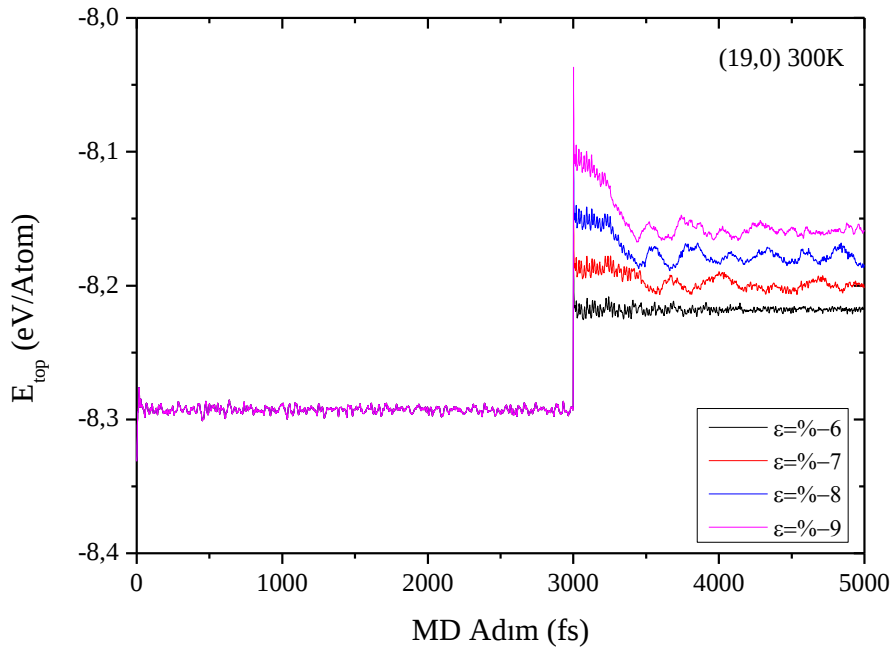
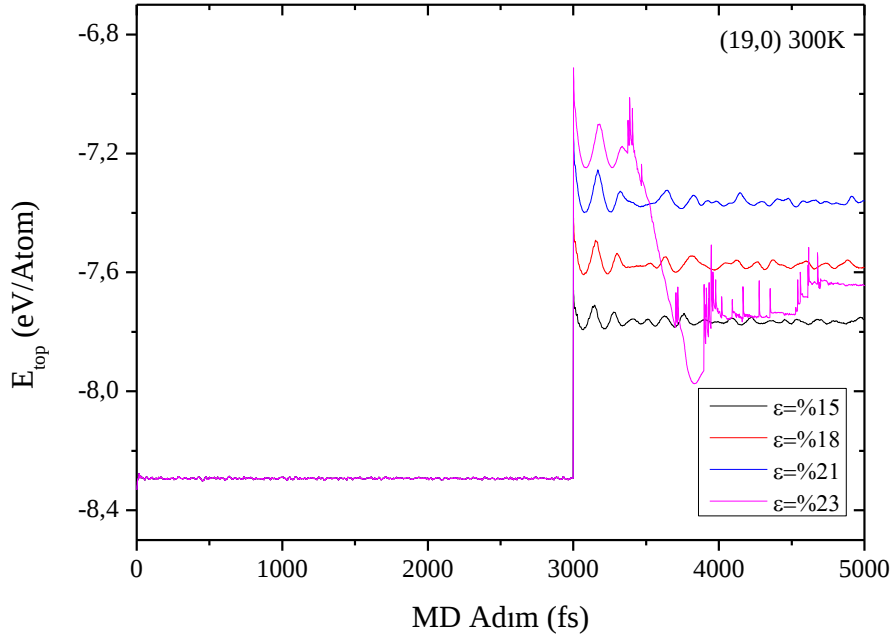


Şekil 5. 120 (18,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi

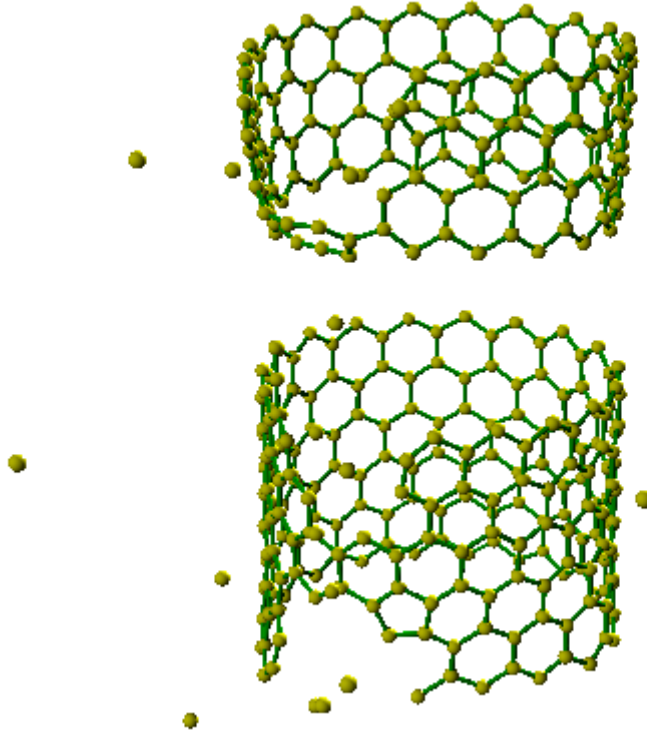


Şekil 5. 121 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü

300K sıcaklıkta, germe – sıkıştırma etkisi altında (19,0) zigzag TDKNT'nin dayanıklılık çalışmaları incelendi. Şekil 5.122'de (19,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi görülmektedir. $\varepsilon = \%15$, $\varepsilon = \%18$ ve $\varepsilon = \%21$ germe etkisi altında (19,0) zigzag TDKNT'nin 2000 MD adım süresince dengede olduğu gözlenirken, gerinim artışına bağlı olarak ($\varepsilon = \%23$) atomların yapıdan koptuğu ve sistemin tamamen dağıldığı görüldü (Şekil 5.123).

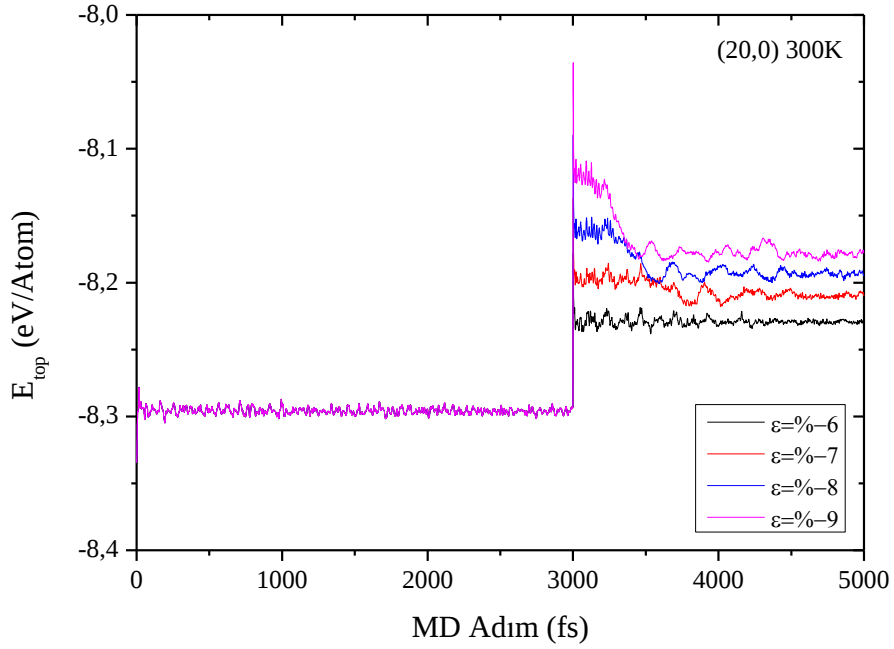
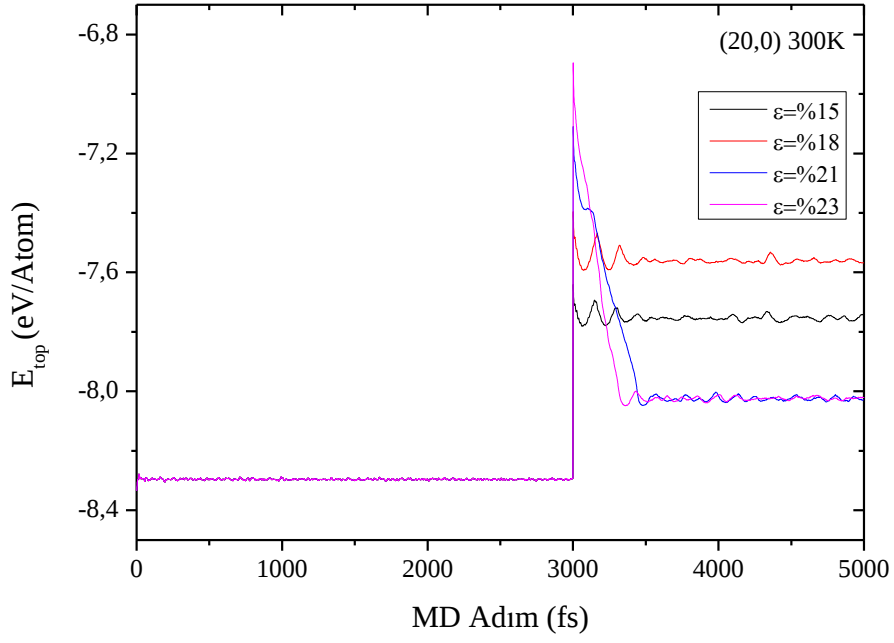


Şekil 5. 122 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi

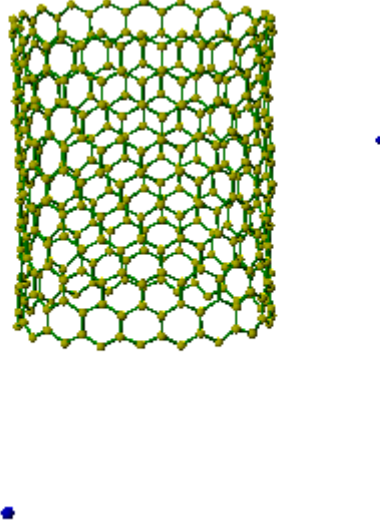


Şekil 5. 123 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü

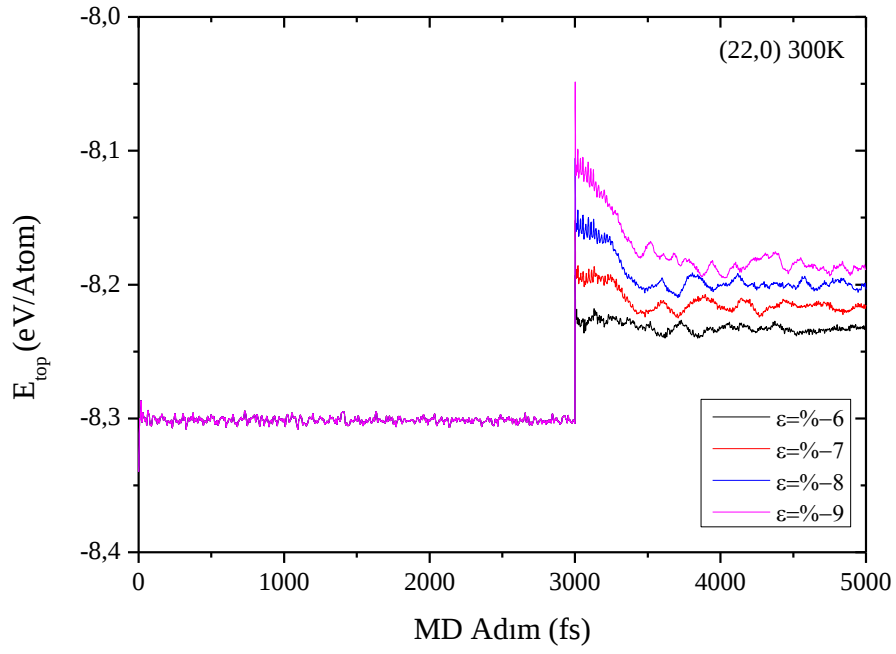
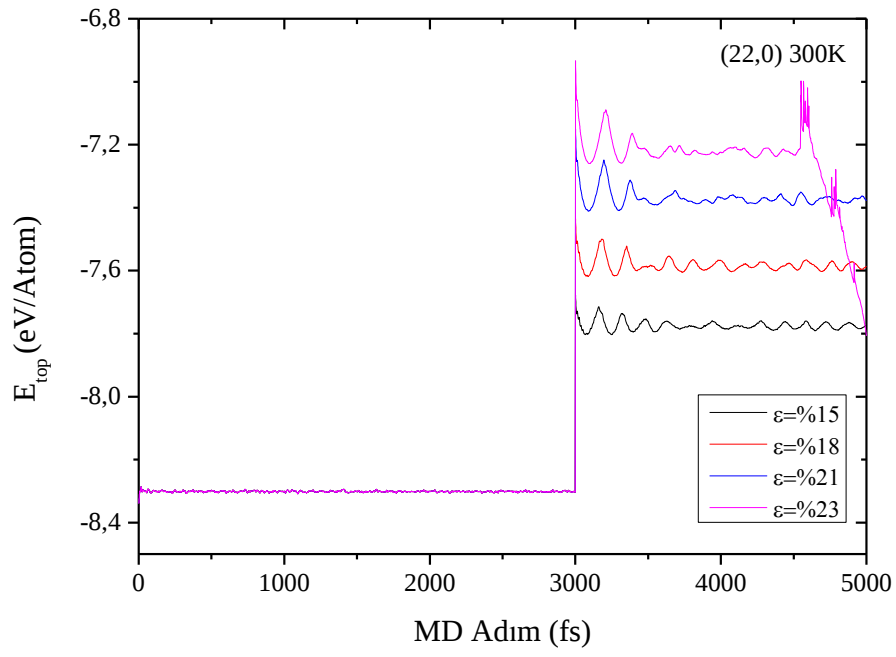
(20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerinde germe – sıkıştırma etkisi altında dayanıklılık çalışmaları incelendi. Şekil 5.124 ve Şekil 5.126'da sırasıyla (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin simülasyon zamanına göre değişimi görülmektedir. (20,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%18$ germe etkisine kadar yapısal kararlılığını koruduğu, gerinim artışına bağlı olarak $\varepsilon = \%21$ gerinim değerinden sonra sistemden atom kopmalarının başladığı görülmektedir (Şekil 5.125). Şeki 5.125'de sistemden kopan atomlar mavi renkli olarak gösterilmiştir. Benzer şekilde, (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde germe – sıkıştırma etkisi altında dayanıklılığı incelendiğinde sistemin $\varepsilon = \%21$ germeye kadar dayanıklı olduğu gözlenirken, gerinim artışına bağlı olarak $\varepsilon = \%23$ gerinim değerinde yapıdan atomların koparak sistemin tamamen dağıldığı görülmektedir (Şekil 5.126). Şekil 5.127'de (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü görülmektedir.



