

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLER ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK
YAPISINA SICAKLIĞIN ETKİSİ

Aijamal MURZAKASUMOVA

FBE Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında

Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez danışmanı: Prof. Dr. Gülay DERELİ

İstanbul, 2008

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ.....	iii
KISALTMA LİSTESİ.....	iv
ŞEKİL LİSTESİ.....	v
ÇİZELGE LİSTESİ.....	vi
ÖNSÖZ.....	ix
ÖZET.....	x
ABSTRACT.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
1.1 Genel Bilgiler.....	4
1.2 Karbon Nanotüplerin Özellikleri ve Uygulama Alanları.....	7
2. KARBON NANOTÜPLERİN YAPISAL ve FİZİKSEL NİTELİKLERİ.....	8
2.1 Karbon Nanotüpler.....	8
2.2 Karbon Nanotüplerin Oluşum Yönleri.....	8
2.3 Chiral Vektörü ($\vec{C}_h$).....	9
2.4 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$).....	12
2.5 Simetri Vektörü ($\vec{R}$).....	13
2.6 Brilluoin Bölgeleri.....	16
3. KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ.....	19
3.1 TDKNT'lerin Elektronik Yapısı.....	19
3.2 Enerji Dispersiyon Bağlılıkları.....	19
3.3 Zigzag ve Armchair nanotüplerin Enerji Dispersiyon Bağlılıkları.....	24
4. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON YÖNTEMİ.....	32
5. LABORATUVAR SONUÇLARI.....	34
5.1 Farklı Yapılardaki Zigzag KNT'lerin eDOS Özellikleri.....	59
5.2 YORUM.....	74
KAYNAKLAR.....	76
EK I Δt BELİRLENMESİ.....	79
ÖZGEÇMİŞ.....	80

SİMGE LİSTESİ.

$\vec{C}_h$	Chiral Vektörü
$\vec{T}$	Öteleme Vektörü
$\vec{R}$	Uzay Simetri Vektörü
$\phi(\vec{k}, \vec{r})$	Block Fonksiyonu
H_{top}	Elektron ve iyonlardan oluşan sistemin toplam Hamiltonyeni
h	Tek parçacık Hamiltonyeni
$ \Psi_n\rangle$	Sistemin ‘ n ’ durum öz fonksiyonu
$\mathcal{E}_n$	‘ n ’ durum enerji öz değerleri
E_{bs}	Bant yapısı enerjisi
$\vec{F}_a$	Atomlar arası kuvvetler
N_{cel}	Alt sistem sayısı
a	Alt sistem indisi
P^i	Elektronun izdüşümü
$O^i \equiv f((\mathcal{E}_i - \mu) / k_b T)$	i Elektronun yerleşimi (işgal katsayısı)
n	Sistemdeki atom sayısı
NN	Etkileşim mesafesi içindeki Buffer bölgesindeki atomların sayısı

KISALTMA LİSTESİ.

KNT	Karbon Nanotüp
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
ÇDKNT	Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
MD	Moleküler Dinamik
SBMD	Sıkı Bağ Moleküler Dinamik
LCAO	Atomik yörüngelerin lineer kombinasyonu
GSP	Goodwin-Skinner-Pettifor
$O(N)$	Order (N)
$O(N^3)$	Order (N^3)
eDOS	Elektronik Durum Yoğunluğu (Electronic Density of States)
BSS	“Buffer Skin” Büyüklüğü
E_F	Fermi enerjisi
FDD	Fermi-Dirac Dağılımı
Egap	Enerji Bant aralığı

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1 Karbon Nanotüp görüntülemeleri.....	5
Şekil 2.1 a) Armchair KNT, b) Zig-zag KNT, c) Chiral KNT	9
Şekil 2.2 TDKNT'lerin açılmış petek örgüsü Chiral vectör $\vec{C}_h = (4,2)$ (Saito vd, 1998).....	10
Şekil 2.3 Nanotüpün uzay grubu simetri operasyonu (Saito vd, 1998).....	14
Şekil 2.4 Brillouin Bölgesi (Dresselhaus, 1998).....	16
Şekil 3.1 Metalik enerji bandları (Dresselhaus, 1998).....	22
Şekil 3.2 Yarıiletken ve Metalik karbon nanotüplerin yapısı.....	22
Şekil 3.3 a) Armchair, b) Zigzag nanotüplerin gerçel ve ters uzayda birim hücreleri.....	24
Şekil 3.4 Enerji dispersiyon bağıntıları	25
Şekil 3.5 TDKNT'lerin durum yoğunluğu.....	29
Şekil 3.6 Zig zag Karbon nanotüplerin durum yoğunluğu.....	27
Şekil 3.7 Enerji bant aralığı.....	27
Şekil 5.1 Metal ve yarıiletken KNT'lerin Yıldız Teknik Üniversitesi Karbon Nanotüp Simülasyon laboratuvarında yapılan simülasyon görüntüleri.....	32
Şekil 5.2 Üretilen Karbon Nanotüp formları (a) Tek katmanlı, b) Çok katmanlı, Çift katmanlı d) Fülleren içeren tek katmanlı.....	32
Şekil 5.3 Zig zag TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi.....	39
Şekil 5.4 Metalik TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi.....	39
Şekil 5.5 Yarıiletken TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi.....	40
Sekil 5.6 (11.0) KNT'lerin 0.1K ve 300K' de Enerjiye bağlı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonun değişimi.....	42
Sekil 5.7 (15.0) KNT'lerin 600K ve 2100 K' de Enerjiye bağlı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonun değişimi.....	43
Sekil 5.8 (17x0) KNT'lerin 600 ve 1200 K' de Enerjiye bağlı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonun değişimi.....	44
Şekil 5.9 Yarıiletken Zigzag KNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak Egap değişimi.....	51

Şekil 5.10 Metalimsi-yarıiletken Zigzag KNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak Egap Değişimi.....	52
Şekil 5.11 9x0 KNT'ler için, 0,1K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım: 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	55
Şekil 5.12 11x0 KNT'ler için 0,1 K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	56
Şekil 5.13 12x0 KNT'ler için 0.1K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	57
Şekil 5.14 13x0 KNT'ler için 0.1K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	58
Şekil 5.15 14x0 KNT'ler için 0.1K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	59
Şekil 5.16 15x0 KNT'ler için 0.1K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	61
Şekil 5.17 9x0 KNT'ler için, 300K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım: 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	62
Şekil 5.18 11x0 KNT'ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	63
Şekil 5.19 12x0 KNT'ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	64
Şekil 5.20 13x0 KNT'ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	65
Şekil 5.21 14x0 KNT'ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	66
Şekil 5.22 15x0 KNT'ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	67

Şekil 5.23 17x0 KNT’ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	68
Şekil 5.24 21x0 KNT’ler için 300 K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.8, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	69
Şekil 5.25 11x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	70
Şekil 5.26 12x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	71
Şekil 5.27 13x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	72
Şekil 5.28 14x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	73
Şekil 5.29 15x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	74
Şekil 5.30 17x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	75
Şekil 5.31 21x0 KNT’ler için 600 K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.8, MD adım3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.....	76

ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge 2.1 Karbon nanotüplerin sınıflandırılması. (R.Saito, G.Dresselhaus).....	12
Çizelge 2.2 Çeşitli karbon nanotüplerin karakterize etme parametreleri.....	16
Çizelge 2.3 KNT'ler için Parametreler (R.Saito vd,1998).....	19
Çizelge 5.1 Zigzag KNT'ler için ‘‘Buffer Skin’’ büyüklük (A^0) Değerleri.....	39
Çizelge 5.2 Zigzag KNT'lerin 0.1K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Diğerleri.....	40
Çizelge 5.3 Zigzag KNT'lerin 300K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri.....	41
Çizelge 5.4 Zigzag KNT'lerin 600K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	41
Çizelge 5.5 Zigzag KNT'lerin 900 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.....	42
Çizelge 5.6 Zigzag KNT'lerin 1200K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	42
Çizelge 5.7 Zigzag KNT'lerin 1500K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	43
Çizelge 5.8 Zigzag KNT'lerin 1700K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	43
Çizelge 5.9 Zigzag KNT'lerin 1900K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	44
Çizelge 5.10 Zig-zag KNT'lerin 2100K Sıcaklıktaki Fermi Enerji Değerleri.....	44
Çizelge 5.10 Zigzag KNT'ler için 0.1K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g)Değerleri.....	54
Çizelge-5.11 Zigzag KNT' ler için 300K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	54
Çizelge 5.12 Zigzag KNT'ler için 600K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	55
Çizelge 5.13 Zigzag KNT'ler için 900K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	55
Çizelge 5.14 Zigzag KNT'ler için 1200K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	56
Çizelge 5.15 Zigzag KNT'ler için 1500K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	56
Çizelge 5.16 Zigzag KNT'ler için 1700K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	57
Çizelge 5.17 Zigzag KNT'ler için 1900K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	57
Çizelge 5.18 Zigzag KNT'ler için 2100K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri.....	58
Çizelge 5.19 ((1) D. H. Oh vd, 2000, (2) B. Shan, K. Cho 2005, (3) M. Simeoni vd, 2005, (4) R. Saito vd, 1998, (5) Y. I. Prylutsky vd, 2000, X.Blase vd, 1994).....	78

ÖNSÖZ

Bu tez çalışması, Yıldız Teknik Üniversitesin’de yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır. İlk olarak tez çalışmamda bana önderlik eden, yorum ve önerileri ile büyük yardımda bulunan Bilgisayar Simülasyon Laboratuvarını kuran tez danışmanı hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ’ye, ayrıca her zaman manevi desteğini esirgemeyen değerli hocam Fizik Bölümü Başkanı Prof Dr Kubilay KUTLU’ya teşekkürü bir borç bilirim

Çalışmalarında bana yardımcı olan hocalarım Arş. Gör. Banu SÜNGÜ, Arş. Gör. Önder EYECİOĞLU ve doktora öğrencisi Necatı VARDAR’a ayrıca teşekkürlerimi iletirim ve tez çalışmam sürecinde bana her türlü yardımı sağlayan maddi manevi desteğini esirgemeyen eşim Zairbek, kızım Rayhan ve ablam Aygerim’e ayrıca teşekkür ederim

ÖZET

Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon ($O(N)$ SBMD) yöntemi kullanılarak farklı yapılarıdaki tek duvarlı karbon nanotüplerin (TDKNT) fiziksel ve elektronik yapıları incelenmiştir. TDKNT'lerin elektronik yapısı tüpün çapına ve simetrisine bağlıdır ve chiral vektörüyle belirlenmektedir. Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler yapısal parametrelerine bağlı olarak hem metalik hem de yarıiletken olabilirler.

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin yapısal ve elektronik özelliklerini incelemeye ($O(N)$) Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemin kullanılır. Order “N” algoritmaları paralel hesaplama için uygun algoritmalar. Klasik sıkı-bağ yöntemi Shrödinger denklemini direk matris köşegenleştirilmesi ile çözer ve atom sayısının kübü ile orantılı simülasyon zamanı kullanır. $O(N)$ metodu band enerjisini gerçek uzayda çözer ve bağlanmaya yalnız yerel çevrenin katkısı olduğu yaklaşımını yapar. $O(N)$ yöntemi, atom sayısı ile lineer orantılı simülasyon zamanı kullanır. Bu da simülasyonlarda hesaplama zamanını kısaltır.

Bu çalışmada (9x0) dan başlayarak (21x0)'a kadar olan Zigzag TDKNT'lerin, 0.1 K düşük sıcaklıklardan 2100 K yüksek sıcaklıklara kadar (0.000008 eV ve 0.175 eV) elektronik sıcaklıklarda, her bir karbon nanotüp için Fermi enerji seviyeleri, bant aralığı enerjileri, Elektronik Durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri, Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu ve tüplerin yarıçapları hesaplanmıştır.

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin elektronik yapılarının incelenmesi için Zigzag karbon nanotüplerin Elektronik durum yoğunluğu ve bant aralığı enerjileri karşılaştırılmalı olarak incelenmiştir ve bu sonuçların literatürdeki sonuçlarla kıyaslaması yapılmıştır.

Anahtar kelimeler: Karbon nanotüp, N-mertebe, sıkı bağ, moleküler dinamik simülasyonu, elektronik özellik, durum yoğunluğu, enerji band aralığı, sıcaklık, dağılım.

ABSTRACT

The physical and electronic structures of the Single-Walled Carbon Nanotubes (SWCNT's) in different forms have been examined by using an Order-N ($O(N)$) Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation (TBMD) method. Electronic structures of SWCNT's depend on the diameter and chirality of the tube and can be defined by means of chiral vector. Single-Walled Carbon Nanotubes show metallic or semi-conductor behaviors depending on their geometrical parameters.

We use the Order-N ($O(N)$) Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation method to examine physical and electronic structures of Single-Walled Carbon Nanotubes. Our Order-N($O(N)$) parallel tight-binding Molecular Dynamics Simulation method. TB solves the Schrödinger equation by direct matrix diagonalization and uses the simulation time in cubic scaling with the respect to the number of atoms ($O(N^3)$). The Order N ($O(N)$) methods solve for the band energy in real space and make the approximation that only the local environment contributes to the bonding, and hence the band energy, of each atom. In this case, the run time would be linearly scaled with respect to the number of atoms.

Some physical characteristics of the Zigzag carbon nanotubes between 9×0 and 21×0 , such as Fermi energies, energy, band widths, densities of states, eDOS graphs, Fermi-Dirac distribution functions, radiuses and the relations among these have been examined at the temperatures from low (0.1 K) to high (2100 K); at the electronic temperature of 0.000008 eV and 0.175 eV and at the equilibrium state of the tubes.

The “electronic densities of states” of the carbon nanotubes with different chiralities have been comparatively examined to examine the electronic forms of the Single-Walled Carbon NanoTubes; and the results have been compared with the results in the literature.

Keywords: Carbon nanotube, $O(N)$ tight binding, molecular dynamics simulation, temperature, density of states (eDOS), band gaps, electronic properties, distribution.

1. GİRİŞ

Son yıllarda düşük boyutlu sistemler arasında, birçok ilginç gelişme ve keşifler olmuştur. Modern mikro öğretim tekniklerinin gelişmesi, nanoteknolojinin doğmasına yol açtı ve çağımızın en öncelikli konularından birisi oldu. Herhangi uzay boyutu doğrultusunda kuantum mekaniksel olarak hapislenmiş elektron sistemleri elde etmek mümkündür: kuantum kuyuları, kuantum telleri ve karbon nanotüpler bunun tipik örnekleridir. Son yıllardaki araştırma konuları bu yapıların elektronik özelliklerine odaklanmıştır, çünkü nanotüpler tek boyutlu kuantum tellerin ilk örneği olarak ele alınabilir. Özellikle bunların teknolojide potansiyel kullanımı, önemini daha da arttırmaktadır. Nanometre boyutlarında malzeme; daha işlevsel, daha mukavemetli olabiliyor, daha hızlı işlem yapabiliyor. Buna karşılık daha az enerji harcayıp daha az yer kaplayabiliyor, işte bu gelişmeler 20 yüzyılın sonunda bilim adamlarını nanometre ölçütlerinde bilime yöneltti. Günümüzde nano, teknik bir ölçü birimi olarak kullanılır ve herhangi bir birimin milyarda biri anlamı taşır. Genellikle metre ile birlikte kullanılır. Nanometre, bir metrenin milyarda biri ölçüsünde bir uzunluğu temsil eder yaklaşık olarak ard arda dizilmiş 5 ila 10 atom.

Bu boyutlarda sistemlerin fiziksel davranışlarında normal sistemlere kıyasla farklı özellikler gözlemlenmektedir. Nano-ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklı olup nano-ölçeğe yaklaştıkça birçok özel ve yararlı olay yeni özellikler ortaya çıkmaktadır. Örneğin, iletim özellikleri (momentum, enerji ve kütle) artık sürekli olarak değil ancak kesikli olarak tarif edilmektedir. Şimdi maddeyi nanometre seviyesinde işleyerek ve ortaya çıkan değişik özellikleri kullanarak, yeni teknolojik nano-ölçekte aygıtlar ve malzemeler yapmak mümkün olmuştur. Örneğin tarama tünelleme ve atomik kuvvet mikroskoplarını kullanarak yüzey üzerinde atomları iterek birbirlerinden ayırmak ve istenilen şekilde dizmek mümkündür. Bütün bu gelişmeler, 19. yüzyılda dünyayı yeniden şekillendiren sanayi devrimine eşdeğer bir bilimsel ve teknolojik devrim başlatmıştır. Bütün bu çalışmalar ve gelişmeler elektronik, kimya, fizik, malzeme bilimi, uzay ve sağlık bilimlerini harekete geçirmiştir. Önümüzdeki birkaç yıl içerisinde nanoteknoloji sayesinde süper kompüterlere mikroskop altında bakılabilecek, insan vücudunun içinde hastalıklı dokuyu bulup iyileştiren, ameliyat yapan nano robotlar bulunabilecek, insan beyninin kapasitesi ek nano hafızalarla güçlendirebilecek, kirliliği önleyen nano parçacıklar sayesinde fabrikalar çevreyi çok daha az kirletecektir. Nanoteknolojide gelecek 10-15 yıl içinde büyük bir sürpriz çıktılar ve yeni pazarlar beklenmektedir Nanotüpler ilk olarak tek boyutlu kuantum teller için örnek olarak düşünüldüğünden çok büyük ilgi çekti. Diğer kullanışlı özelliklerin keşfedilmesiyle; özellikle

dayanıklılığı, potansiyel kullanım alanlarını çoğalttı. Örneğin, karbon nanotüpler nanometrik boyutlardaki elektronik devrelerde ya da kuvvetlendirilmiş polimer malzemelerde kullanılabilir. Nanoteknolojinin en önemli konularından biri karbon nanotüplerdir. Karbon nanotüpler önemli elektronik ve mekanik özelliklere sahip nano yapılarıdır. Kısaca; bir nanoyapının fiziksel özellikleri, bağ yapısı ve dolayısı ile mukavemeti onun büyüklüğüne ve boyutlarına bağlı olarak önemli değişimler gösterebilmektedir. Nanobilim çok küçük boyutlarda ortaya çıkan yeni davranışları kuantum kuramı yardımı ile anlamamızı sağlar. Nanoteknoloji ise yeni malzemeler, nanoyapılar tasarlayıp sentezlemeyi veya molekülleri işlevsel hale getirip onların kazandıkları olağanüstü özellikleri yeni uygulamalarda kullanmayı amaçlar (ERGÜN 1997).