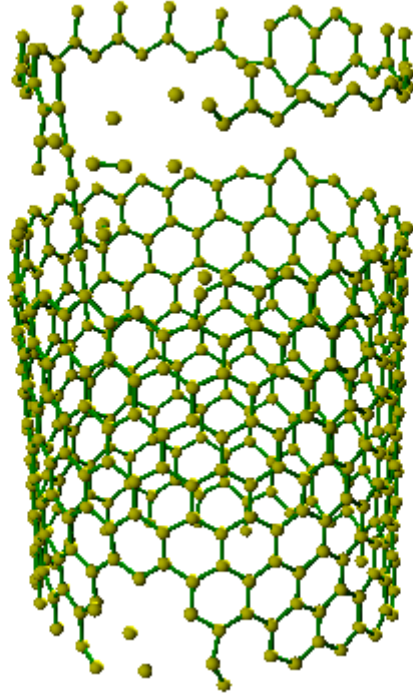
Şekil 5. 124 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi



Şekil 5. 125 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%21$ değerinde simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 126 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjisinin zamana göre değişimi



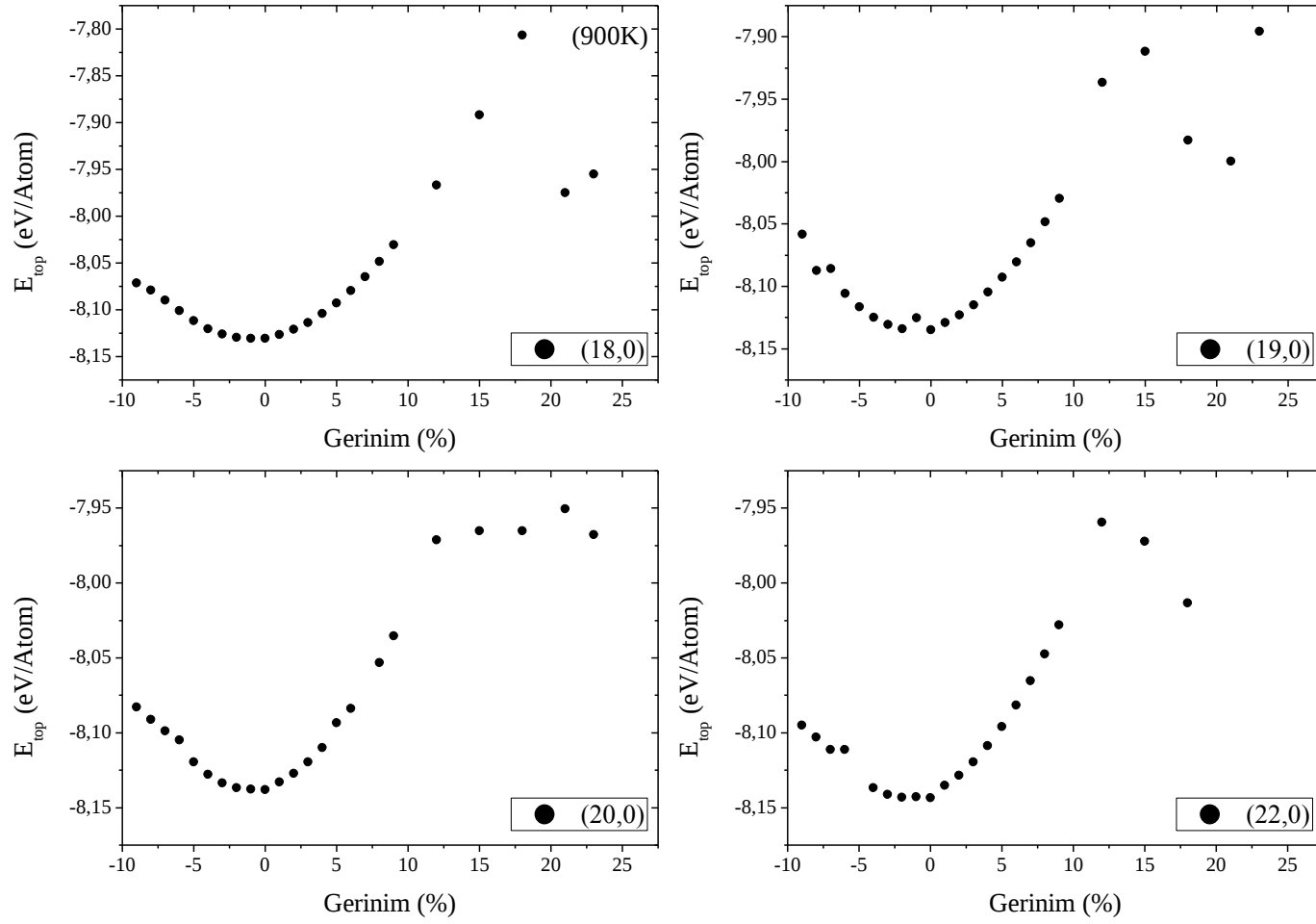
Şekil 5. 127 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklıkta $\varepsilon = \%23$ değerinde simülasyon görüntüsü

5.4.3 Yüksek Sıcaklıklarda Germe – Sıkıştırma Etkisi Altında Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler

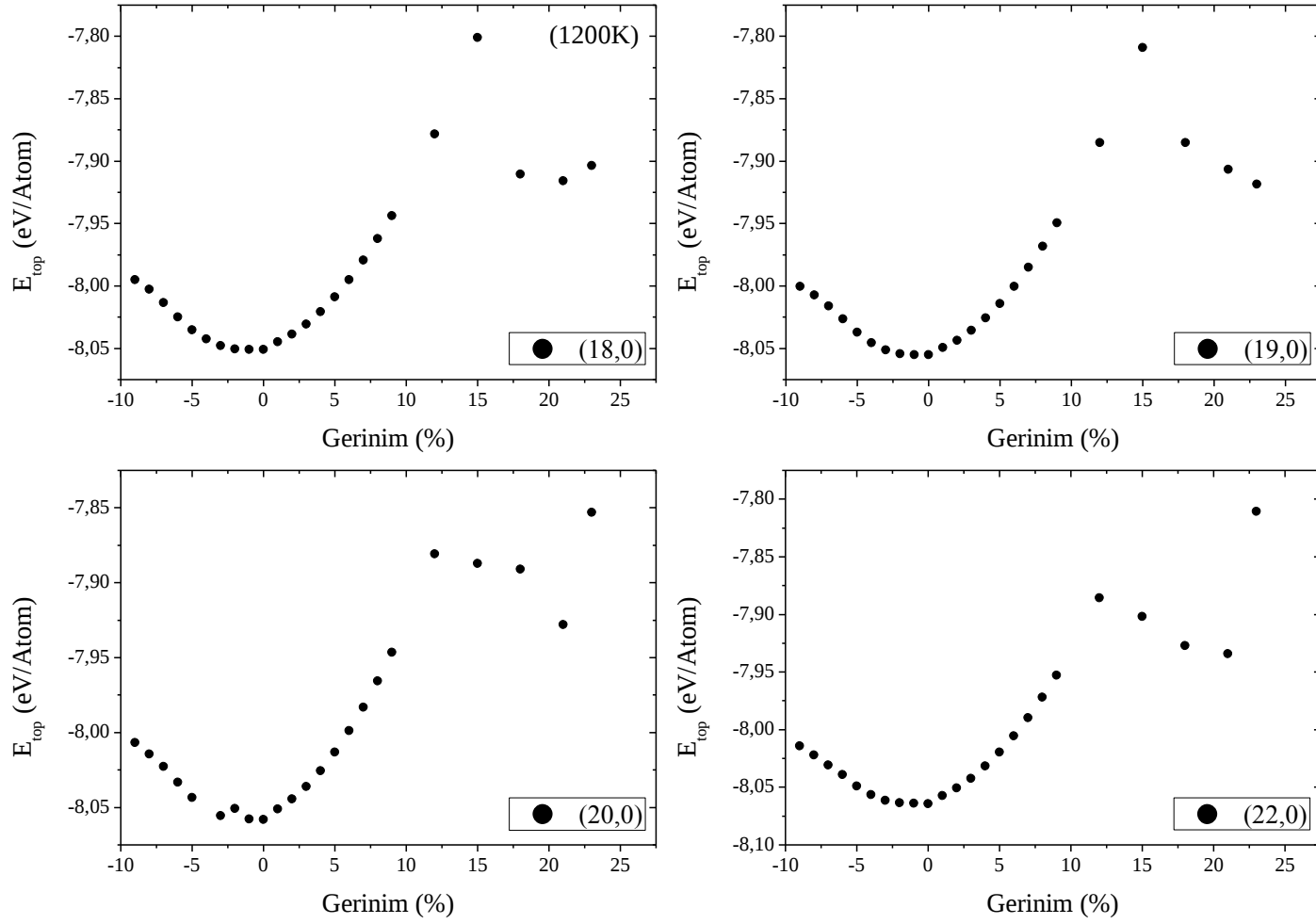
TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkileyen parametrelerden birisi de sıcaklıktır. Sıcaklık, nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından kritik bir parametredir. Doktora tezimde, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'ler incelenerek çalışılan karbon nanotüplerin belirtilen sıcaklık değerlerinde üzerlerine uygulanan gerinime bağlı olarak ne kadar kararlı oldukları, hangi gerinim değerinde yapılarında bozulma olduğu incelenmiştir. Yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi çalışmalarda, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere 900 – 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde germe için %1'den %23'e, sıkıştırma için de %1'den %9'a kadar gerinimler uygulanmıştır. Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapılmıştır. Uygulanan gerinim değerleri ise belirlenen sıcaklıkta denge durumundaki TDKNT'lerin üzerine 2000 MD adım olacak şekilde uygulanmıştır. Çalışmada zigzag TDKNT'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (n_{layer}) 20 olarak seçilmiştir.

Şekil 5.72, 5.82, 5.86 ve 5.99'da sırasıyla (18,0), (19,0), (22,0) ve (20,0) zigzag TDKNT'lerin 900K – 1200K ve 1500K sıcaklıklarında 3000 MD adım simülasyon süresince $\varepsilon = 0$ denge durumunda toplam enerjilerinin değişimi gösterilmiştir.

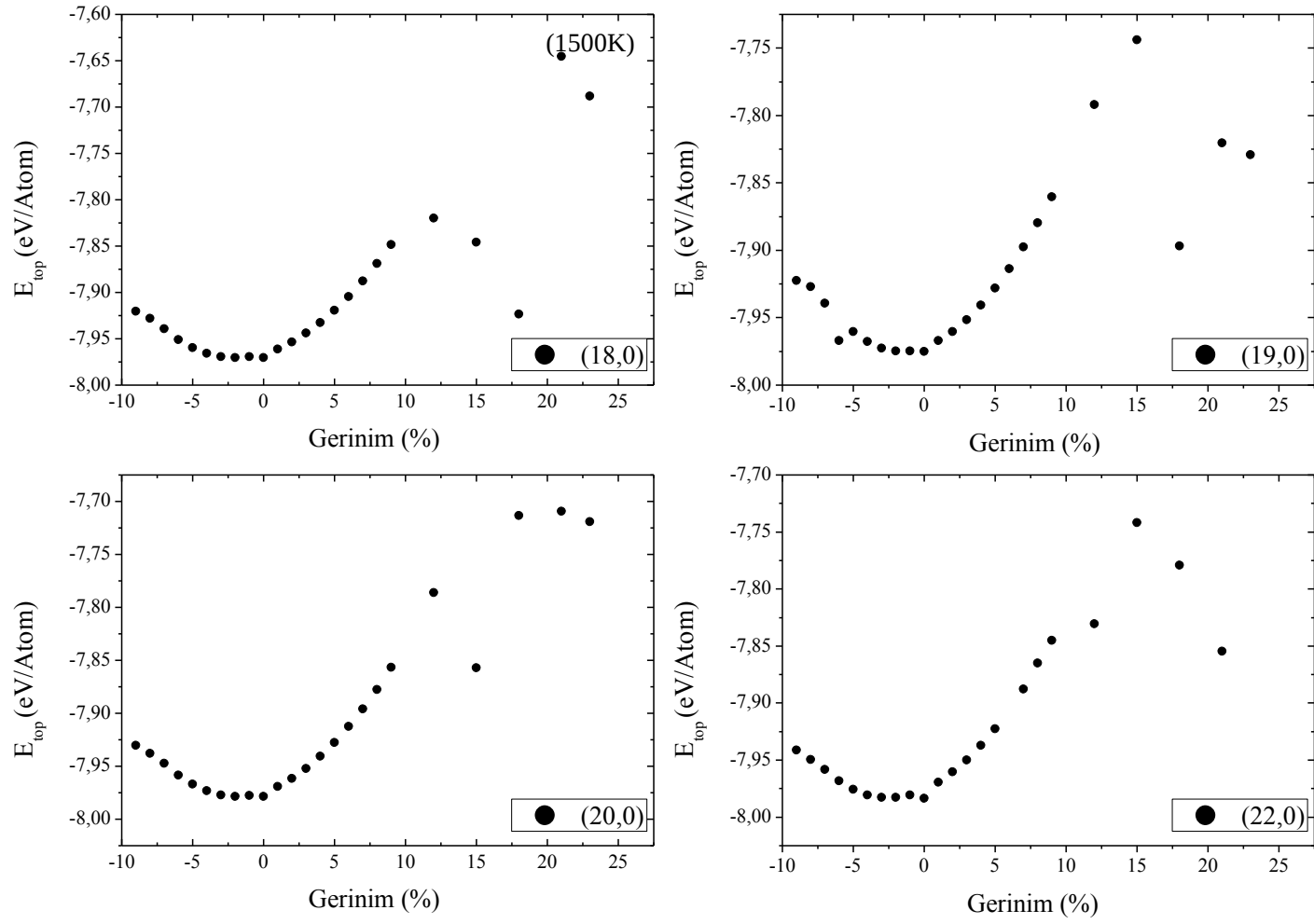
Şekil 5.128 – 5.130'da sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 900K – 1200K ve 1500K sıcaklık değerlerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağlı olarak değişimi gösterilmiştir. Şekillerde, “negatif” gerinim değerleri eksenel sıkıştırmayı, “pozitif” gerinim değerleri de eksenel germeyi ifade etmektedir. Uygulanan gerinime bağlı olarak, atom başına toplam enerji artmaktadır.