Karbon malzemelerde (nanotüpler-fullerene kafesler) mükemmel özelliklere sahiptir. Karbon nanotüpler orijinal olarak fullerene araştırmasının bir yan ürünü olarak keşfedilmiştir Karbon nanotüpler çok ilginç elektronik, mekanik ve termal özelliklere sahiptir (Lijima, 1991). Normalde her bir karbon (C) atomu bir birine 120° C açı yapan 3 kovalent bağ oluşturur ve sonuçta 1 atom kalınlığında bal peteğine benzer tabakalar oluşur. Bu tabakaların üst üste, yan yana vs. gibi dizilmeleriyle kurşun kalem uçları gibi normal grafit yapılar meydana gelir (Ebbesen, 1997). Bilinenlerden çok farklı olarak, grafit tabakaların kıvrılarak nano çapa sahip boru şeklinde bir yapılandırma oluşturulmasıyla “karbon nanotüp” olarak bilinen bir yapı ortaya çıkar, bu şimdiye kadar üretilen en ince ve en sağlam malzemedir (Saito vd., 1992). Nanoteknoloji geleceğin teknolojisidir ve bu konuda çok yoğun bilimsel araştırmalar yapılmaktadır. Bu bilimsel araştırmaların sonuçlarını çok yakın zamanda günlük yaşamımızda hissedeceğimiz konusunda şüphe yoktur. Nanoteknolojinin çok sayıda bilim dalının çalışma konusu olması ve teknolojinin çok geniş bir spektrumunda yer alması nedeni ile disiplinler arası çalışmaları gerektirmektedir. Bu nedenle bu konuda disiplinler arası çalışmaları da içerecek büyük yapılanmalara gereksinim vardır. Gelişen bir teknoloji olan nanoteknoloji’ye birçok ülke yatırım yapmaktadır.

Nano parçacıklı malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin incelenmesinde, birçok kusursuzluklar olmasından dolayı bilgisayar simülasyonu ile incelenmesi büyük önem kazanmaktadır. Deneysel çalışmalarda KNT’lerin büyütülmesi sırasında oluşan yapısal bozukluklar ve ölçüm zorluğundan oluşan dezavantajlar bilgisayar simülasyonda tamamıyla ortadan kalkmaktadır ve çalışmamız için kolaylık sağlamaktadır. Simülasyon bilgisayarda yapılan deney olarak algılanabilir. Teorik olarak hesaplanması zaman gerektiren ve deneysel olarak da incelenmesi zor olan sistemlerde çok büyük yardımcı olmaktadır. Son gelişmiş malzemelerin yapısal özelliklerini, deneyden türetilen atomlar arası potansiyeller kullanılan

Klasik Moleküler Dinamik (MD) simülasyon yöntemiyle hesaplamak mümkündür (Dereli, 2003). Karbon nanotüplerin elektronik yapılarının sıcaklıktan itibaren değişimlerinin incelenmesi kuantum mekaniksel yöntemler gerektirmektedir. Bilgisayar Simülasyonda kullandığımız Sıkı-Bağ Hamiltoniyeni ile hesaplara katması sebebiyle elverişli bir sistemdir. Sıkı-Bağ teorisi; atomik ve elektronik yapı, toplam enerji, moleküler sistemler için atomlar arası kuvvetlerin hesaplanmasında başarıyla uygulanan bir yöntemdir. Bu yöntemin diğer yararları olarak uygulama kolaylığı, hesaplama yükünün az olması sonuçların güvenilirliği ilk sıradadır.

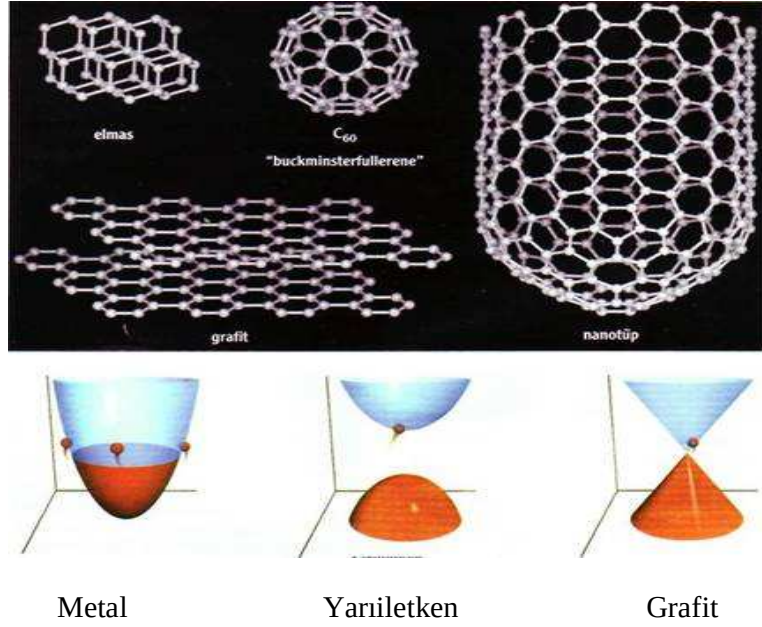
Yüksek Lisans tezimde $O(N)$ SBMD yöntemini kullanılarak (9x0'dan 21x0)'a kadar Zigzag Karbon Nanotüplerin Bilgisayar Simülasyon laboratuvarında incelenmesi hedeflendi. Simülasyonlar "24-01-01-04" nolu YTÜ-BARK projesi ile kurulan "Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarı"nda yapıldı Çalışma toplam beş ana kısma ayrılmaktadır. Birinci kısımda giriş kısmıyla başlayıp karbon nanotüplerin genel tanımı verilmektedir. Bölüm 2'de KNT'lerin yapısal özellikleri, oluşum yönleri, sınıflandırılması ve bunlara ait terminoloji anlatılmıştır. Bölüm 3'de Karbon Nanotüplerin elektronik yapıları, durum yoğunluğu, Enerji bant aralığı ve enerji dispersiyon bağıntıları anlatılmıştır. Bölüm 4'de Moleküler Dinamik Simülasyon Yönteminden söz edilmiştir ve son olarak tezin 5'inci kısmında ise çalışma sonuçları verilmiş olup bu sonuçlarla ilgili yorumlar ve literatürdeki çalışmalarla kıyaslamalar yapılmıştır.

1.1 Genel Bilgiler

Teknolojide yaşanan hızlı gelişmeler nano teknolojinin doğmasına yol açtı ve çağımızın en öncelikli konularından biri oldu. Karbon (C) elementi, canlıların temel taşıdır. Yapısında Karbon içermeyen hiçbir canlı varlık yoktur. Karbon nanoyapılar, bu tür nano sistemlerin yapılmasında, şimdilik tek adaydır. Karbon, bir boyutlu (1B) iletken, yarıiletken nanotüplerden; sıfır boyutlu (0B) nanotoplara kadar, farklı kararlı yapılara ve birçok ilginç özelliğe sahip harikulade bir elementtir. Karbonun (1B) ve (0B) yapıları, nanometre düzeyinde oldukları için, bu sistemlere nanotüpler ve nanotoplar denilmektedir. Tek duvarlı bir karbon nanotübü tek bir grafit tabakasının her iki kenarında fulleren uçları ile kendi etrafında döndürülmüş halidir (single shel), çok sayıda tabakaların iç içe kıvrılmasıyla da çok kabuklu (multi shel) nano tüpler elde edilir (Ebbesen vd., 1997).

Son yıllarda tüm araştırmacılar karbon nanotüplerin en heyecan verici ve en ilginç özelliklerinden birisi olan elektronik özelliklerini araştırmaktadırlar. Bir karbon nanotüp, grafit bir tabakanın silindirik şeklinde bükülmesiyle elde edilir. Her tüp chiral indis denilen ve (n, m) ile gösterilen bir sayı tanımı ile karakterize edilir; burada (n, m) tam sayılar olup, karbon nanotüpleri tek olarak belirler, bunların elektronik yapıları (n, m) ye bağlı ya metalik ya da yarıiletkendir (Dresselhaus vd., 1992). Karbon nanotüplerin birçok özelliği iki boyutlu grafit tabakasından kaynaklanmaktadır: bu nedenle, karbon nanotüplerin incelenmesine iki boyutlu grafit yapısı ile başlanır ve bu yapı silindirik şeklinde katlanıp tek boyutlu tüp elde edilirken bu özelliklerin nasıl geliştiği ele alınır. Hiçbir katkı maddesi olmaksızın, nanotüplerin, geometrik parametrelerinin değiştirilmesiyle, elektronik özellikleri de değiştirilebilir. Tüplerin elektronik uygulamalarında, önemli bir yeri vardır çok esnek ve sağlamdırlar. Karbon nanotüpler radyan yönde kolayca esneyebilirken, eksen yönde çelikten defalarca daha yüksek bir mukavemete sahip olabilmektedir. Daha da önemlisi tüp; yarıçapına, atom tabakasının sarmal açısına göre çok değişik elektronik özellikler göstermektedir. Belli sarmal açılarda metal gibi davranıp yüksek bir iletkenlik gösterirken, başka sarmal açılarda yarıiletken olabilmektedir. Üstelik bu yarıiletkenin yasak bant aralığı tüpün çapına bağlı olarak değişebilmektedir (Popov., 2004). KNT'ler ise çaplarına, geometrik yapılarına bağlı olarak farklı davranışlar gösterirler. Örneğin, çapı $4 \text{ \AA}$ olan bir nanotüp (4000 K) civarındaki yüksek sıcaklıklarda karbon atomlarının üç bağı arasında bir atomik boşluğa sahip olup silindirik şeklini kaybetmemektedir, Bununla birlikte Moleküler Dinamik (MD) simülasyon metodun kullanılarak çeşitli KNT'lerin elektronik özelliklerin incelemiştirler. Karbon nanotüplerin bilimsel macerası 1985'te 60 ya da daha fazla karbon atomunun

birleştirilmesiyle oluşan futbol topu şeklindeki moleküllerin keşfiyle başlanmıştır. Bu topların diğer atom veya moleküllerle yaptığı bileşiklere “fullerin” denir. Bu keşiften sonra birkaç laboratuvar sıcak karbon buharını yoğunlaştırarak futbol topu şeklindeki molekülleri elde etmeye çalışmış, bu elde etme işleminden küçük değişikliklerle çeşitli şekil ve boyutlarda küreye benzer yapılar elde edilmiştir.