Şekil 5. 128 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 900K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

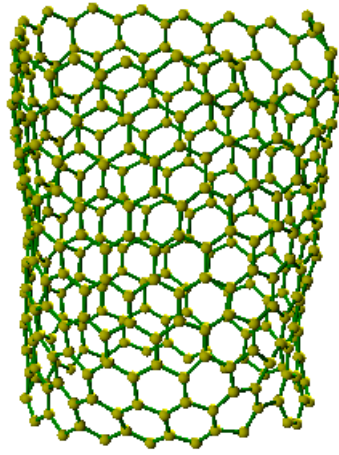


Şekil 5. 129 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 1200K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

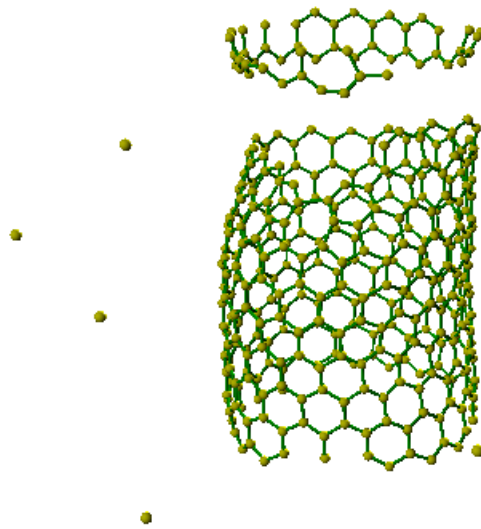


Şekil 5. 130 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin 1500K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

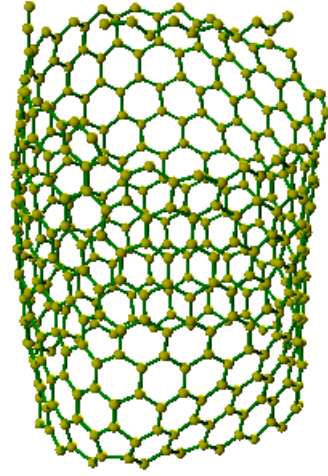
900K sıcaklık değerinde atom başına toplam enerjinin gerinime bağılı değişimi incelendiğinde (18,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%18$, (19,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%12$, (20,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%15$ ve son olarak (22,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%12$ gerinim değerlerine kadar yapısal kararlılıklarını korudukları tespit edildi. Şekil 5.131 – 134'de sırasıyla (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 900K sıcaklık değerinde üzerlerine uygulanan gerinime bağılı olarak deforme oldukları simülasyon görüntüleri verilmiştir.



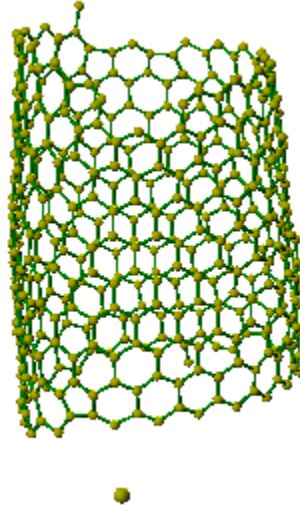
Şekil 5. 131 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%21$ değerinde simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 132 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerinde simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 133 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerinde simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 134 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 900K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerinde simülasyon görüntüsü

1200K sıcaklık değeriinde germe – sıkıştırma etkisi altında (18,0), (19,0), ve (20,0) zigzag TDKNT'ler $\varepsilon = \%18$, (22,0) zigzag TDKNT $\varepsilon = \%15$ gerinim değeriinde sistemden atom ve/veya atom grupları koparak sistemin yapısal kararlılığı bozulmaktadır. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 1200K sıcaklık değeriinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki simülasyon görüntüleri EK- C bölümünde verilmiştir.

Şekil 5.130'daki 1500K sıcaklık değeriinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin atom başına toplam enerjilerinin değişimine bakıldığında, (18,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%12$, (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin $\varepsilon = \%15$ germe değeriinde yapısal kararlılıklarının bozulduğu görölmektedir. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 1500K sıcaklık değeriinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki simülasyon görüntüleri EK- C bölümünde verilmiştir.

SONUÇLAR ve ÖNERİLER

Tezin ilk bölümünde, 0.1, 300, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki zigzag TDKNT’lerin elektronik ($E_f, eDOS, E_g$) ve fiziksel özellikleri ($BADF, BUDF, RDF, AKS$) Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) simülasyon yöntemi kullanılarak incelendi. Simülasyon yöntemi, simülasyon zamanının sistemdeki atom sayısı ile doğru orantılı olarak değişmesi nedeniyle zamandan büyük ölçüde kazanç sağlayan, hesapların gerçek uzayda yapıldığı ve simülasyonlarda sıcaklık parametresinin değişmesine olanak sağlayan bir yöntemdir. Çalışmalarda zigzag TDKNT’ler;

- i. $(n - m) = 3q,$
- ii. $(n - m) = 3q + 1$
- iii. $(n - m) = 3q + 2$

olarak üç grupta toplandı. Birinci gruba örnek (18,0) zigzag TDKNT, ikinci gruba örnek (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT, üçüncü gruba örnek olarak (20,0) zigzag TDKNT’ler simüle edildi. Literatürde $(n - m) = 3q$ grubundaki zigzag TDKNT’ler metalik özellik sergilerken, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki zigzag TDKNT’ler yarı iletken özellik sergilemektedir. Seçilen TDKNT’lerin yarıçapları sırasıyla 7.05, 7.45, 7.84 ve 8.62 Å değerindedir. Simülasyon çalışmalarında, TDKNT’lere germe – sıkıştırma gerinimleri tüp eksenine doğrultusunda $\varepsilon = (l - l_0)/l_0$ eşitliğiyle uygulandı. Burada l_0 : TDKNT’nin başlangıçtaki boyu, l : TDKNT’nin germe – sıkıştırma değerindeki boyunu göstermektedir. Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve

$\Delta t = 1fs$ deęerinde yapıldı. Uygulanan gerinim deęerleri ise denge durumundaki TDKNT'lerin üzerine 2000 MD adım olacak řekilde uygulandı. %1'den %23'e kadar germe, %1'den %9'a kadar da sıkıřtırma iřlemi uygulandı. Elektronik ve fiziksel özelliklerin hesaplandıęı, germe – sıkıřtırma gerinimlerinde TDKNT'ler yapısal kararlılıklarını ve elastik özelliklerini korumaktadır.

(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin her bir sıcaklık deęerinde farklı germe – sıkıřtırma deęerlerinde simülasyon görüntüleri, germe – sıkıřtırma etkisi altında toplam enerjilerinin zamana göre deęiřimi, atom başına toplam enerjinin, Fermi enerji seviyesinin, U_{rep} ve E_{bs} enerjilerinin gerinime göre deęiřimleri incelendi. Uygulanan gerinime baęlı olarak, atom başına toplam enerjinin arttıęı görüldü.

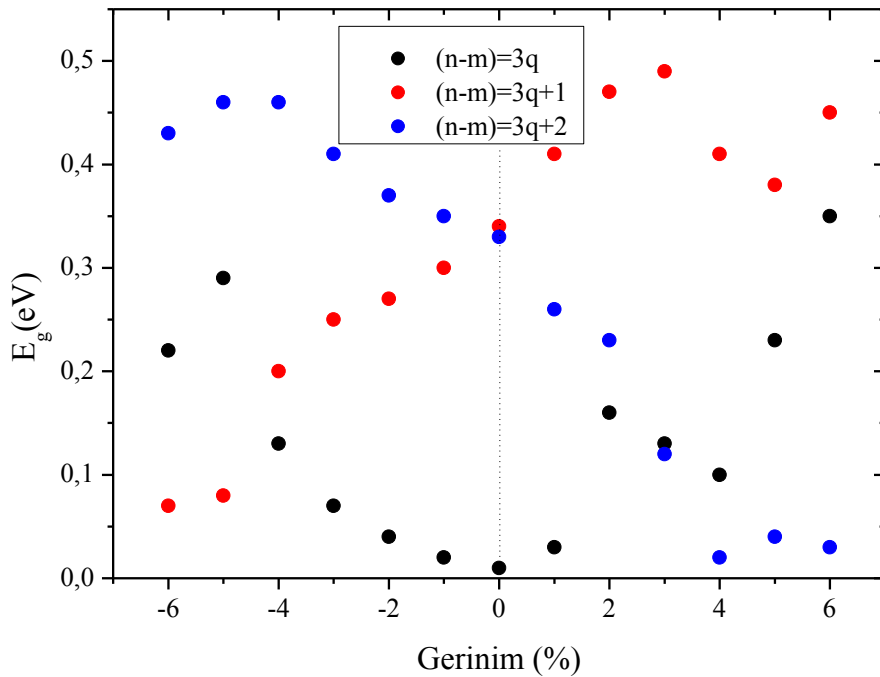
Çalıřılan zigzag TDKNT'lerin uygulanan gerinim deęerlerine baęlı olarak *eDOS* grafikleri çizildi. Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerinden her bir gerinim deęerinde TDKNT'lerin enerji bant aralıkları hesaplandı. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıřtırma etkisi altında enerji bant aralıklarındaki deęiřim TDKNT'lerin kiralitesine baęlı olarak deęiřiklik göstermektedir.

$(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT'nin *eDOS – Enerji (eV)* grafikleri incelendięinde, 300K sıcaklık deęerinde denge durumunda Fermi enerjisi civarında hesaplanan enerji bant aralıęı 0,01 eV deęerindedir. %6 germe ve %6 sıkıřtırma etkisi altında enerji bant aralıęı deęeri sırasıyla 0,35 ve 0,22 eV olarak hesaplandı. Uygulanan germe – sıkıřtırma gerinimlerine baęlı olarak enerji bant aralıęının arttıęı görüldü. Bu gruptaki zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan gerinime baęlı olarak metal – yarı iletken geçiři yapmaktadır.

$(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0), (22,0) zigzag TDKNT'lerin *eDOS – Enerji (eV)* grafikleri incelendięinde, 300K sıcaklık deęerinde denge durumunda Fermi enerjisi civarında hesaplanan enerji bant aralıkları sırasıyla 0,34 ve 0,27 eV deęerindedir. Denge durumunda her iki zigzag TDKNT yarı iletken davranıř sergilerken, üzerine uygulanan gerinine baęlı olarak bu davranıř deęiřmektedir. Uygulanan gerinime baęlı olarak, germe ile enerji bant aralıęının arttıęı, sıkıřtırma gerinimine baęlı olarak da enerji bant aralıęının azaldıęı görüldü. Denge durumunda 0,34 eV olan enerji bant aralıęına sahip (19,0) zigzag TDKNT, $\epsilon = \%3$ germe etkisinde 0.49 eV, $\epsilon = \% - 6$ sıkıřtırma etkisinde

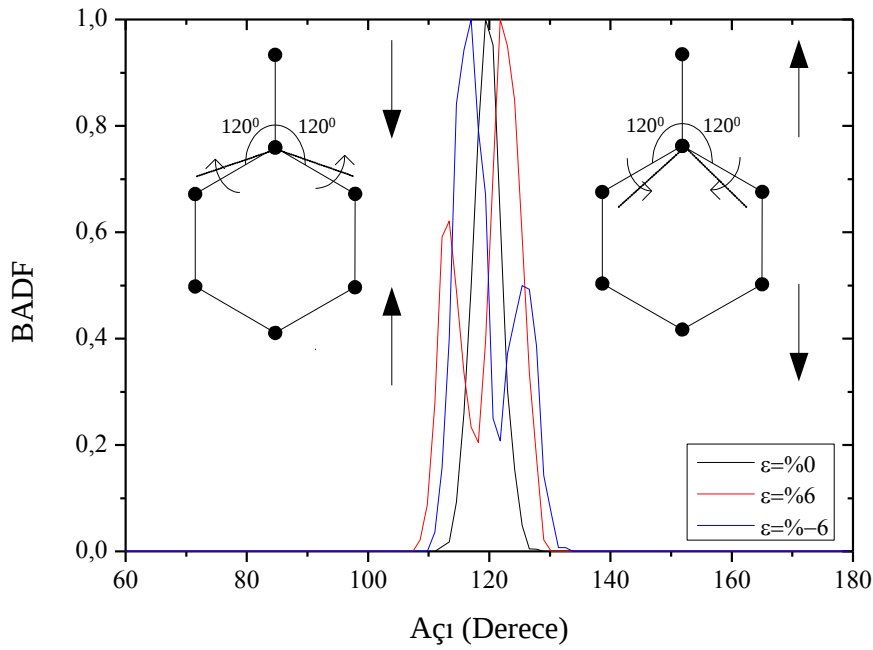
0,07 eV enerji bant aralığına sahiptir. Benzer şekilde, (22,0) zigzag TDKNT, $\varepsilon = 0$ denge durumun 0,27 eV enerji bant aralığına sahipken, $\varepsilon = \%3$ germe etkisi altında bu değer 0,41, $\varepsilon = \% - 6$ sıkıştırma etkisi altında 0,04 eV olarak hesaplandı. Bu gruptaki zigzag TDKNT'ler üzerine uygulanan sıkıştırma gerinimine bağlı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır.

$(n - m) = 3q + 2$ grubunda bulunan (20,0) zigzag TDKNT 300K sıcaklık değerinde denge durumunda 0,34 eV enerji bant aralığına sahiptir. Denge durumunda (20,0) zigzag TDKNT yarı iletken davranış sergilerken, üzerine uygulanan gerinime bağlı olarak enerji bant aralığı değişmektedir. $\varepsilon = \%6$ germe etkisi altında enerji bant aralığı 0,03 eV değerindeyken, $\varepsilon = \% - 5$ sıkıştırma etkisinde 0,46 eV değerindedir. (20,0) zigzag TDKNT üzerine uygulanan germe etkisi ile enerji bant aralığının azaldığı, sıkıştırma gerinimine bağlı olarak da enerji bant aralığının arttığı görüldü. Bu gruptaki zigzag TDKNT'ler üzerine germe gerinimine bağlı olarak yarı iletken – metal geçişi yapmaktadır.



Şekil 5. 135 $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığının gerinime bağlı değişimi

Literatürde benzer çalışmalar farklı metotlar kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Yoğunluk fonksiyonu teorisini kullanan SIESTA, VASP vb. paket programlar sistemdeki atom sayısına sınırlama getirdiğinden literatürde yapılan çalışmalarda küçük çaplı KNT'ler için sonuçlar vardır. Ayrıca yapılan simülasyon çalışmaları sıcaklık etkisini içermemektedir. Literatürde yapılan küçük çaplı KNT'lere örnek olarak; Guo vd.[102], Coluci vd. [103] ve Fang vd.[104] örnek verilebilir. Bu çalışmada germe – sıkıştırma etkisi altında kiraliteye bağlı olarak enerji bant aralığının değişimi için gösterdiğimiz trend (Şekil 5.135), az atom sayılı küçük çaplı KNT çalışmalarında da görülmektedir.