Şekil 1.1 Karbon Nanotüp görüntülemeleri. (Smalley, 1996).

Nanotüpler, kristalin grafitlerden oluşan hekzagonal örgüdeki karbon atomlarından oluşur. 1993’de tek katmanlı nanotüplerin elde edilmesi, karbon nanotüplerin gelişmesinde büyük bir aşama olmuştur. 1996’da Rice Üniversitesi Araştırma Grubunun tek katmanlı nanotüp grupları oluşturmada daha etkin bir yöntem bulmasıyla, çok sayıda karbon nanotüp deneylerinin önü açılmış oldu. Arzu edilen nanotüpler 1200⁰ C de karbonun Lazer-buharlaştırılmasıyla elde edildi. Daha sonra Montpellier Üniversitesinden Catherine Journet, Patrick Bernier ve çalışma grubu karbon Ark-buharlaştırma metoduyla iyonlaşmış karbon plazmasından tek katmanlı nanotüp elde etmişlerdir. Çok katmanlı karbon nanotüplerin büyütülmesi için katalizör gerekmezken, tek katmanlı karbon nanotüpler ancak katalizör ile büyütülebilmektedir. Karbon nanotüpler tesadüfen keşfedilmiş olmasına rağmen dünyanın dört bir yanında yoğun bir şekilde karbon nanotüplerin özelliklerinin araştırılmasına yol açtı. Araştırmacılar karbon nanotüplerin nano ölçekte birçok fiziksel, kimyasal, yapısal, elektriksel ve optik özelliklerinin olduğunu buldular. Karbon nanotüpler çok iyi elektrik ve ısı iletkenliğe sahip, olağan üstü elektronik özellikleri olan sert ve dayanıklı yeni bir karbon türüdür bu malzemenin hazırlanması, saflaştırılması malzeme özelliklerinin belirlenmesi üzerinde

literatürde yoğun çalışmalar bulunmaktadır. Karbon nanotüpleri çok farklı şekillerde ve farklı yöntemlerle elde edebilmekte ve boyutları, özellikleri saflık dereceleri açısından farklılıklar göstermektedir (Peter vd.,1999). Diğer taraftan karbon nanotüplerinin üretiminin zor ve pahalı olması da önemli bir problemdir. 1996'da Rice Üniversitesindeki grubun daha verimli bir şekilde tek katmanlı nanotüpleri üretmesiyle, karbon nanotüpler üzerine büyük miktarda deneyler yapılmasının önünü açtı. İstenilen nanotüpler 1200C°de fırında karbonun lazer buharlaşması sonucu elde edilir. Kobalt-nikel katalizörü, nanotüplerin oluşumunda kullanılır. Çünkü oluşum sırasında nanotüplerin sonlarının kapaklanması önler ve böylelikle %70-90 oranında karbon hedefleri tek katmanlı nanotüplere dönüştürülür, bunlar Çok Duvarlı Karbon nanotüplerdir ve ardından yoğun çalışmanın sonucunda 1993 yılında Tek Duvarlı Karbon Nanotüpleri üretmeyi başardılar. Nanotüpleri üretiminde kullanılan yaygın yöntemlerden biri "Karbon-Ark" yöntemidir. Bu yöntemde, biri uzun (6mm çapı) pozitif elektrot ve biri kısa (9 mm çap) negatif elektrot kullanılır. 500 tonluk He gaz ortamında elektrotlara 100A 18 V bir potansiyel uygulanır. Aralarındaki mesafe 1 mm de korunacak şekilde birbirlerine yaklaştırıldıklarında bir plazma oluşur. Bu plazmada uzun elektrot harcandıkça, kısa elektrot üzerinde karbonik bir tortu oluşur. Bu tortunun iç kısmındaki siyah çekirdek nanotüpleri ve değer nano parçacıkları içerir. Dış kısmındaki metalik gri kısımda ise herhangi bir nano parçacık yoktur. Nanotüplerin çapları 2-20 nm arasında değişir. Bu yöntemde çok miktarda (gram mertebelerinde) malzeme daha kolay ve ucuz olarak elde edilebilmektedir (Ebbesen vd., 1997).

Kimyasal buhar yöntemi ise elektrikli tüp şeklinde fırın içerisinde yapılır. Altlık olarak alüminyum plaka kullanılır 900°C sıcaklıktaki fırın içerisine önce argon gazı, sonra sırasıyla hidrokarbon gazı (asetilen, metan, benzin vb.) ve hidrojen gazı uygun akış hızlarında pompalanır. Yüksek basınç altında fırın ısıtılır, böylece fırın içerisinde pirolitik reaksiyon gerçekleştirilerek KNT'ler altlık üzerinde oluşur. Bu yöntemler arasında kıyaslama yapıldığında birbirlerine göre çeşitli avantaj ve dezavantajlara sahiptirler. Elektrik ark boşalması yönteminde çeşitli çapta KNT'ler sentezlenmesine karşılık saflaştırılma işlemi gerektirmektedir. Diğer taraftan lazer buharlaştırma yöntemi, yüksek verimli ve özellikle TDKNT'ler ve küçük çaplı KNT'ler için daha etkili bir yöntem olmasına rağmen bu yöntemle büyük miktarda üretimler yapılamamaktadır. Öte yandan kimyasal buharlaştırma yöntemi daha kolay bir sentez yöntemi olmasına rağmen sentezlenen KNT'lerin kalitesi daha düşüktür. Literatürde daha farklı yöntemlere rastlamak mümkündür. Yeni geliştirilen bir CVD ekliğiyle hidrojen sülfid gazı ortamında boyu 20 cm'yi bulan nano kablolar üretmek mümkün olmaktadır (Popov, 2004).

1.2 Karbon Nanotüplerin Özellikleri ve Uygulama Alanları

Karbon nanotüpler, çok basit olarak tek grafit atom katmanının adeta uygun çapta bir silindir üzerine sarılmış durumu olarak tanımlanabilir. Nanometre mertebelerinde çeşitli çaplarda ve değişik sarmal açılarda elde edilebilen bu yapay yapı son derece ilginç özellikler sergilemektedir. Radyal yönde kolayca esneyebilirken eksen yönünde çelikten defalarca daha yüksek bir mukavemete sahip olabilmektedir. Daha da önemlisi tüp yarıçapına, atom tabakasının sarmal açısına göre çok değişik elektronik özellikler göstermektedir. Belli sarmal açılarda metal gibi davranıp yüksek bir iletkenlik gösterirken, başka sarmal açılarda yarıiletken olabilmektedir. Üstelik bu yarıiletkenin yasak bant aralığı tüpün çapına bağlı olarak değişebilmektedir. Malzemenin yabancı atomlarla etkileşmesinde gösterdiği olağanüstü davranışlar, üzeri geçiş elementleri ile kaplandığında sahip olacağı manyetik özellikler, başka malzemelerden elde edilemeyen çok sayıda özelliği ve değişik seçenekleri teknolojinin kullanımına sunmaktadır. Karbon Nanotüplerin ağırlıklarının çok hafif olması, yüksek elastik modulünü ve gözüken en dayanıklı fiber olma ihtimalleri önemli özelliklerindendir. Karbon nanotüpün belli metal yüzeyleri ile yaptığı temas sonucu oluşturduğu gerilim farkına dayanarak fizikçiler transistor yapmayı başardılar. Yine karbon nanotüpün ucunda oluşan çok yüksek bir elektrik alanı kullanarak milimetre boyutunda adeta elbiselerin yakasına takılıp küçük pillerle çalışabilen gaz sensorları yapıldı. Bilinen gaz sensorlarının büyük boyutları ve kullandıkları 300 Volt gerilim sağlayan enerji kaynakları dikkate alındığında nanoteknolojinin bizlere ne kadar önemli yararlar sunacağı görülmektedir. Yalıtkan bir karbon nanotüp titanyum atomları ile kaplandığında hem çok iyi bir iletken olmakta, hem de mıknatıslık özelliğini kazanabilmektedir. Belirli çaplarda ve iletkenlikte kontrollü bir şekilde yapılabilen iletken nanoteller ileride yapılması tasarlanan birkaç nanometre büyüklüğündeki moleküler elektronik aygıtın devrelerini tamamlamakta kullanılabilecektir. Son yapılan çalışmalar titanyum ile kaplanan KNT'ler hidrojen depolanmasında dünyanın en verimli yakıt deposun oluşturacağını gösteriyor.

2 KARBON NANOTÜPLERİN YAPISAL ve FİZİKSEL NİTELİKLERİ

2.1 Karbon Nanotüpler

Karbon nanotüp, grafitin bal peteğini andıran atom düzleminin bir silindir üzerine hiçbir kusur oluşturmadan kesiksiz olarak sarılmış şeklidir.

- 1991’de Sumio Iijima tarafından keşfedilmiştir,
- Tek duvarlı (SWCNT) ve çok duvarlı (MWCNT),
- Tek duvarlı bir karbon nanotüpü tek bir grafit tabakasının her iki kenarında fullerin uçları ile kendi etrafında döndürülmüş halidir,
- TD 0,4-20 nm çapında, 100 nm-10 mikro uzunluğunda,
- ÇD 4-30 nm çapında, en çok 1 mikro metre uzunluğunda,
- Çelikten yüz kat güçlü. Bir kurşun kalemin yarısı kadar genişliğe sahip bir karbon nanotüp 40.000 Kg’dan fazla yük taşıyabilir,
- Yüksek erime sıcaklığına sahip,
- İyi bir iletken veya yarı iletken özellikleri taşımaktadır.

Bir grafit tabakası uçlarından bükülerek silindirik bir şekle getirilirse elde edilecek olan yapı tek duvarlı karbon nanotüptür. Tek duvarlı karbon nanotüpler bir silindir şeklinde sarılan bir grafit tabaka olarak tanımlanır. Bu yapı eksenel simetriye sahip, olan bir boyutlu bir yapıdır ve bir sarmal yapı göstermesi chiralitesi olarak isimlendirilir (Saito vd., 1992).

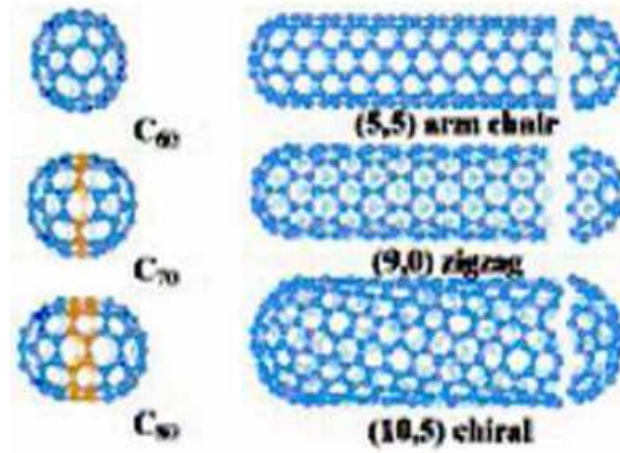
2.2 Karbon Nanotüplerin Oluşum Yöntemleri

Deneyssel olarak gözlenen nanotüplerin çok büyük kısmını çok duvarlı karbon nanotüpler oluşturmaktadır, ancak bize gerekli olan kısmı tek duvarlı nanotüpler. Tipik bir tek duvarlı karbon nanotüplerin çoğu 2nm’den küçük çaplara sahip olmalarına rağmen tek duvarlı karbon nanotüp 0,7-10,0 nm civarında bir çapa sahip silindir şeklinde grafit tabaka olarak tanımlanır.

Karbon nanotüpleri bir boyutlu olarak göz önüne alabiliriz. Bir görüşe göre (TDKNT) iki sınıfa ayrılırlar (Şekil 2.1)

- Achiral yapı: Karbon nanotüp kendi ayna yansıması orijinalinin yapısına özdeş olan bir karbon nanotüple tanımlanır. Altıgen örgünün TDKNT eksenine doğrultusundaki görüntüsüne göre,
- a) Armchair
 - b) Zigzag yapı olarak ikiye ayrılır

- Chiral yapı: Spiral simetriye sahiptir. Ayna görüntüsünün yapısı orijinal yapıya anti-simetriktir.



Şekil 2.1 Armchair KNT, Zigzag KNT, Chiral KNT

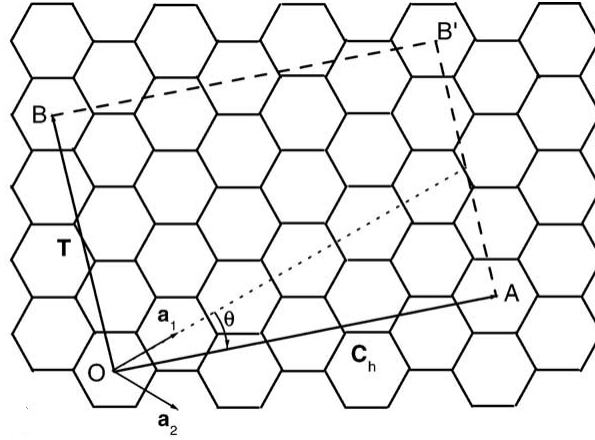
Nanotüpleri oluşturan temel altyapı 6 adet C atomundan meydana gelen, altıgen biçimli yapıdır (Şekil 2.1). Nanotüplerin uç kısımlarındaki yapı, tüpün türüne bağlı olarak değişir Şekil 2.1’de gösterildiği gibi yarım fullerine (C_{60}) benzer, her kapak 6 pentagon ve kapağı silindirik kısmı uygun hale getirecek miktarda heksagondan meydana gelir (Kürti vd., 2003).

2.3 Chiral vektörü ($\vec{C}_h$)

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerinin yapısal özellikleri, nanotüp eksenine dik doğrultuda yer alan Chiral vektörü ($\vec{C}_h$) ile belirlenmektedir. Şekil 2.2’de TDKNT’nin altıgen örgüsünün düzleme açılmış petek örgüsü gösterilmektedir, burada $\vec{OB}$ vektörü yönü nanotüp ekseninin yönüdür ve $\vec{OA}$ vektörü bir karbon nanotüpün $\vec{C}_h$ chiral vektörünü tanımlar. Buna göre şekilde verilen O noktası tam A noktasıyla; B noktası ise B' noktası ile çakışır O , A , B , B' noktalarını düşünelim, petek örgüyü katladığımızda O ve A noktaları ve B ve B' noktaları çakışır bu yöntemin üzerine kâğıttan örnek modelleri yapabiliriz. $\vec{C}_h$ chiral vektörü altıgen örgünün

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right) \text{ ve } \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right) \text{ gerçek uzay birim vektörleriyle ifade edilir.}$$

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



Şekil 2.2 TDKNT'lerin açılmış petek örgüsü (Saito vd., 1998)

Chiral vektörü $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n, m)$, ifadesi ile verilir. Görüldüğü gibi bu formülde $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ altıgen örgünün uzay birim vektörüdür. (n, m) ise tamsayı, $0 \leq |m| \leq n$ olmak üzere (n, m) sayılarına bağlı olarak altıgen örgülerin tüp eksenine doğrultusundaki yönelimini belirlemektedir. Bundan dolayı armchair nanotüpler $n = m$ yani $\vec{C}_h = (n, n)$ durumunda, Zig zag nanotüpler ise $\vec{C}_h = (n, 0)$ yani $n = m$ durumuna karşı gelirler. Petek örgünün altıgen simetrisinden dolayı chiral nanotüpler için yalnızca $0 < |m| < n$ koşulunu düşünürüz. Örgünün altıgen yapısı nedeniyle aralarındaki açı 60° olan $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleri kartezyan koordinatlar cinsinden birbiriyle ortogonal olmadığına dikkat edelim ve bunların iç çarpımları

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = a^2 \quad \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = \frac{a^2}{2} \quad (2.2)$$

bu şekilde verilir. Bu denklemden petek örgünün örgü sabiti (KNT yapıda karbon atomları arasındaki bağ uzunluğu) $a = 1,44 \text{ Å} \times \sqrt{3} = 2,49 \text{ Å}$ dır. Burada “a” örgü sabitidir.

$a = \left| \vec{a}_1 \right| = \left| \vec{a}_2 \right| = 1,44 \times \sqrt{3} = 2,49 \text{ Å}$ olarak bulunur. Bunlara göre KNT'nin çapı “ d_t ”, tüpün çevre uzunluğu “ L ” cinsinden verilir

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

Karbon nanotüplerinin çapı $d_t = \frac{L}{\pi}$ ile tanımlarız ve burada L karbon nanotüplerin çevresidir:

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

Olarak tanımlanır. Bu denklemin yardımıyla örnek olarak (10,10) KNT için çapı 13.56 Å olarak hesaplanır.

Chiral açısı θ , $\vec{C}_h$ ile $\vec{a}_1$ vektörleri arasındaki açıdır (Şekil 2.2). Altıgen simetriden dolayı

(n, m) tamsayı, $0 \leq |m| \leq n$ arasındaki değerleri alır. Bu açı altıgenlerin nanotüp eksenine göre yönelimini gösteren açıdır ve aşağıda gösterilmektedir.

$$\cos \theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{|\vec{C}_h| |\vec{a}_1|} = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (2.5)$$

ifadesi ile verilmektedir. Bunlara göre armchair KNT'ler için $\theta = 30^\circ$; Zigzag KNT'ler için $\theta = 0^\circ$ 'dir. Diğer açı değerleri ise chiral tüpleri göstermektedir.

Chiral açısı ve vektörü KNT'nin özelliklerini belirlemektedir. Mesela, (n, n) armchair KNT'ler metal; $(n, 0)$ zigzag KNT'ler ise n sayısı 3 sayısının tam katları olduğunda metalik, onun dışındaki durumlarda yarıiletken davranış göstermektedirler.

Çizelge 2.1 Karbon nanotüplerin sınıflandırılması (R Saito vd., 1998).

Yapı	$\theta^{a)}$	$C_h^{b)}$	Kesitin şekli	Simetri
Armchair	30°	(n, n)	cis	$D_n \otimes C_i$
Zigzag	0°	$(n, 0)$	trans	$D_n \otimes C_i$
Chiral	$0^\circ < \theta < 30^\circ$	(n, m)	İkisinin karışımı	$C_d \otimes C_N / d$

2.4 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$)

Öteleme vektörü $\vec{T}$, bir boyutlu birim hücrede tanımlanır ve nanotüp eksenine paralel, chiral vektörüne $\vec{C}_h$ 'ne diktir. Öteleme vektörü $\vec{T}$, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ taban vektörleriyle ifade edilir.