Şekil 5. 136 $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki Zigzag TDKNT'lerin bağ – açısı dağılım fonksiyonlarının gerinime bağlı değişimi

$(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklık değerinde *BADF*, *BUDF*, *RDF* ve *AKS* gibi fiziksel özellikleri gerinime bağlı olarak incelendi. Altıgen örgüdeki karbon atomları arasındaki açı 120° 'dir. 300K sıcaklıkta denge durumunda ($\varepsilon = 0$) (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) TDKNT'ler için altıgen örgüdeki bağ açısı dağılım fonksiyonu 119.4° açıda keskin bir tepe noktası verdi. TDKNT üzerine uygulanan pozitif gerinim ile referans karbon atomu ile bağ yapan karbon atomları arasındaki üç açıdan ikisi 120° 'den büyük

değerler alırken diğer açı 120° 'den küçük değer almaktadır. Şekil 5.136'dan görüldüğü üzere, %6 gerinim ile bağ açısı dağılım fonksiyonu sağa doğru kayarken (120° 'den büyük değer alırken), 120° 'den küçük oluşan açılar içinde bir kırınım oluşmaktadır. Benzer şekilde, uygulanan sıkıştırma gerinimiyle referans karbon atomu ile bağ yapan karbon atomları arasındaki üç açıdan ikisi 120° 'den küçük değer alırken diğer açı 120° 'den büyük değer almaktadır. %-6 gerinim ile bağ açısı dağılım fonksiyonu sola doğru kayarken (120° 'den küçük değer alırken), 120° 'den büyük oluşan açılar içinde bir kırınım oluşmaktadır. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonlarının gerinime göre değişimi incelendiğinde, germe etkisi altında TDKNT'lerin bağ-açısı dağılım fonksiyonları artarken, sıkıştırma etkisi altında azalmaktadır. Seçilen zigzag TDKNT'lerin germe – sıkıştırma etkisine bağlı olarak birinci, ikinci ve üçüncü komşu mesafeleri değişmektedir. Germe – sıkıştırma etkisi altındaki TDKNT'lerin atomik koordinasyon sayısının gerinime bağlı değişimi incelendiğinde, 300K sıcaklıkta, atomların komşu atomlarla üç bağ yaptığı görüldü.

Son yıllarda karbon nanotüplerin boyları üzerine deneysel çalışmalar giderek atmaktadır. Uzun TDKNT'lerin farklı üretim yöntemleriyle çeşitli çap ve boylarda üretilmesi için çeşitli deneysel gruplar çalışmakta ve uniform (standart) TDKNT'lerin sentezlenmesi hedeflenmektedir. Tezin ikinci bölümünde, 300K sıcaklığında farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin elektronik özellikleri ($E_f, eDOS, E_g$) incelendi. Simülasyon çalışmalarında TDKNT'lerin boyunu katman sayısı (n_{layer}) belirlemektedir. Zigzag TDKNT'lerin boy çalışmalarında katman sayısı 5-8-20 ve 80 alınarak (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler simüle edildi. Çalışmalarda katman sayısı 5 olan yapılar nanokuşak olarak isimlendirildi. Simüle edilen zigzag TDKNT'lerin boyları sırasıyla 4.26, 7.1, 19.88 ve $83.78\text{\AA}$ değerindedir. (18,0) zigzag TDKNT'nin nanokuşak, 8, 20 ve 80 katmandaki atom sayıları sırasıyla 90, 144, 360 ve 1440 değerindeyken, bu sayı (19,0) zigzag TDKNT'de 95, 152, 380, 1520, (20,0) zigzag TDKNT'de 100, 160, 400, 1600, son olarak (22,0) zigzag TDKNT'de 110, 176, 440 ve 1760 değerindedir (Çizelge 6.1).

Çizelge 6. 1 Farklı boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ sıcaklıkta atom sayısı ve boy değerleri

$T = 300K$	$l(\text{\AA})$	(18,0)	(19,0)	(20,0)	(22,0)
		N	N	N	N
<i>Nanokuşak</i>	4,26	90	95	100	110
8 layer	7,10	144	152	160	176
20 layer	19,88	360	380	400	440
80 layer	83,78	1440	1520	1600	1760

Simülasyon çalışmalarında seçilen TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin, TDKNT'lerin boylarına göre değişimi incelendi. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin nanokuşak yapıları, 300K sıcaklıkta sırasıyla -7,87288, -7,89972, -7,75096 ve -7,89896 eV ortalama enerji değerlerinde salınım yaparken aynı tüplerin 80 katmandaki ortalama enerjileri sırasıyla -8,32229, -8,32611, -8,32916 ve -8,33470 eV değerinde salınım yapmaktadır. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin boyu arttıkça salınım yaptıkları ortalama enerji değerleri artmaktadır. 300K sıcaklık değerinde (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin katman sayısına göre Fermi enerji seviyeleri belirlendi. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin katman sayısına bağlı olarak *eDOS* grafikleri çizilerek, Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerinden her bir katman sayısında enerji bant aralığı değerleri hesaplandı. (18,0) zigzag TDKNT'nin Fermi enerjisi civarındaki elektronik durum yoğunluğu grafiklerinden nanokuşak, 8, 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralığı değerinin 0,01 eV değerinde olduğu ve katman sayısına bağlı olarak değişim göstermediği görüldü. (19,0) zigzag TDKNT'nin nanokuşak ve 8 katmandaki enerji bant aralığı değerleri sırasıyla 0,04 ve 0,13 eV olarak hesaplandı. (19,0) zigzag TDKNT'nin boyu 20 ve 80 katman olduğunda enerji bant aralığı değerleri sırasıyla 0,34 ve 0,36 eV olarak hesaplandı. (20,0) zigzag TDKNT'nin nanokuşak ve 8 katmandaki enerji bant aralığının sırasıyla 0,02 ve 0,15 eV değerinde olduğu, 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralığı değerlerinin de sırasıyla 0,34, 0,35 eV olduğu hesaplandı. (22,0) zigzag TDKNT'nin 300K sıcaklık değerinde histogram grafiklerinden nanokuşak ve 8 katman için enerji bant aralığının 0,02 ve 0,14 değerinde olduğu hesaplandı. (22,0) zigzag TDKNT'nin 20 ve 80 katmandaki enerji bant aralığı sırasıyla 0,27, 0,28 eV değerinde olduğu hesaplandı. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin

nanokuşak yapılar da metalik özellik gösterdiği görülmektedir. Çalışılan (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin boyunun 5 katmandan 8 ve 20 katmana çıkmasıyla birlikte enerji bant aralıklarının arttığı ve bu boylarda yarı iletken özellik gösterdiği görüldü. (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin boyu 80 katmana çıkarıldığında enerji bant aralığı değerlerinde maksimum 0,02 eV bir artış olduğu görüldü (Çizelge 6.2).

Çizelge 6. 2 Farklı Boylardaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin $T = 300K$ sıcaklıkta enerji bant aralıkları

$T = 300K$	(18,0)	(19,0)	(20,0)	(22,0)
	$E_g(eV)$	$E_g(eV)$	$E_g(eV)$	$E_g(eV)$
<i>Nanokuşak</i>	0,01	0,04	0,02	0,02
8 layer	0,01	0,13	0,15	0,14
20 layer	0,01	0,34	0,34	0,27
80 layer	0,01	0,36	0,35	0,28

TDKNT'ler kullanıldıkları elektronik devrelerde ani olarak yerel sıcaklık artışlarına uğramaktadır. Sıcaklık, TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkilediğinden nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından kritik bir parametredir. Bu yüzden TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklardaki davranışlarının incelenmesi önem kazanmaktadır. Nano-boyutlu malzemelerin üretimi, fiziksel ve kimyasal özelliklerinin laboratuvar da deneysel incelenmesi zor ve pahalı olduğundan bilgisayar simülasyonu ile tasarımları ve incelenmeleri önemlidir. Tezin üçüncü bölümünde, $(n - m) = 3q$, $(n - m) = 3q + 1$ ve $(n - m) = 3q + 2$ grubundan seçilen (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda fiziksel ve elektronik özellikleri gerçek uzayda incelendi. Düşük sıcaklık çalışmaları 0.1K'den 20K'lik sıcaklık artışıyla oda sıcaklığına kadar, 300K'den çalışılan TDKNT'nin yapısal kararlılığı bozulana kadar 300K'lik sıcaklık artışıyla da yüksek sıcaklık çalışmaları sistematik olarak çalışıldı. Sıcaklık artışına bağlı olarak sistemin kinetik enerjisi artmakta, bant yapısı enerjisi itici potansiyele göre etkin rol oynamaktadır. Bunun sonucu olarak çalışılan zigzag TDKNT'lerin düşük – yüksek sıcaklıklarda atom başına toplam enerjileri sıcaklığa bağlı olarak doğrusal bir artış sergilemektedir. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin Fermi enerji değerleri düşük – yüksek sıcaklık aralığında

hesaplandı. Düşük sıcaklıklarda Fermi enerjisi doğrusal olmayan bir davranış sergilerken, yüksek sıcaklıklarda doğrusal bir şekilde azalmaktadır. Fermi enerjisi civarında *eDOS* grafiklerine bakılarak (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığı değerleri hesaplandı. $(n - m) = 3q$ grubundaki (18,0) zigzag TDKNT metalik davranış sergilemektedir. (18,0) zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklığında enerji bant aralığı 0.02 eV iken bu değer 300K sıcaklığında 0.01 eV, 1200K sıcaklığında 0.024 eV değerindedir. Sıcaklığa bağlı olarak enerji bant aralığındaki değişime bakıldığında (18,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığının 0,024 – 0,008 eV aralığında değiştiği görüldü. $(n - m) = 3q + 1$ grubundaki (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler yarı iletken davranış sergilemektedir. 300K sıcaklık değerinde (19,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığı sırasıyla 0,34 ve 0,27 eV olarak hesaplanmıştır. Yarı iletkenlerin enerji bant aralığı sıcaklık artışına bağlı olarak azalma eğilimindedir. Enerji bant aralığının sıcaklıkla olan ilişkisi α ve β malzeme sabiti olmak üzere Varshni'nin ampirik ifadesiyle $E_g(T) = E_g(0) - (\alpha T^2)/(T + \beta)$ verilir. (19,0) zigzag TDKNT'nin 300-1500K, (22,0) zigzag TDKNT'nin 300-2100K yüksek sıcaklık bölgesinde enerji bant aralıkları sıcaklığa bağlı olarak doğrusal bir şekilde azalırken her iki zigzag TDKNT'nin düşük sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığının tekdüze olmayan bir davranış sergilediği gözlemlendi. Benzer şekilde, 300K sıcaklık değerinde, $(n - m) = 3q + 2$ grubundaki (20,0) zigzag TDKNT yarı iletken davranış sergilemektedir. Bu sıcaklık değerinde (20,0) zigzag TDKNT'nin enerji bant aralığı 0.34eV olarak hesaplanmıştır. 300 – 2100K yüksek sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığı sıcaklığa bağlı olarak doğrusal olarak azalmaktadır. 0.1 – 300K düşük sıcaklık bölgesinde enerji bant aralığının tekdüze (monotonic) olmayan ayrı bir davranışı sergilediği gözlemlenmiştir. Literatüre bakacak olursak, Rodrigo B. Capaz [20] vd. tarafından ortogonal olmayan sıkı-bağ metodu kullanılarak, yarı iletken (10,0), (11,0), (13,0), (14,0), (16,0) ve (17,0) zigzag TDKNT'lerin sadece düşük sıcaklıklarda $E_g(T)$ 'nin çap ve kiraliteye olan bağımlılıkları incelenmiş olup yüksek sıcaklık çalışmaları yapılmamıştır. Düşük sıcaklıklarda (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralıklarında meydana gelen trend Rodrigo B. Capaz çalışmasında da görülmektedir.

Düşük – yüksek sıcaklıklarda (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin fiziksel özellikleri incelendi. 300K sıcaklıkta denge durumunda çalışılan zigzag TDKNT'lerin bağ – açısı dağılım fonksiyonu $119,4^\circ$ açıda keskin bir tepe noktası verirken, bağ – uzunluğu dağılım fonksiyonu $1.421\text{\AA}$ 'da tepe noktası vermektedir. Sıcaklık artışına bağlı olarak tepe noktalarında sapmalar ve dağılım fonksiyonlarında genişlemeler gözlemlendi. Bu genişlemeler sıcaklık artışına bağlı olarak kinetik enerjinin artmasıyla açıklanabilir. Benzer davranış radyal dağılım fonksiyonunda da görülmektedir. Düşük sıcaklıklarda (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin atomlarının komşu atomlarla üç bağ yaptığı, yüksek sıcaklıklarda ise atom kopmalarından dolayı ikili bağların olduğu görüldü.

Nanotüplere dayalı kompozitlerin performansları açısından sıcaklık ve gerinim TDKNT'lerin yapısal kararlılığını, mekanik, fiziksel ve elektronik özelliklerini etkileyen kritik parametrelerdir. TDKNT'ler teknolojiye kullanım alanlarına bağlı olarak sıcaklık ve gerinim etkilerine maruz kalmaktadırlar. Bu nedenle sıcaklık ve gerinime bağlı olarak TDKNT'lerin dayanıklılık çalışmaları teknolojik açıdan önem kazanmaktadır. Sırasıyla 360, 380, 400 ve 420 atomlu 20 katmanlı (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin;

- i. Yüksek sıcaklıklarda,
- ii. Germe – sıkıştırma etkisi altında,
- iii. Yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi altında

dayanıklılık çalışmaları incelendi.