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \equiv (t_1 t_2), \quad (t_1 \text{ ve } t_2) \quad (2.6)$$

Öteleme vektörü $\vec{T}$, iki boyutlu grafit tabakanın ilk örgü noktasına karşı gelir ve Şekil 2.2' deki $\vec{OB}$ vektörüdür. Burada t_1 ve t_2 'nin birden başka ortak bölenleri yoktur. $\vec{T}$ Vektörünün bu özelliğini ifade ederek

$\vec{T} = 0$ bağıntısını kullanarak t_1 ve t_2 'yi elde ederiz.

$$t_1 = \frac{2m+n}{d_2}, \quad t_2 = -\frac{2n+m}{d_2} \quad (2.7)$$

Olarak bulunur. Burada $d_R(n, m)$ 'nin en büyük ortak bölenidir. Eğer (n, m) değeri $3d$ 'nin katı ise $dr = 3d$; eğer $n-m$ değeri $3d$ 'nin katı değil ise $dr = d$ alınır. Örneğin; $\vec{C}_h = (4,2)$ olan bir KNT için $d = EBOB(4,2) = 2$, ve $n-m = 4-2 = 2$ olur. “Ch” ve “ d ” ile aşağıdaki gibi ilişkilidir.

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

Şekil 2.2' de $\vec{C}_h = (4,2)$, $|d| = d_R = 2$ ve $\vec{T} = (4,-5)$ 'dir, buradan Öteleme vektörü $\vec{T}$ 'nin büyüklüğünü bulalım.

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

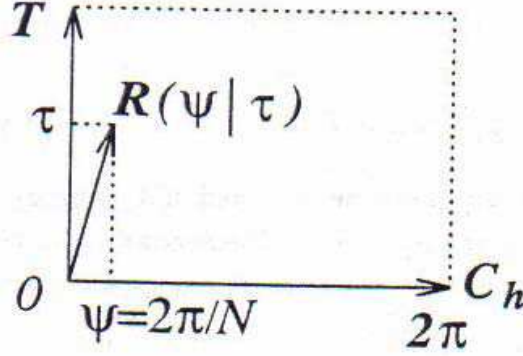
Bir boyutlu karbon nanotüplerin birim hücresi, iki boyutlu grafitin birim hücresini tanımlayan $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleriyle ifade edilen $\vec{T}$ ve $\vec{C}_h$ vektörleriyle tanımlanan Şekil 2.2'deki $OAB'B$ dikdörtgenidir. Nanotüp birim hücresinin alanı $|C_h \times T|$, bir altıgen alanı $|a_1 \times a_2|$ 'ye bölündüğünde altıgenlerin birim hücre başına “ N ” sayısını yazacağız

$$N = \frac{|C_h \times T|}{|a_1 \times a_2|} = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_R} = \frac{2L^2}{a^2 d_R} \quad (2.10)$$

ile verilir. Bir altıgen iki karbon atomu içerdiğinden karbon nanotüplerin her bir birim hücreinde $2N$ tane karbon atomu vardır.

2.5 Simetri Vektörü ($\vec{R}$)

Burada nanotüplerin uzay grup simetri operasyonu verilmiştir. $R=(\Psi, \tau)\Psi$ nanotüp eksenini etrafındaki dönmenin açısı yani τ, T vektörü doğrultusundaki geçiş noktası.



Şekil 2.3 Nanotüpün uzay grup simetri operasyonu (Dresselhaus vd.,1998).

Burada Ψ nanotüp eksenini etrafındaki dönmenin açısı. τ, T vektörü doğrultusundaki geçiş $i\vec{R}(i=1,...N)$ Vektörü ile, bir boyutlu nanotüp birim hücreinde karbon atom örgü noktası vektörlerini tanımlarız. $\vec{T}$ ve $\vec{C}_h$ ortogonal vektörleri $\vec{R}$ izdüşümleriyle ifade edilebilir. $\vec{R}$ simetri vektörü, $\vec{C}_h$ chiral vektörü yönünde en küçük bileşene sahip olan örgü noktası vektörü olarak tanımlanır ve $\vec{R}, \vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\vec{R} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 = \vec{(p, q)}, \quad (p \text{ ve } q \text{ tamsayı}) \quad (2.11)$$

Burada p, q 'nin bir haricinde ortak bileşenleri yoktur. $i=1$ 'iken en küçük örgü noktayı oluşturacak $\vec{R}$ için p ve q değerlerinin seçim koşulu:

$$t_1q - t_2p = 1, \quad (0 \leq mp - mq \leq N) \quad (2.12)$$

Eğer $\vec{T}$ simetri vektörünü tanımlayan t_1 ve t_2 'nin birden başka ortak böleni yoksa (2.13) denkleminde p ve q için çözüm tekdir.

$$0 \leq t_1 q - t_2 p \leq N \quad (2.14)$$

Nanotüp birim hücresinin N tane örgü noktası yerleşme vektörü $i \vec{R}, (i=1, \dots, N)$ 'yi elde etmek için her i için $i(t_1 q - t_2 p) = i$ ifadesini kullanacağız ve $i(t_1 q - t_2 p)$ 'nin en büyük " N " olduğuna dikkat ederiz. $i \vec{R}, (i=1, \dots, N)$ nanotüp birim hücresinde " N " farklı örgü noktası oluşturur. Fiziksel açıdan, $\vec{R}$ vektörü $\vec{T}$ doğrultusunda bir τ ötelemesi ile nanotüplerin temel uzay grup simetri işlemini gösterir ve $R = \langle \psi | \tau \rangle$ ile gösterilir. $\vec{R}$ vektörünün fiziksel önemi: $\vec{T}$ üzerine $R = \langle \psi | \tau \rangle$ 'nin izdüşümü karbon nanotüplerin bir boyutlu uzay grubunun temel simetri işleminin τ ötelemesini verirken, chiral vektör $\vec{C}_h$ üzerine R 'nin izdüşümü L/d_i ile ölçeklendirilen ψ açısıyla verilir (Saito vd., 1998).

Simetri işlemi $\langle \psi | \tau \rangle$, $(0,0)$ da bir atom üzerine etki ederek, (p, q) tamsayıları ile verilen koordinatı belirtir, $\langle \psi | \tau \rangle (0,0) = (p, q)$. Eğer $\langle \psi | \tau \rangle$ nanotüp için bir simetri işlemi ise o zaman $\langle \psi | \tau \rangle^2, \langle \psi | \tau \rangle^3, \dots, \langle \psi | \tau \rangle^N$, C_N ile tanımlı bir ameliyen grubun bütün farklı simetri işlemleridir, burada $\langle \psi | \tau \rangle^N = E$ özdeşlik işlemidir.

dönme açısı ψ ve öteleme τ 'nin uzunluğu;

$$\tau = \frac{|\vec{R} \times \vec{T}|}{L} = \frac{(mp - nq)|a_1 \times a_2|}{L} = \frac{(mp - nq)T}{N} \quad (2.15)$$

$$\psi = \frac{|\vec{R} \times \vec{T}|}{L} \frac{2\pi}{L} = \frac{d_R(t_1 q - t_2 p)\sqrt{3a^2}}{2} = \frac{2\pi}{N} \quad (2.16)$$

Bu şekilde ifade edilir, simetri işlemi $\langle \psi | \tau \rangle^N$, gözüktüğü gibi örgü noktası O 'yu özdeş örgü noktayı C 'ye getiririz,

$$N \vec{R} = \vec{C}_h + M \vec{T} \quad (2.17)$$

$$M \equiv mp - nq \quad (2.18)$$

$\vec{C}_h = (4, 2)$ Chiral Karbon Nanotüpler için yapılan simetri vektörüdür. Burada M ve O noktasından $N \vec{R}$ noktasına ulaşmak için uygulanması gereken $\vec{T}$ vektörünün sayısını

tanımlayan bir tamsayıdır.

Çizelge 2.2 Çeşitli karbon nanotüpleri karakterize etme parametreleri. (Saito vd.,1998).

$\vec{C}_h$	d	d_r	$d_t(A)$	$\frac{ L }{a}$	$\vec{T}$	$\frac{ T }{a}$	N
(4,2)	2	2	4,15	$\sqrt{28}$	(4-5)	$\sqrt{21}$	28
(9,0)	9	9	7,05	9	(1-2)	$\sqrt{3}$	18
(7,4)	1	3	7,55	$\sqrt{93}$	(5-6)	$\sqrt{31}$	62
(10,10)	10	30	13,56	$\sqrt{300}$	(1-1)	1	$2n$
(n,n)	n	$3n$	$\frac{\sqrt{3na}}{\pi}$	$\sqrt{3n}$	(1-1)	1	$2n$
$(n,0)$	n	N	$\frac{na}{\pi}$	n	(1-2)	$\sqrt{3}$	$2n$

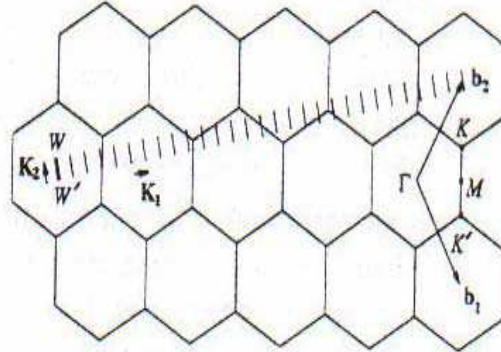
Çizelge 2.2’de (n,m) ’yi sağlayan karbon nanotüplerin karakteristik parametreleri listemizde gösterilmiş durumdadır. Çizelgede gösterildiği gibi parametrelerin atlandırılması: $\vec{C}_h$ chail vektörü, “ L ” ise chiral vektörünün çevresi, “ T ” ise bir boyutlu örgünün dönüşüm mesafesi, (noktası) “ N ” bir boyutlu nanotüplerin birim hücresi başına altıgen sayısı, “ $\vec{R}$ ” simetri vektörü ve son olarak “ M ” tamsayıdır.

2.6 Brilluoin Bölgeleri

“ N ” bir adet birim hücre içindeki altıgen sayısı olmak üzere, karbon atomu sayısının $2N$ olduğu daha önce açıklanmıştı. Brilluoin bölgesi KNT’lerin gerçek uzay birim hücresi $\vec{T}$ ile $\vec{C}_h$ vektörlerinin oluşturduğu bölgedir. Uzayda bir karbon nanotüp için birim hücre Şekil 2.2’de gösterildiği gibi Chiral vektör $\vec{C}_h$ ve Öteleme vektörü $\vec{T}$ ile oluşturulmuş $OAB'B$ dik dörtgeniyle verilir. Birim hücrede $2N$ tane karbon atomu olduğundan “ N ” tane “ π ”bağı ve “ N ” tane anti bağı “ π^* ” elektronik enerji bandı bulunur. Benzer şekilde, fonon dispersiyon bağıntısı, birim hücre içerisindeki her bir atomun vektörel yerleşiminin sonucu olarak $6N$ dallanma içerir. Nanotüp eksenı boyunca olan ters örgü vektörü $\vec{K}_2$ ve çembersel yöndeki ters vektörü $\vec{K}_1$ N’in ifadeleri $\vec{R}_i \vec{K}_j = 2\pi\delta_{ij}$ bağıntısından elde edilir, burada $\vec{R}_i$ gerçek uzayda örgü vektörü ve $\vec{K}_1$ ters uzayda örgü vektörüdür.

$$\vec{K}_1 = \frac{1}{N} \left(-t_2 \vec{b}_1 + t_2 \vec{b}_2 \right), \vec{K}_2 = \frac{1}{N} \left(m \vec{b}_1 - n \vec{b}_2 \right), \quad (2.19)$$

Buradaki $\vec{b}_1 \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right)$, ve $\vec{b}_2 \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right)$ vektörleri iki boyutlu grafitin ters örgü vektörleridir.



Şekil 2.4 Brilluoin Bölgesi (Dresselhaus, 1998).

Şekil 2.4’de gösterilmiş olan $\vec{C}_h=(4,2)$ chiral vektör için ters örgü vektörlerini görürüz. Bu bir boyutlu materyalin birincisi. $N \vec{K}_1=(-\vec{t}_1 \vec{b}_1 + \vec{t}_2 \vec{t}_2)$ iki boyutlu grafitin ters örgü vektörüne karşı geldiğinden $N \vec{K}_1$ kadar fark eden iki dalga vektörü özdeştir. t_1 ve t_2 ’ nin birden başka ortak böleni olmadığından $(N-1)$ tane $\mu \vec{K}_1 (\mu=1, \dots, N-1)$ vektörlerinden hiçbiri iki boyutlu grafitin ters örgü vektörü değildir. Bu nedenle $(\mu=0, \dots, N-1)N$ tane vektör, $\vec{C}_h$ üzerindeki periyodik sınır koşulları ile ilişkili kuvantize edilmiş dalga vektörlerinden kaynaklanan “ N ” tane $\vec{k}$ vektöründen ortaya çıkar. Şekil 2.4’de bu $\vec{k}$ vektörleri $N=28$ ve 30 paralel çizgi parçasıyla gösterilmiştir. Paralel doğruların hepsinin uzunluğu bir boyutlu birinci Brilluoin bölgesinin uzunluğu olan $\frac{2\pi}{T}$, dir. k ’nın “ N ” tane farklı değeri için “ N ” tane bir boyutlu enerji bandı meydana gelir. “ T ” simetri ötelemelerinden dolayı sonsuz uzunlukta bir karbon nanotüp için $\vec{K}_2$ yönünde sürekli dalga vektörlerini alırız Ancak L_i sonlu uzunluklu bir karbon nanotüp için dalga vektörleri arasındaki aralık $\frac{2\pi}{L_i}$, dir. Dalga vektörleri arasındaki bu aralık deneysel olarak gözlemlenmiştir.

Çizelge 2.3 KNT'ler için Parametreler (Saito.,1998).

Sembol	İsim	Formül	Değer
$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 $	Baz vektör büyüklüğü	$a = \sqrt{3a_{c-c}} = 2,49A^0$	$a_{c-c} = 1,49A^0$
$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	Gerçek uzay baz vektörü	$\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)a, \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)a$	x, y koordinatı
$\vec{b}_1, \vec{b}_2$	Ters örgü baz vektörü	$\left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right)\frac{2\pi}{a}, \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1\right)\frac{2\pi}{a}$	x, y koordinatı
$\vec{C}_h$	Chiral vektör	$\vec{C}_h = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2 \equiv (n, m)$	$0 \leq m \leq n$
L	KNT'nin çevre uzunluğu	$L = \left \vec{C}_h\right = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$	
d_t	Çap	$d_t = \frac{L}{\pi}$	
θ	Chiral açısı	$\sin \theta = \frac{\sqrt{3m}}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}$ $\cos \theta = \frac{\sqrt{2n+m}}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}$	$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{6}$ $\tan \theta = \frac{\sqrt{3m}}{2n+m}$
d	E bob (n, m)		
d_r	E bob ($2m+n, 2n+m$)	Eğer (n, m) $3d$ 'nin katı ise $d_r = 3d$ Eğer (n, m) $3d$ 'nin katı değil ise $d_r = d$	
$\vec{T}$	Öteleme vektörü	$T = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \equiv (t_1, t_2)$	E bob (t_1, t_2)=1
$ \vec{T} $	Öteleme vektörünün büyüklüğü	$t = \vec{T} = \frac{\sqrt{3}L}{d_r}$	
N	Birim hücre içindeki hegzaon sayısı	$N = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r}$	

3 KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

3.1 TDKNT'lerin Elektronik Yapısı

KNT'lerin yapısal özellikleri ile elektronik özellikleri arasındaki karşılıklı etkileşim yeni fiziksel fenomenlerin ortaya çıkmasına ve nano ölçekli cihaz uygulamalarına olanak sağlar. Karbon nanotüplerin elektronik yapısı karbon atomlarının π -elektronları için uygulanan Sıkı-Bağ hesaplamalarından elde edilir. Simülasyonda kullandığımız Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik (SBMD) yöntemi, sistemin elektronik yapısını sıkı bağ hamiltoniyeni ile hesaplara katar. Nanomalzeme biliminin gelişmesiyle önemli yer alan elektronik yapının Sıkı Bağ (SB) teorisi ile hesaplanmasının ilk olarak Slater ve Koster (1954) yılında keşfetmiştir ve ondan bu yana kullanılıp gelmektedir. Teorik hesaplamaların sonucuna göre KNT'lerin elektronik özellikleri geometrik yapılarına bağlı olarak değişmektedir. Nanotüpler yapılarındaki değişikliğe (chirality) bağlı olarak metalik ya da yarı iletken özellik gösterebilmektedir ayrıca elastik/plastik yapı deformasyonları ile elektronik özellikleri değiştirilebilmektedir. Bu özellikleri ile Karbon Nanotüpler yüksek bir teknolojik potansiyele sahiptirler. Buna göre (n,n) armchair tüpler simetrilerinden dolayı eğriliklerinden bağımsız olarak daima metalik, (n,m) tüpler j sıfırdan farklı bir tam sayı olmak üzere, $n - m = 3j$ ise küçük enerji aralıklı yarıiletken, eğer $n - m = 3j \pm 1$ ise geniş enerji aralıklı $d_t \approx 0,7$ nm için $\approx 1,0$ eV) yarıiletkenidir. Tüp çapı d_t arttıkça geniş enerji bandı aralığı ($1/d_t$ ye bağlı olarak, küçük enerji bandı aralığı $1/d_t^2$ ye bağlı olarak azalır. Deneysel olarak en çok gözlenen KNT' ler için eğrilik etkisiyle ortaya çıkan enerji bandı aralığı çok küçüktür. Daha çok pratik amaçlar için, oda sıcaklığında ısısal enerjileri elektronu balans bandından, iletim bandına uyarmak için yeterli olan tüm $n - m = 3j$ olan küçük enerji aralıklı yarıiletken tüpler metalik olarak göz önüne alınabilir. Bu Sıkı Bağ yaklaşımı üzerine kurulu olup büyük çaplı tüpler $d_t \geq 1$ nm için geçerli olur ve deneysel olarak da kanıtlanmıştır (Takeda vd.,2002). KNT'ler geometrik yapılarına bağlı olarak metalik veya yarıiletken olabildiklerinden dolayı metal-yarıiletken, yarıiletken-yarıiletken veya metal-metal kavşakların oluşturulmasında kullanılabilirler. Bu kavşaklar nano boyutlarda olduklarından ve tek bir kimyasal elementten oluştuklarından dolayı uygulamalarda büyük bir potansiyele sahiptirler. Ayrıca yarıiletken ve metalik nanotüpler arasındaki kavşaklar diyot gibi davranmaktadır. Bu tür diyot yapıya örnek; sıkı bağ yaklaşımında 1,2 eV enerji aralığına sahip olan $(8,0)$ yarıiletken ve $(7,1)$ metalik tüp kavşağıdır. Ayrıca iki kesişen nanotüp arasındaki kavşak, alternatif akımı doğru akıma çeviren doğrultucu gibi davranmaktadır. Yarıiletken nanotüp için enerji aralığı, çapıyla ters