Yüksek sıcaklık çalışmalarında sıcaklık aralığı 300K'den başlayarak 3000K'e kadar 300K aralıklarla incelendi. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda toplam enerjinin zamana göre değişimi incelendi. Her sıcaklık değerinde enerji grafiklerinde denge durumundaki enerji değerinden ani sapmalar, farklı enerji değerlerinde düzensiz salınımlar belirlenerek yapısal kararlılığın bozulduğu durumlar tespit edildi. TDKNT'lerin her bir sıcaklık değerinde simülasyon görüntüleri alınarak sistemden kopan atom ve/veya atomların tespiti yapıldı. (18,0) zigzag TDKNT 1800, 2100 ve 2400K sıcaklık değerlerinde sırasıyla -7,88889, -7,80678 ve -7,72340 eV ortalama enerji değerinde salınım yapmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda toplam enerjinin simülasyon zamanına göre değişimine bakıldığında 2700K sıcaklık değerinde 750 –

1000 MD adımları arasında denge durumundan ani sapmaların olduğu tespit edildi. 2700K sıcaklık değerindeki simülasyon görüntüsünden bu sıcaklıkta (18,0) zigzag TDKNT'nin yapısal kararlılığının bozulduğu, sistemden atomların kopmaya başladığı görüldü. (19,0) zigzag TDKNT 900K sıcaklık değerinde -8,13456 eV ortalama enerji değerinde salınım yapmaktadır. 1200K sıcaklık değerinde 1000 – 2000 MD adım aralığında sistemin deformasyona uğradığı tespit edildi. (20,0) zigzag TDKNT'de yüksek sıcaklıklarda yapıdan ilk atom kopması 2700K sıcaklık değerinde ilk 500 MD adımda olduğu tespit edilmiştir. 3000K sıcaklık değerinde yapının tamamen deforme olduğu tespit edildi. (22,0) zigzag TDKNT 1800, 2100, ve 2400K sıcaklıklarında sırasıyla -7,90124, -7,81911 ve -7,73591 eV ortalama enerji değerinde salınım yapmaktadır. 3300K sıcaklıkta (22,0) zigzag TDKNT için 2.5 – 3fs zaman aralığında sistemden atom kopmaları meydana geldiği tespit edildi. Metalik özellik gösteren (18,0) zigzag TDKNT 2700K sıcaklık değerine kadar yapısal kararlılığını korumaktadır. Yarı iletken özellik gösteren (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler sırasıyla 1200, 2700 ve 3300K'e kadar sıcaklığına kadar yapısal kararlılıklarını korudukları tespit edildi. (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ilk atom kopmaları $T_1(K)$, yapısal kararlılığın tamamen bozulduğu sıcaklık değeri $T_2(K)$ olarak belirtilmiştir (Çizelge 6.3). Literatürde yapılan çalışmalara bakıldığında, Liew vd. [9] tarafından yapılan çalışmada büyük çaplara sahip yarı iletken zigzag TDKNT'lerin daha küçük çaplara sahip yarı iletken zigzag TDKNT'lere oranla daha iyi ısısal yüklere dayanabilir olduğu gösterilmiştir.

Çizelge 6. 3 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin ilk atom kopmalarının başladığı ($T_1(K)$) ve yapısal kararlılıklarının bozulduğu ($T_2(K)$) sıcaklık değerleri, parantez içindeki değerler MD adıma karşılık gelmektedir.

(n, m)	$T_1(K)$	$T_2(K)$
(18,0)	2700 (0.75 – 1fs)	3000 (0.5 – 1fs)
(19,0)	1200 (1 – 2fs)	1800 (1 – 1.5fs)
(20,0)	2700 (0.25 – 0.5fs)	2700 (0.25 – 0.5fs)
(22,0)	3300 (2.5 – 3fs)	3600 (0.5 – 1fs)

TDKNT'ler üzerine uygulanan germe – sıkıştırma deformasyonları ile elektronik özelliklerinin değişebilir olması ve bu elektronik özellikleri nedeniyle geleceğin elektronik aygıt tasarımlarında kullanılacak olması nedeniyle, bu yapıların dayanıklılık çalışmalarını önemli kılmaktadır. Germe – sıkıştırma çalışmaları 300, 900, 1200 ve 1500K sıcaklık değerlerinde (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lere germe için %1'den %23'e, sıkıştırma için de %1'den %9'a kadar gerinimler uygulanarak çalışıldı. Simülasyon çalışmalarında, dengeleme işlemi 3000 MD adımda ve $\Delta t = 1fs$ değerinde yapıldı. Uygulanan gerinim değerleri ise belirlenen sıcaklıkta denge durumundaki TDKNT'lerin üzerine 2000 MD adım olacak şekilde uygulandı. Çalışmada zigzag TDKNT'lerin boyunu belirleyen katman sayısı (n_{layer}) 20 olarak seçildi. Çalışılan zigzag TDKNT'lerin her bir sıcaklıkta gerinime bağlı olarak toplam enerjilerinin zamana göre değişimi ve simülasyon görüntüleri incelendi. Sistemden atom ve/veya atom gruplarının kopmaları incelenerek çalışılan zigzag TDKNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak germe – sıkıştırma etkisi altında gösterdikleri dayanıklılıklar incelendi. 300K sıcaklıkta germe – sıkıştırma etkisi (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sırasıyla $\varepsilon = \%21$, $\varepsilon = \%21$, $\varepsilon = \%18$ ve $\varepsilon = \%21$ gerinim değerlerine kadar yapısal kararlılıklarını korudukları tespit edildi. Bu gerinim değerlerinde tüp eksenine boyunca daralmaların olduğu fakat yapının bozulmadığı görüldü. Gerinime bağlı olarak, (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sırasıyla $\varepsilon = \%23$, $\varepsilon = \%23$, $\varepsilon = \%21$ ve $\varepsilon = \%23$ gerinim değerlerinde sistemden atom gruplarının kopmaya başlarak yapının deforme olduğu görüldü. Yüksek sıcaklıklarda germe – sıkıştırma etkisi altındaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin dayanıklılıkları incelendiğinde, 900K sıcaklık değerinde (18,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%21$, (19,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%15$, (20,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%18$ ve (22,0) zigzag TDKNT'nin $\varepsilon = \%15$ gerinim değerlerinde yapısal kararlılıklarının bozulduğu tespit edildi. 1200K sıcaklık değerinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin dayanıklılıkları incelendiğinde, çalışılan zigzag TDKNT'lerin sırasıyla $\varepsilon = \%18$, $\varepsilon = \%18$, $\varepsilon = \%18$ ve $\varepsilon = \%15$ gerinim değerlerinde yapısal kararlılıklarının bozulduğu tespit edildi. Benzer şekilde, 1500K sıcaklık değerinde germe – sıkıştırma etkisi altındaki (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'ler sırasıyla $\varepsilon = \%12$, $\varepsilon = \%15$, $\varepsilon = \%15$ ve $\varepsilon = \%15$ gerinim değerlerinde yapısal kararlılıkları bozuldu tespit edildi. (18,0),

(19,0), (20,0) ve (22,0) zigzag TDKNT'lerin sıcaklık arttıkça daha düşük gerinim değerlerine kadar dayanıklı olduğu tespit edildi (Çizelge 6.4).

Çizelge 6. 4 (18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'lerin yüksek sıcaklıklarda gerinime bağlı dayanıklılık (%) değerleri ilk atom kopmalarını göstermektedir.

$T(K)$	(n, m)			
	(18, 0)	(19, 0)	(20, 0)	(22, 0)
<i>Gerinim (%)</i>				
300	%23	%23	%21	%23
900	%21	%15	%18	%15
1200	%18	%18	%18	%15
1500	%12	%15	%15	%15

KAYNAKLAR

- [1] Iijima, S., (1991). "Helical Microtubules of Graphitic Carbon", Nature 354: 56-58.
- [2] 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.
- [3] Sreekala, S., Peng, X.-H., Ajayan, P.M., ve Nayak, S.K., (2008). "Effect of Strain on the Band Gap and Effective Mass of Zigzag Single-Wall Carbon Nanotubes: First-Principles Density-Functional Calculations", Physical Review B, 77: 155434 (1-7).
- [4] Zhang, J.-M., Liang, R.-L. ve Xu, K.-W., (2010). "Effect of Uniaxial Strain on the Band Gap of Zigzag Carbon Nanotubes", Physica B, 405: 1329-1334.
- [5] Zhang, Y. ve Han, M., (2011). "Band Gap of Carbon Nanotubes Under Combined Uniaxial–Torsional Strain", Physica E, 43: 1774-1778.
- [6] Ito, T., Nishidate, K., Baba, M. ve Hasegawa, M., (2002). "First Principles Calculations for Electronic Band Structure of Single-Walled Carbon Nanotube Under Uniaxial Strain", Surface Science, 514: 222–226.
- [7] Valavala, P.K., Banyai, D., Seel, M. ve Pati, R., (2008). "Self-Consistent Calculations of Strain-Induced Band Gap Changes In Semiconducting (n,0) Carbon Nanotubes", Physical Review B, 78: 235430 (1-6).
- [8] 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 (1-5).
- [9] Liew, K.M., Wong C.H., He X.Q., ve Tan M.J., (2005). "Thermal Stability of Single and Multi-Walled Carbon Nanotubes", Physical Review B, 71: 075424 (1-6).

- [10] Metenier K., Bonnamy S., Beguin F., Journet C., Bernier P., Lamy de La Chapelle M., Chauvet O., ve Lefrant S., (2002). "Coalescence of Single-Walled Carbon Nanotubes and Formation of Multi-Walled Carbon Nanotubes Under High-Temperature Treatments", Carbon 40: 1765–1773.
- [11] Yudasaka M., Ichihashi T., Kasuya D., Kataura H., Iijima S., (2003). "Structure Changes of Single-Wall Carbon Nanotubes and Single-Wall Carbon Nanohorns Caused by Heat Treatment", Carbon 41: 1273-1280.
- [12] Yudasaka M., Kataura H., Ichihashi T., Qin L.-C., Kar, S. ve Iijima S., (2001). "Diameter Enlargement of HIPco Single-Wall Carbon Nanotubes by Heat Treatment", Nano Letters 1 (9): 487-489.
- [13] Lopez M.J., Rubio A., Alonso J.A, Lefrant S., Metenier K. ve Bonnamy S., (2002). "Patching and Tearing Single-Wall Carbon-Nanotube Ropes into Multiwall Carbon Nanotubes", Physical Review Letters 89 (25): 255501 (1-4).
- [14] Lopez M.J., Cabria I., March N.H., ve Alonso J.A., (2005). "Structural and Thermal Stability of Narrow and Short Carbon Nanotubes and Nanostrips", Carbon 43: 1371-1377.
- [15] Zhang Y.Y., Tan V.B.C., ve Wang C.M., (2007). "Effect of Strain Rate on the Buckling Behavior of Single- and Double-Walled Carbon Nanotubes", Carbon 45: 514-523.
- [16] Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B. ve Sinnott S.B., (2002). "A Second-Generation Reactive Empirical Bond Order (REBO) Potential Energy Expression for Hydrocarbons.", J Phys: Condens Matter 14: 783–802.
- [17] Franklin A.D. ve Chen Z., (2010). "Length Scaling of Carbon Nanotube Transistors", Nature Nanotechnology (5): 858-862.
- [18] Ranjbartoreh A.R. ve Wang G., (2010). "Molecular Dynamic Investigation of Length Dependency of Single-Walled Carbon Nanotube", Physica E, 43: 202-206.
- [19] Wang X., Li Q., Xie J., Jin Z., Wang J., Li Y., Jiang K. ve Fan S., (2009). "Fabrication of Ultralong and Electrically Uniform Single-Walled Carbon Nanotubes on Clean Substrates", Nano Letters 9 (9): 3137-3141.
- [20] Capaz, R.B., Spataru, C.D., Tangney, P., Cohen, M.L., ve Louie, S.G., (2005). "Temperature Dependence of the Band Gap of Semiconducting Carbon Nanotubes", Physical Review Letters, 94: 036801 (1-4).
- [21] Yıldız Teknik Üniversitesi, Karbon Nanotüp Bilgisayar Simülasyon Laboratuvarı, http://www.yildiz.edu.tr/~gdereli/lab_homepage/index.htm, 18 Eylül 2012.
- [22] 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.
- [23] Dereli G. ve Özdoğan C., (2003). "O(N) Algorithms in Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations of the Electronic Structure of Carbon Nanotubes", Physical Review B, 67: 0354415 (1-7).

- [24] Dereli G. ve Özdoğan, C., (2003). "The Structural Stability and Energetics of Single – Walled Carbon Nanotubes under Uniaxial Strain", *Physical Review B*, 67: 0354416 (1-6).
- [25] 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 (1-6).
- [26] 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.
- [27] Dereli, G., Süngü, B., Eyecioğlu, Ö., ve Vardar, N., (2007). "Temperature Effect on the Physical and Electronic Properties of Single Walled Carbon Nanotubes", *Sixth International Conference of the Balkan Physical Union, American Institute of Physics Conference Proceedings*, 899: 381-382.
- [28] 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.
- [29] 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.
- [30] Dereli, G., Vardar, N. ve Eyecioğlu, Ö., (2010). "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (13,0) and (15,0) Carbon Nanotubes", *Nanotech 2010 1 (2) : Carbon Nano Structures & Devices*, 292-295.
- [31] Dereli, G., Mısırlıoğlu, B.S., Eyecioğlu, Ö., and Vardar, N., "A New Lower Limit for the Bond Breaking Strains of Defect-Free Carbon Nanotubes: Tight Binding MD Simulation Study", *Computational Materials Science*, Article in Press (2012).
- [32] Harris, P.J.F., (1999). *Carbon Nanotubes And Related Structures*, Cambridge University Press.
- [33] Philip Wong H.-S., ve Akinwande D., (2011). *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*, Cambridge University Press.
- [34] Saito, R., Dresselhaus, M.S. ve Dresselhaus, G., (1998). *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London.
- [35] Geim, A.K. ve Novoselov, K.S., (2007). "The Rise of Graphene", *Nature Materials*, 6: 183-191.
- [36] Rauf, H., (2007). *Metallic Ground State of Functionalized Carbon Nanotubes*, Doktora Tezi, Fakultat Mathematik und Naturwissenschaften Technische Universität Dresden, Dresden.
- [37] Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S. ve Geim, A.K., (2009), "The Electronic Properties of Graphene", *Rev. Mod. Phys* 81, 109-162.
- [38] Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G. ve Avouris, Ph., (2000). *Carbon Nanotubes*, Springer.

- [39] Jishi, A.R., Inomata, D., Nakao, K., Dresselhaus, M.S. ve Dresselhaus, G., (1994). "Electronic and Lattice Properties of Carbon Nanotubes" J. Phys. Soc. Jpn. 63: 2252-2260.
- [40] Dresselhaus, M.S., Jishi, A.R., Dresselhaus, G., Inomata, D., Nakao, K. ve Saito, R., (1994). "Group Theoretical Concepts for Carbon Nanotubes" Molecular Materials 4: 27-40.
- [41] Allen, M.P., Tildesley, D.J., (1991). Computer Simulations of Liquids, Clarendon Press, Oxford.
- [42] Rapaport, D. C., (1995). The Art of Molecular Dynamics Simulation, Second Edition, Cambridge University Press, New York.
- [43] Verlet, L., (1967). Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, Physics Review, 159: 98–103.
- [44] Heermann, D.W., (1990). Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Second Edition, Springer – Verlag, Berlin.
- [45] Süngü, B., (2006). Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Yöntemiyle Karbon Nanotüplerin Bilgisayar Simülasyonu, Doktora Tezi, YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.
- [46] Colombo, L. (1996). "Tight-Binding Molecular Dynamics", Annual Reviews of Computational Physics, IV: 147-183.
- [47] Colombo, L., (1998). "A Source Code for Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations", Computational Materials Science, 12: 278-287.
- [48] Colombo, L., ve Rosati, M., (2000). "Parallel Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations on Symmetric Multi-Processing Platforms", Computer Physics Communications, 128: 108-117.
- [49] Slater, J.C., ve Koster G.F., (1954). "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem", Physical Review, 94(6): 1498-1524.
- [50] Kwon, I., Bismas, R., Wang, C.Z., Ho, K.M., ve Soukoulis, C.M., (1994). "Transferable Tight-Binding Models for Silicon", Physical Review B, 49(11): 7242-7250.
- [51] 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.
- [52] Yang W., (1991). "Direct Calculation of Electron Density in Density-Functional Theory", Physical Review Letters, 66: 11, 1438-1441.
- [53] Dereli, G., (2004). Yeni Teknolojiler ve Nanobilimde Karbon Nanotüpler, Ders Notları, Yıldız Teknik Üniversitesi, İstanbul.
- [54] Vardar, N., (2006). Farklı Simetrik Yapılardaki Karbon Nanotüplerin Durum Yoğunluklarının Simülasyonu, Yüksek Lisans Tezi, YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul.

- [55] Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., Avouris, P., (2001). Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications, Springer, Berlin.
- [56] Huang, J.Y., Chen, S., Wang, Z.Q., Kempa, K., Wang, Y.M., Jo, S.H., Chen, G., Dresselhaus, M.S., Ren, Z.F., (2006). "Superplastic Carbon Nanotubes", Nature, 439: 281.
- [57] Li, C.Y., Choul, T.-W., (2004). "Strain and Pressure Sensing Using Single-Walled Carbon Nanotubes", Nanotechnology, 15: 1493–1496.
- [58] Minot, E.D., Yaish, Y., Sazonova, V., Park, J.Y., Brink, M. ve McEuen, P.L., (2003). "Tuning Carbon Nanotube Band Gaps With Strain", Physical Review Letter, 90 (15): 156401 (1-4).
- [59] Su, C.C., Liu, T., Chang, N.K., Wang, B.R., Chang, S.H., (2012). "Two Dimensional Carbon Nanotube Based Strain Sensor", Sensors and Actuators A, 176: 124-129.
- [60] Karimov, K.S., Khalid, F.A., Chani, M.T.S., (2012). "Carbon Nanotubes Based Strain Sensors", Measurement, 45 (5): 918–921.
- [61] Chang, N.K., Su, C.C., ve Chang, S.H., (2008). "Fabrication of Single-Walled Carbon Nanotube Flexible Strain Sensors with High Sensitivity", Applied Physics Letters, 92: 063501 (1-3).
- [62] Shan, G. ve Bao, S., (2006). "The Effect of Deformations on Electronic Structures and Optical Properties of Carbon Nanotubes", Physica E, 35: 161-167.
- [63] Agrawal, P.M., Sudalayandi B.S., Raff, L.M. ve Komanduri R., (2008). "Molecular Dynamics (MD) Simulations of The Dependence of C-C Bond Lengths and Bond Angles on the Tensile Strain In The Single-Wall Carbon Nanotubes (SWCNT)", Computational Materials Science 41: 450-456.
- [64] Mylvaganam K. ve Zhang L.C., (2004). "Important Issues In A Molecular Dynamics Simulation for Characterising the Mechanical Properties of Carbon Nanotubes", Carbon 42: 2025-2032.
- [65] Bernholc, J., Brenner, D, M., Nardelli, M.B., Meunier, V., ve Roland, C., (2002). "Mechanical and Electrical Properties of Nanotubes", Annu. Rev. Mater. Res, 32: 347-375.
- [66] Ruoff, R.S., Qian, D., ve Liu, W.K., (2003). "Mechanical Properties of Carbon Nanotubes: Theoretical Predictions and Experimental Measurements" C.R. Physique 4: 993-1008.
- [67] Min-Feng Yu, (2004). "Fundamental Mechanical Properties of Carbon Nanotubes: Current Understanding and the Related Experimental Studies", J. Eng. Mater. Technol. 126: 271-278.
- [68] Su, C.C., Liu, T., Chang, N.K., Wang, B.R. ve Chang, S.H., (2012). "Two Dimensional Carbon Nanotube Based Strain Sensor", Sensors and Actuators, A176: 124-129.

- [69] Ferreira, A., Rocha, J.G., Ansón-Casaos, A., Martínez, M.T., Vaz, F., Lanceros-Mendez, S., (2012). "Electromechanical Performance of Poly (Vinylidene Fluoride)/Carbon Nanotube Composites for Strain Sensor Applications", *Sensors and Actuators, A* 178: 10-16.
- [70] Orinakova, R. ve Orinak, A., (2011). "Recent Applications of Carbon Nanotubes in Hydrogen Production and Storage", *Fuel*, 90: 3123-3140.
- [71] Hong, B.H., Lee, J.Y., Beetz, T., Zhu, Y.M., Kim, P. Ve Kim, K.S., (2005). "Quasi-Continuous Growth of Ultralong Carbon Nanotube Arrays", *J. Am. Chem. Soc.* 127: 15336-15337.
- [72] Durkop, T., Getty, S.A., Cobas, E. ve Fuhrer, M.S., (2004). "Extraordinary Mobility in Semiconducting Carbon Nanotubes", *Nano Lett.*, 4: 35-39.
- [73] Li, S., Yu, Z., Rutherglen, C., Burke, P.J., (2004). "Electrical Properties of 0.4 cm Long Single-Walled Carbon Nanotubes", *Nano Lett.*, 4: 2003-2007.
- [74] Zheng, L.X., O'Connell, M.J., Doorn, S.K., Liao, X.Z., Zhao, Y.H., Akhadow, E.A., Hoffbauer, M.A., Roop, B.J., Jia, Q.X., Dye, R.C., Peterson, D.E., Huang, S.M., Liu, J. Ve Zhu, Y.T., (2004). "Ultralong Single-Wall Carbon Nanotubes", *Nature Materials* 3: 673-676.
- [75] IOP Publishing, Extra-long carbon nanotubes set new record, <http://nanotechweb.org/cws/article/tech/20293>, 20 Eylül 2012.
- [76] Hanson, T., Laboratory grows world record length carbon nanotube, <http://www.lanl.gov/orgs/pa/newsbulletin/2004/09/14/text02.shtml>, 28 Eylül 2012.
- [77] Zhu, H.W., Xu, C.L., Wu, D.H., Wei, B.Q., Vajtai R. Ve Ajayan, P.M., (2002). "Direct Synthesis of Long Single-Walled Carbon Nanotube Strands", *Science* 296: 884-886.
- [78] Yu, M.F., Lourie, O., Dyer, M.J., Moloni, K., Kelly, T.F., Ruoff, R.S., (2000). "Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load", *Science*, 287: 637-640.
- [79] Falvo, M.R., Clary, G.J., Taylor, R.M., Chi, V., Brooks, F.P., Washburn, S., ve Superfine, R., (1997). "Bending and Buckling of Carbon Nanotubes Under Large Strain" *Nature*, 389: 582-584.
- [80] Kim, P. ve Lieber, C.M., (1999). "Nanotube Nanotweezers", *Science*, 286: 2148-2150.
- [81] Cumings, J., ve Zettl, A., (2004). "Localization and Nonlinear Resistance In Telescopically Extended Nanotubes", *Phys. Rev. Lett.*, 93: 086801 (1-4).
- [82] Collins, P.G., Arnold, M.S., ve Avouris, P., (2001). "Engineering Carbon Nanotubes and Nanotube Circuits Using Electrical Breakdown", *Science*, 292: 706-709.
- [83] Baughman, R.H., Zakhidov, A.A., ve de Heer, W.A., (2002). "Carbon Nanotubes-The Route Toward Applications", *Science* 297: 787-792.

- [84] Tans, S.J., Verschueren, A.R.M. ve Dekker, C., (1998). "Room-Temperature Transistor on a Single Carbon Nanotube", *Nature*, 393: 49-52.
- [85] Fuhrer, M.S., Kim, B.M., Dürkop, T. Ve Brintlinger, T., (2002). "High-Mobility Nanotube Transistor Memory", *Nano Lett.*, 2: 755-759.
- [86] Radosavljevic, M., Freitag, M., Thadani, K.V. ve Johnson, T., (2002). "Nonvolatile Molecular Memory Elements Based on Ambipolar Nanotube Field Effect Transistors", *Nano Lett.*, 2: 761-764.
- [87] Kong, J., Franklin, N.R., Zhou, C., Chapline, M.G., Peng, S., Cho, K. ve Dai, H., (2000). "Nanotube Molecular Wires as Chemical Sensors", *Science*, 287: 622-625.
- [88] Star, A., Gabriel, J.C.B., Bradley, K. ve Grüner, G., (2003). "Electronic Detection of Specific Protein Binding Using Carbon Nanotube FET Devices", *Nano Lett.*, 3: 459-463.
- [89] Besteman, K., Lee, J.O., Wiertz, F.G.M., Heering, H.A., ve Dekker, C., (2003). "Enzyme-Coated Carbon Nanotubes As Single-Molecule Biosensors", *Nano Lett.*, 3: 727-730.
- [90] Chen, R.J., Bangsaruntip, S., Drouvalakis, K.A., Kam, N.W.S., Shim, M., Li, Y., Kim, W., Utz, P.J. ve Dai, H., (2003). "Noncovalent Functionalization of Carbon Nanotubes for Highly Specific Electronic Biosensors", *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 100: 4984-4989.
- [91] Yang, R., Jiang, Q., Cao, P., Ren, L., Hu, Y., Ma, Q. ve Zhao, Y., (2012). "Effects of the Carbon Nanotube Length on its Chemically Modified Electrode Electrochemical Performances", *Procedia Engineering*, 27: 1405-1410.
- [92] Lu, X. ve Hu, Z., (2012), "Mechanical Property Evaluation of Single-Walled Carbon Nanotubes by Finite Element Modeling", *Composites: Part B*, 43: 1902–1913.
- [93] Su, Y., Zhang, Y., Wei, H., Qian, B., Yang, Z. Ve Zhang, Y., (2012). "Length-Controlled Synthesis of Single-Walled Carbon Nanotubes by Arc-Discharge with Variable Cathode Diameters", *Physica, E* 44: 1548–1551.
- [94] Park, S.M., Lim, Y.W., Kim, C.H., Kim, D.J., Moon, W.J., Kim, J.H., Lee, J.S., Hong, C.K. ve Seo, G., (2012). "Effect of Carbon Nanotubes with Different Lengths on Mechanical and Electrical Properties of Silica-Filled Styrene Butadiene Rubber Compounds", *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, doi:10.1016/j.jiec.2012.10.012.
- [95] Wang, X., Jiang, Q., Xu, W., Cai, W., Inoue, Y. ve Zhu, Y., (2012). "Effect of Carbon Nanotube Length on Thermal, Electrical and Mechanical Properties of CNT/Bismaleimide Composites", *Carbon*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2012.10.041>.
- [96] Raravikar, N.R., Koblinski, P., Rao, A.M., Dresselhaus, M.S., Schadler, L.S. ve Ajayan, P.M., (2002). "Temperature Dependence of Radial Breathing Mode Raman Frequency of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Physical Review B*, 66: 235424 (1-9).

- [97] Pauling, L., (1960). *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Third Edition, Cornell University Press – Ithaca, New York.
- [98] Zeghbroeck, V.B., (2011). *Principles of Semiconductor Devices*, University of Colorado, Boulder.
- [99] de Heer, W.A., Chatelain, A. ve Ugarte, D., (1995). “A Carbon Nanotube Field-Emission Electron Source”, *Science* 270: 1179.
- [100] Collins., P.G. ve Zettl, A., (1996). “A Simple and Robust Electron Beam Source from Carbon Nanotubes” *Appl. Phys. Lett.* 69, 1969.
- [101] Nalwa H.S., (2000). *Nanostructured Materials and Nanotechnology*, Concise Edition, Academic Press, USA.
- [102] Guo, G.Y., Liu, L., Chu, K.C., Jayanthi, C.S. ve Wu, S.Y., (2005). “Electromechanical Responses of Single-Walled Carbon Nanotubes: Interplay Between the Strain-Induced Energy-Gap Opening and the Pinning of The Fermi Level”, *Journal of Applied Physics* 98: 044311.
- [103] Coluci, V.R., Braga, S.F., Legoas, S.B., Galvao, D.S. ve Baughman, R.H., (2004). “New Families of Carbon Nanotubes Based on Graphyne Motifs”, *Nanotechnology*, 15: S142–S149.
- [104] Fang, H., Wang, R.Z., Yan, M., Chen, S.Y, ve Wang, B., (2011). “Strain-Induced Metal to Semiconductor Transition in Ultra-Small Diameter Single-Wall Carbon Nanotubes”, *Physics Letters A*, 375: 1200–1204.

 Δt PARAMETRESİNİN BELİRLENMESİ

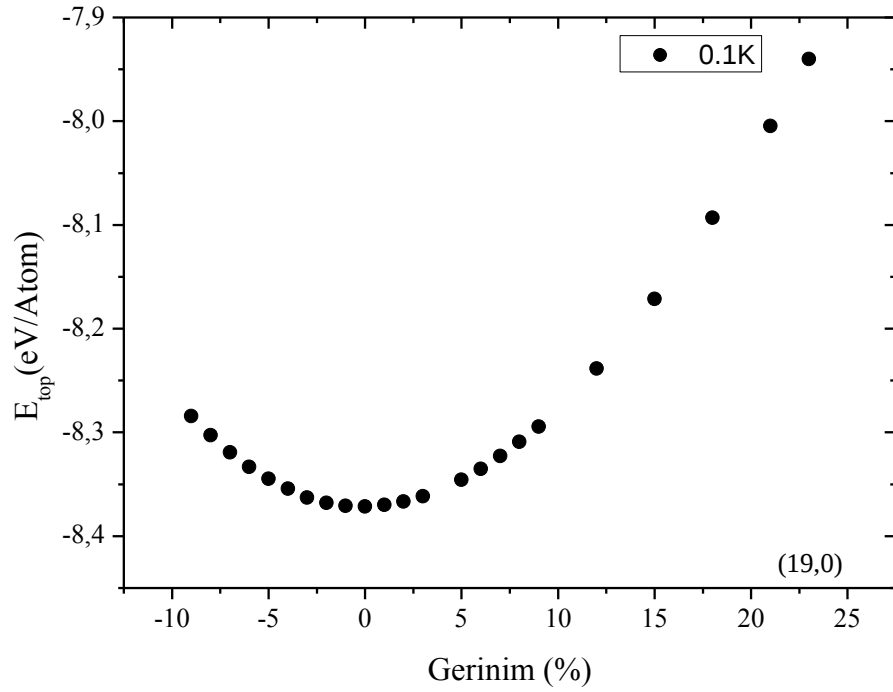
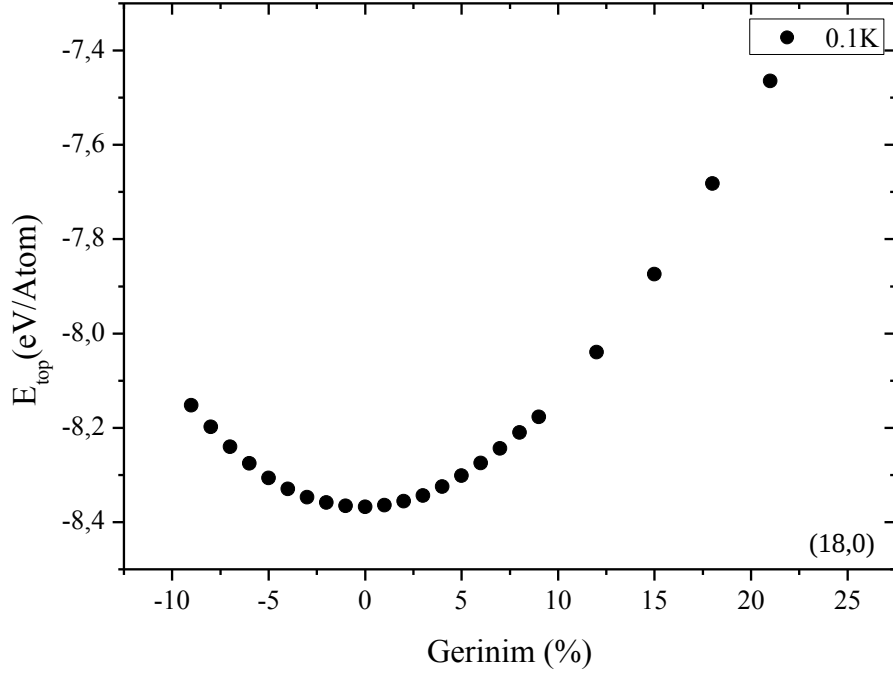
$$x = (\Delta t)^2 \cdot a = (\Delta t)^2 \cdot \frac{F}{m} = (\Delta t)^2 \cdot \frac{E}{(x \cdot m)}$$

$$\Delta t = \left(x^2 \cdot \frac{m}{E} \right)^{1/2} = \left((10^{10} A)^2 \cdot \frac{\frac{1 \text{ akb}}{1.66 \times 10^{-27}}}{\frac{eV}{1.602} \times 10^{-19}} \right)^{1/2} \equiv \text{saniye}$$

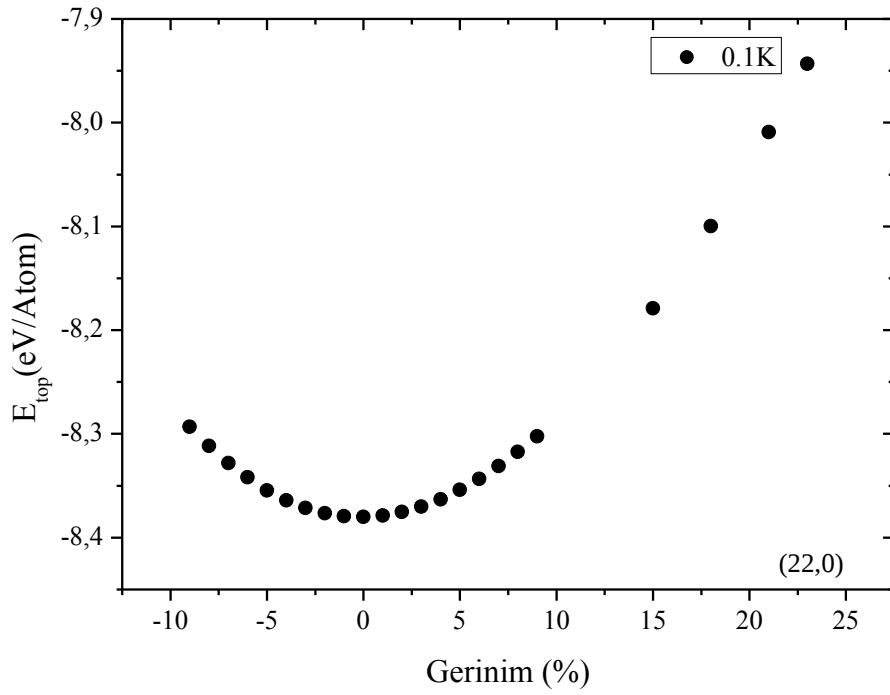
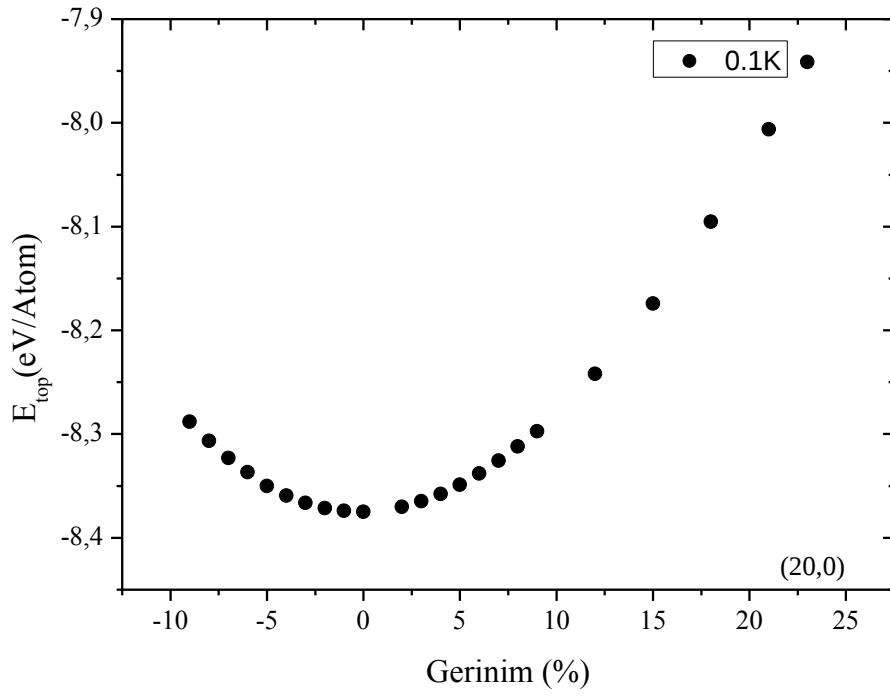
$$\text{saniye} \equiv 9.822 \times 10^{13} \cdot \text{birim}$$

$$\text{birim} \equiv 1.01 \times 10^{-14} \text{ saniye}$$

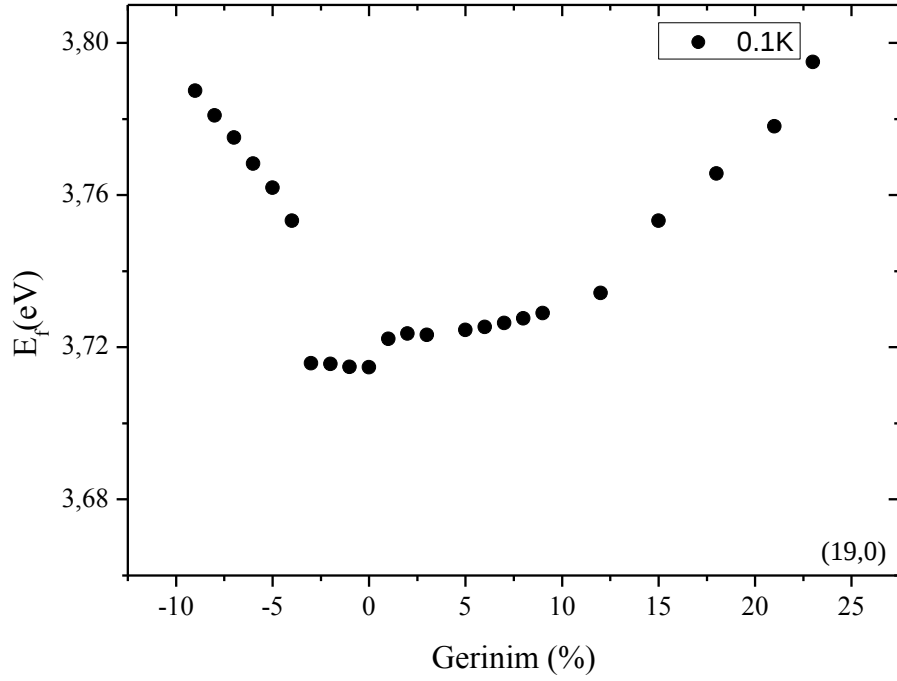
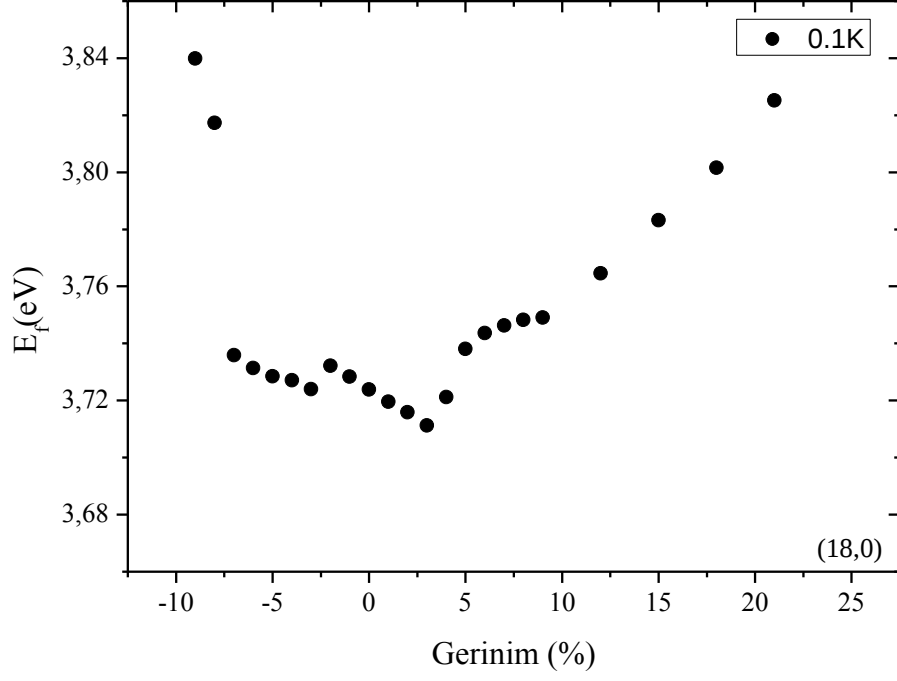
**(18,0), (19,0), (20,0) ve (22,0) ZİGZAG TEK DUVARLI KARBON
NANOTÜPLERİN 0.1K GRAFİKLERİ**



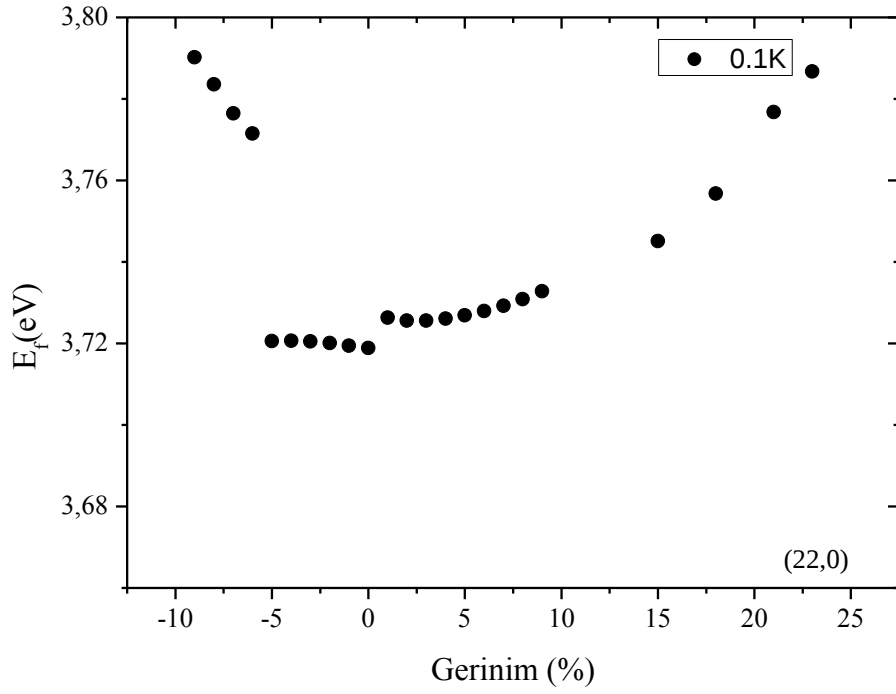
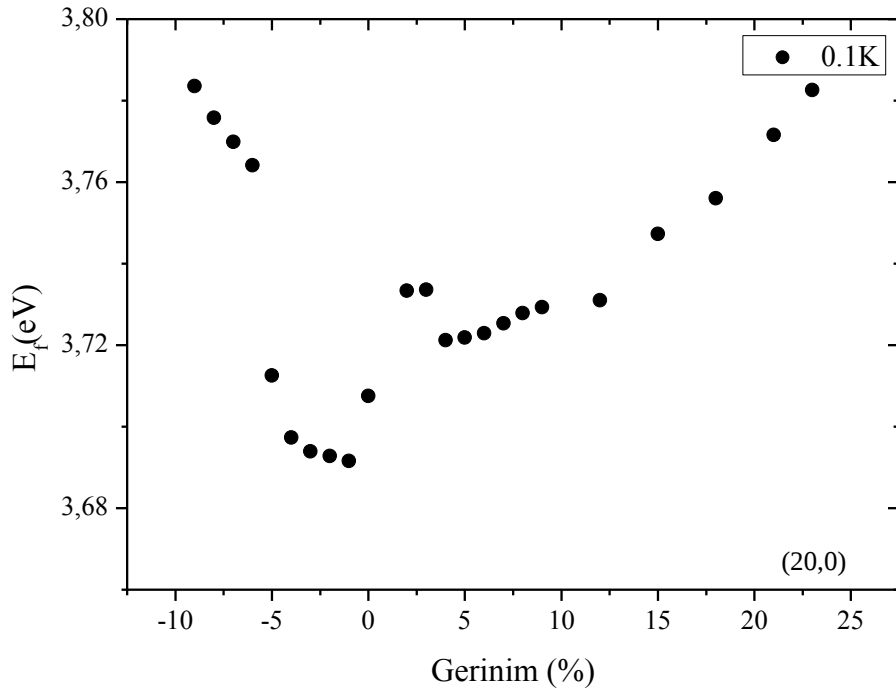
Şekil 5. 137 (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi



Şekil 5. 138 (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta atom başına toplam enerjisinin gerinime bağlı değişimi

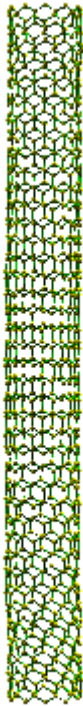


Şekil 5. 139 (18,0) ve (19,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

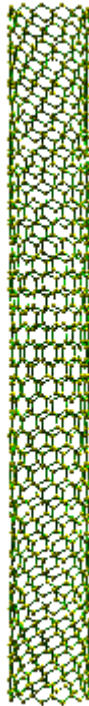


Şekil 5. 140 (20,0) ve (22,0) Zigzag TDKNT'nin 0.1K sıcaklıkta Fermi enerjisinin gerinime bağlı değişimi

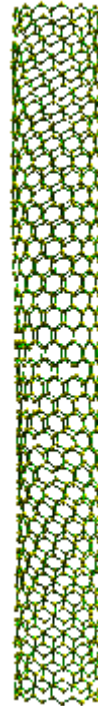
**TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN 80 KATMAN SİMÜLASYON
GÖRÜNTÜLERİ**



(a)



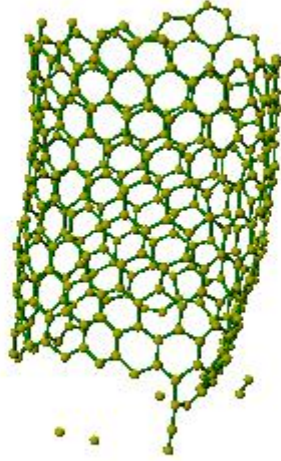
(b)



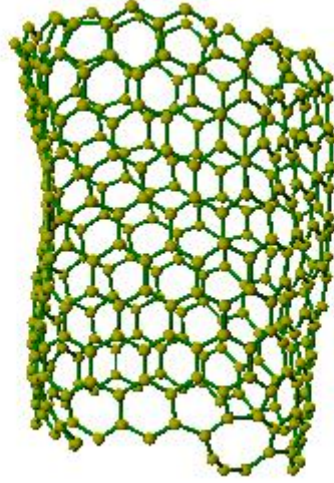
(c)

Şekil 5. 141 (a)(18,0), (b)(19,0) ve (c) (20,0) Zigzag TDKNT'lerin 300K sıcaklıkta 80 katman simülasyon görüntüleri

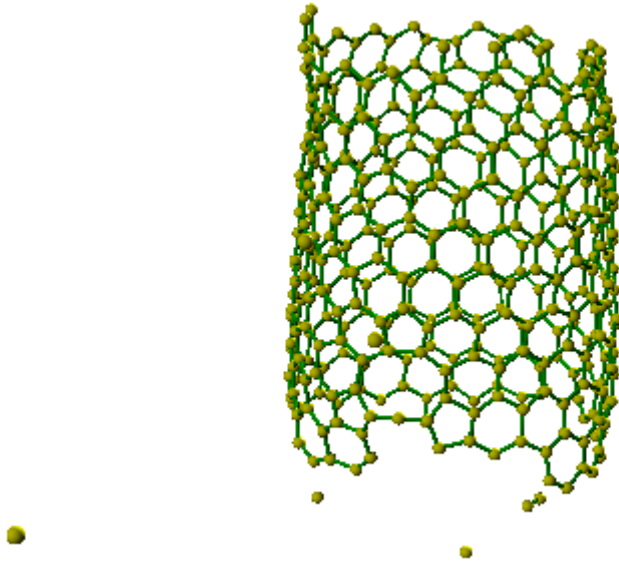
**YÜKSEK SICAKLIKLARDA GERME - SIKIŞTIRMA ETKİSİ ALTINDAKİ TEK
DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN SİMÜLASYON GÖRÜNTÜLERİ**



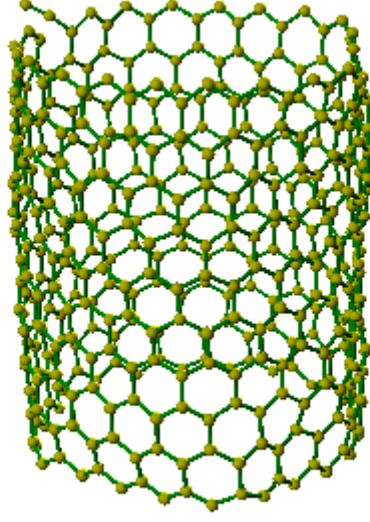
Şekil 5. 142 (18,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 143 (19,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 144 (20,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%18$ değerindeki simülasyon görüntüsü



Şekil 5. 145 (22,0) Zigzag TDKNT'nin 1200K sıcaklıkta $\varepsilon = \%15$ değerindeki simülasyon görüntüsü

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Necati VARDAR
Doğum Tarihi ve Yeri : 24.06.1982 / İstanbul
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : necativardar@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2006
Lisans	Fizik	Dumlupınar Üniversitesi	2003
Lisans	İşletme	Anadolu Üniversitesi	Devam ediyor
Lise	Mat-Fen	Şehremini Lisesi	1999

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2010-2012	Koç Üniversitesi Fizik Bölümü	Lab. Mühendisi
2003-2005	Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü	Öğrenci Asistan

YAYINLARI

Makale

1. G.Dereli, B.S.Mısırlıoğlu, Ö.Eyecioğlu and **N.Vardar**, "A New Lower Limit for the Bond Breaking Strains of Defect-Free Carbon Nanotubes: Tight Binding MD Simulation Study", Computational Materials Science, *Article in Press* (2012).
2. G.Dereli, **N.Vardar**, and Ö. Eyecioğlu, "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 (2010).
3. 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).

Bildiri

Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitabında basılan bildiriler:

1. G.Dereli, **N.Vardar**, (Poster), "Electronic Behavior of Strained Carbon Nanotubes", 28th International Conference of the Turkish Physical Society, September 6-9, 2011 Bodrum, Turkey.
2. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Effect of Strain and Temperature on the Fracture Behavior of a Zigzag Single Walled Carbon Nanotube", 27th International Conference of the Turkish Physical Society, September 14-17, 2010 Istanbul, Turkey.
3. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, İ. Arı, **N.Vardar** (Sözlü), "Performance Analysis of Parallel Algorithms Used in Simulation of Single Wall Carbon Nanotubes at Two Different Temperatures", 27th International Conference of the Turkish Physical Society, September 14-17, 2010 Istanbul, Turkey.
4. G.Dereli, **N.Vardar**, and Ö. Eyecioğlu (Poster), "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (13,0) and (15,0) Carbon Nanotubes", TechConnect World Conference & Expo 2010, 21-25 June, 2010, Anaheim Convention Center, Anaheim, CA.
5. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Bandgap changes of Single Walled Carbon Nanotubes under uniaxial strain", 26th International Conference of the Turkish Physical Society, September 24-27, 2009 Bodrum, Turkey.
6. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Tight-binding Molecular Dynamics Simulations of (18,0), (19,0) and (20,0) Single Walled Carbon Nanotubes under uniaxial strain", 26th International Conference of the Turkish Physical Society, September 24-27, 2009 Bodrum, Turkey.
7. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Poster), "Simulations of Strain on the Electronic Properties of Semiconducting SWCNTs: Order N, paralel, Tight-Binding Molecular Dynamics Technique", 7th General Conference of Balkan Physics Union, September 09-13 2009, Alexandroupolis, Greece.

8. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Strained (19,0) and (20,0) SWCNTs: Mechanical and Electronic Properties", NANOMATS09 "International Conference on Nanomaterials and Nanosystems", August 10-13, 2009, İstanbul Technical University, İstanbul.
9. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Poster), "Effect of Strain on the Single-Wall Carbon Nanotubes", NANOMATS09 "International Conference on Nanomaterials and Nanosystems", August 10-13, 2009, İstanbul Technical University, İstanbul.
10. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü) "Strain Effects on the Energy Band Gaps of Carbon Nanotubes", 25th International Conference of the Turkish Physical Society, August 25-29, 2008, Bodrum, Turkey.
11. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Poster), "Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotubes", (Poster), NANOMAT06 International Workshop on Nanostructured Materials, June 21-23, 2006 Antalya, Turkey.

Ulusal bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında basılan bildiriler:

1. Banu Süngü Mısırlıoğlu, Gülay Dereli, Önder Eyecioğlu, and **Necati Vardar** (Sözlü), "Breaking Strains of Defect-Free Carbon Nanotubes: Tight Binding MD Simulation Study", 19. İstatistik Fizik Günleri, Sabancı Üniversitesi, İstanbul, 28-30 Temmuz, 2012.
2. G.Dereli, **N.Vardar** (Sözlü), "Strain Applied CNTs at Elevated Temperatures", 18. Statistical Physics Days, June 30-2 July, 2011, Sabanci University, İstanbul.
3. G.Dereli, İ.Arı, **N.Vardar** and Ö.Eyecioğlu (Poster), "Speed up and efficiency of the algorithms used in simulations of (7,7) Carbon Nanotubes, 2. Ulusal Yüksek Başarımlı ve Grid Hesaplama Konferansı, July 13-15, 2010, İstanbul Technical University, İstanbul.
4. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu and **N.Vardar** (Sözlü), "Electronic Structure of Single Wall Carbon Nanotubes with Defects", 17. Statistical Physics Days, July 1-3, 2010, Sabanci University, İstanbul.
5. G.Dereli, **N.Vardar** and Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Durability of Single Wall Carbon Nanotubes", 17. Statistical Physics Days, July 1-3, 2010, Sabanci University, İstanbul.
6. G.Dereli and **N.Vardar** (Sözlü), "Band Gap Modification of (18,0) and (19,0) Zigzag Single Walled Carbon Nanotubes", Nabitek 2010, June 20-23, 2010, Kaya Ramada Plaza, İstanbul.
7. G.Dereli, **N.Vardar** and Ö.Eyecioğlu (Poster), "MD Simulations of the Tensile Strength of (20,0) Single Walled Carbon Nanotubes", NanoTRVI, June 15-18, 2010, Izmir Institute of Technology, Izmir.
8. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu and **N.Vardar** (Sözlü), "Electronic Structure of Single Wall Carbon Nanotubes With Vacancy Defect", NanoTRVI, June 15-18, 2010, Izmir Institute of Technology, Izmir.
9. G.Dereli and **N.Vardar** (Sözlü), "Band Gap Modification of Single Wall Carbon Nanotubes", Workshop on Current Trends in Molecular Nanobiosciences, Bilkent University, Bilkent, Ankara, 13-16 January, 2010.

10. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Single Walled Carbon Nanotubes under Uniaxial Strain", 13. Liquid State Physics Symposium, Oct. 27-29, 2009, Piri Reis University, İstanbul, Turkey.
11. G.Dereli, **N.Vardar** and Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Simulations of Strain on the Mechanical and Electronic Properties of Semiconducting SWCNTs", 16. Statistical Physics Days, June 25-27, 2009, Koç University, İstanbul.
12. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu and **N.Vardar** (Sözlü), "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (12,0) and (14,0) Carbon Nanotubes", 16. Statistical Physics Days, June 25-27, 2009, Koç University, İstanbul.
13. G.Dereli, **N.Vardar** and Ö.Eyecioğlu (Poster), "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (19,0) and (20,0) SWCNTs", NanoTRV, June 8-12, 2009, Anadolu University, Eskişehir.
14. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu and **N.Vardar** (Poster), "Effect of Strain on the Energy Band Gaps of (13,0) and (15,0) Carbon Nanotubes", NanoTRV, June 8-12, 2009, Anadolu University, Eskişehir.
15. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Electronic Properties of zigzag single walled Carbon Nanotubes under Uniaxial strain", Workshop on Nanoelectronics and Nanophotonics, Jan 26-28, 2009, Bilkent University, Ankara.
16. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Band Gap Modification of Carbon Nanotubes Under Tension", 12. Liquid State Physics Symposium, Oct 31-Nov 2, 2008, İstanbul University, İstanbul, Turkey.
17. G.Dereli, **N.Vardar** (Sözlü), "Temperature Dependence of the Electronic Properties of Carbon Nanotubes", 15. Statistical Physics Days, June 19-21, 2008, Koç University, İstanbul.
18. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Poster), "High Temperature Band Gaps of Semiconducting (10,0) Single-Walled Carbon Nanotubes", NanoTRIII, 11-14 June 2007, Bilkent University, Ankara, Turkey.
19. G.Dereli, **N.Vardar**, Ö.Eyecioğlu (Sözlü), "Temperature Dependence of the Energy Band Gaps of Carbon Nanotubes" 11. Liquid State Physics Symposium, Sept 27-30 2007, İstanbul University, İstanbul, Turkey.
20. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Band Gaps of (10,0) Carbon Nanotubes", 14. Statistical Physics Days, Bosphorus University, İstanbul, June 21-23, 2007, Turkey.
21. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Temperature Effect on the Electronic Properties of Single Walled Carbon Nanotubes", 10. Liquid State Physics Symposium, Sept 28 - Oct 01, 2006, İstanbul University, İstanbul.
22. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Electronic Properties of Single Wall Carbon Nanotubes with Different Chiral Symmetries", 13. Statistical Physics Days, Bosphorus University, İstanbul, July 06-08, 2006.
23. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar**, İ.Arı (Poster), "Carbon Nanotube Simulations in Parallel Environments", NANOTR2, METU, Ankara, May 03-05, 2006.
24. G.Dereli, Ö.Eyecioğlu, **N.Vardar** (Sözlü), "Energy Gaps of Single Wall Carbon Nanotubes" NANOTR2 (Nanoscience and Nanotechnology 2006), ODTU, Ankara, 03-05 Mayıs, 2006.

Proje

1. Karbon Nanotüplerin, Nano-metal ve alaşımlarının Bilgisayar Simülasyonu, YTU BAPK Projesi, YTÜ BAPK 24-01-01-04, **Araştırmacı**, 2004-2009.
2. Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin (TDKNT) Gerinim Altında Mekanik ve Elektronik Özelliklerinin Bilgisayar Simülasyonu, YTU BAPK Projesi, YTÜ BAPK 2009-01-01 KAP01, **Araştırmacı**, 2010-....
3. Gerinim Altındaki Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Elektronik Yapılarındaki Değişim: Paralel $O(N)$ Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyonu, YTÜ BAPK Projesi, YTÜ BAPK 2010-01-01-DOP01, **Araştırmacı**, 2010-...
4. Establishment of Quantum Cryptology Research Center, DPT (State Planning Organization) 2009K120200, **Laboratuvar Mühendisi**, 2010-2012