orantılı olarak değişir ve tarama tunelleme mikroskopik ölçümleriyle doğrudan gözlemlenir (Dresselhaus vd., 1998). TDKNT'lerin en dikkat çekici özellikleri yapıldıkları 2-boyutlu yapılar olan “grafinin” elektronik yapısından kaynaklanır. Grafin, grafitin tek bir tabakası olarak düşünülebilir. TDKNT'lerin elektrik iletkenlikleri, Fermi enerjisi civarındaki elektronik doğasından kaynaklanır. Karbon nanotüpler iki boyutlu grafitin sarılması sonucu elde edilir. Bu yüzden karbon nanotüplerin elektronik yapısını ifade eden bir formülasyon yazmak için grafitin elektronik yapısından yararlanılır. Karbon nanotüplerin elektronik yapısı incelendiğinde Enerji Bant aralığı elde edilir ve buna bağlı olarak da Fermi enerji değerleri, eDOS grafikleri vb parametrelerin araştırıp öğrenebiliriz. Karbon nanotüplerin yarıiletken teknolojisinde kullanılmaya başlanması yarı iletken teknolojisinde çok büyük bir atılıma neden olabilecektir çünkü nanotüplerin çok ilginç elektronik özellikleri vardır. Tüpün geometrisine (çapına ve silindir yüzeyinin kıvrılma yönüne) bağlı olarak nanotüpler metal veya yarıiletkenlik özelliği gösterebilirler. Tüpün elektronik özellikleri, katkı maddesi olmaksızın yalnızca geometrik parametrelerle ayarlanabilir.

3.2 Enerji Dispersiyon Bağlıları

Tek duvarlı karbon nanotüplerde olduğu gibi herhangi bir sistemin bir ucundan diğer ucuna elektriğin ve sıcaklığın geçişi elektronların dağılım mekanizmasına bağlıdır. Elektronların saçılması yüksek sıcaklıkta geçişler için önemlidir. İki boyutlu karbon atomlarından oluşmuş bir petek örgüsü göz önüne alalım. Bu örgünün birim hücresinde özdeş olmayan iki karbon atomu vardır. Bu iki karbon atomunun s , 2_x , 2_y yörüngeselleri σ bağı oluşturur ve bu bağ da sp^2 konfigürasyonunda melezleşir. Geriye kalan $2p_z$ yörüngeselleri, grafit düzlemine diktir ve ‘ π ’ kovalent bağı yaparlar. Bu π -bağlarının oluşturduğu elektronik enerji bandı ile ilgileniyoruz. Bunun için bu yörüngeleri oluşturulan Bloch fonksiyonları ile sıkı bağ yaklaşıklığında enerji öz değerleri

$$E_{g1D}(\vec{k}) = \frac{\delta_{2p} \pm t\omega(\vec{k})}{1 \pm s\omega(\vec{k})} \quad (3.1)$$

Olarak bulunur. Burada pay ve paydadaki (+) işareti enerji bağının π -enerji bandını ve (-) işareti anti bağın π^* -enerji bandını gösterir. “ s ve t ” bant oluşumu ile ilgili üst üste binme integralleridir. Üst-üste binme integrali “ $s = 0$ ” olduğunda π ve π^* bantları $E = E_{2g}$ civarında simetriktir ve bu durumda enerji dispersiyon bağıntısı

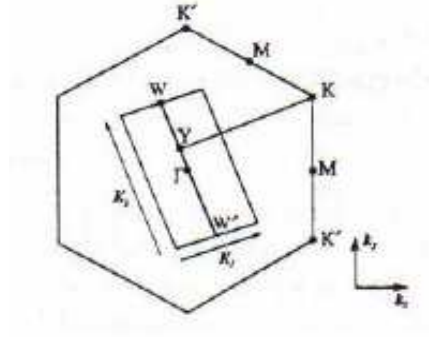
$$E_{g2D}(k_x, k_y) - \pm t \left\{ 1 + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2} \right) \cos \left(\frac{k_y a}{2} \right) + 4 \cos^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right\}^{1/2} \quad (3.2)$$

olur. Bir tek grafit levhası yarı metaldir, bunun anlamı sahip olduğu özellikleri yarıiletken ile metal arasında orta düzeyde olmasıdır (Şekil 3.1). Grafit levha yuvarlanarak nanotüp oluşturulduğunda; daire çevresinde yalnızca karbon atomları sıralanmaz, aynı zamanda elektronların kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları da uyumlu olarak düzenlenir. Radyal doğrultularda, elektronlar inceltilmiş tek katmanlı grafit düzlem tarafından sınırlanmıştır. Nanotübün daire çevresinde periyodik sınır şartları ortaya çıkmaktadır. Örneğin; eğer bir nanotüp daire çevresinde 10 hekzagon bulunduruyorsa, 11 hekzagonal 1 ile çakışmaktadır. Silindir etrafında 2π 'lik faz farkı ile karşılaşılır. Kuantum sınırlarından dolayı elektronlar sadece nanotüp eksen boyunca etkili olmaktadır, böylece dalga vektörleri de bu doğrultuda işaretlenir. Bu basit düşünce tek boyutlu bandın dağılım bağıntısını hesaplamakta kullanılır. Bu da çok iyi bilinen grafit levhası üzerinden, dalga vektörünü enerjiye bağlar. Noriaki Hamada ve meslektaşları ve daha sonra NEC Laboratuvarında küçük çaplı nanotüpler için dağılım bağıntısını hesaplamışlardır. Bu da gösteriyor ki küçük çaplı nanotüplerin 1/3'ü metalik, geri kalanı ise çaplarına ve chirality açılarına bağlı olarak yarıiletken özellikleri taşımaktadır. TDKNT'lerin elektriksel özellikleri 2 boyutlu yapılar olan grafitin elektronik yapısından kaynaklanır. $\vec{C}_h$ ile tanımlanan çevresel eksen üzerine uygulanan periyodik sınır koşulları uygulanması ile $\vec{C}_h$ doğrultusundaki dalga vektörleri kuantize olurlar. Enerji Bantları, iki boyutlu grafit kesitinin bir boyutlu enerji dağılım ilişkisinden oluşur WW' 'ne $\mu\kappa$ ($\mu = 0, 1, \dots, N-1$) uygulandığında κ_2 ve WW' çakışır. Bu durumda 1D enerji dağılım ilişkisi aşağıdaki gibi verilir.

$$E_\mu(k) = E_{g2D} \left(k \frac{\kappa_2}{|\kappa_2|} + \mu \kappa_1 \right), \left(\mu = 0, 1, \dots, N-1 \text{ ve } -\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T} \right) \quad (3.3)$$

Denklem (3.3)'de verilen “N” çift enerji dağılım eğrileri $\left(k \frac{\kappa_2}{|\kappa_2|} + \mu \kappa_1 \right)$ doğrultusunda yapılan kesilmelerde, iki boyutlu enerji dağılım yüzeyin kesitine karşılık gelir. Gerçekte, bir KNT'nin boyu sonlu olduğundan (L), aylık $\vec{k}$ dalga vektörleri beklenebilir.

$$\nabla k = \frac{2\pi}{L} \quad (3.4)$$

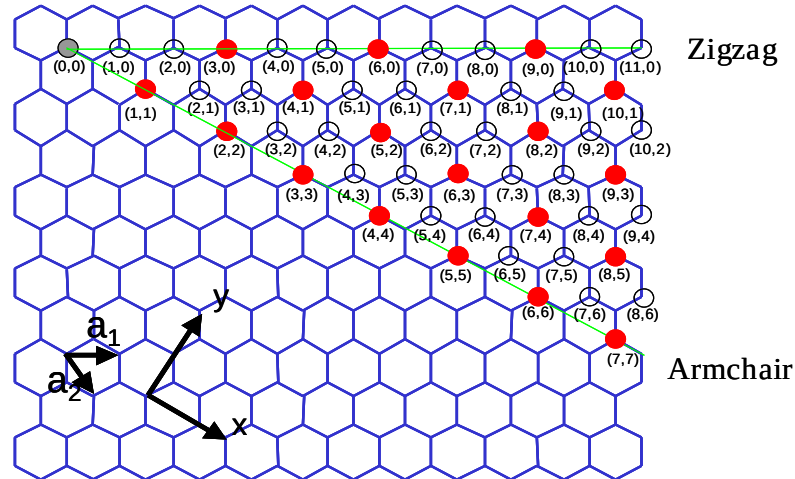


Şekil 3.1 Metalik enerji bantları (Dresselhaus, 1998).

Böylece enerji bantları, bir boyutlu enerji dispersiyon bağıntıları seti içerir. Metalik enerji bandı; $\vec{YK}$ vektörlerinin boyunun, $\vec{K}_1$ boyuna oranı tam sayı ise metalik enerji bandın taşımaktadır. WW' dan $\mu \vec{K}_1$ ile ayrılan çizgi segmentlerinde bulunan 2 boyutlu grafitin enerji dispersiyon bağıntıları $E_{g2D}(\vec{k})$, katlanır. Öyle ki $\vec{K}_2$ ye paralel dalga vektörleri, WW' çizgi segmentleri ile aynı yerde olurlar (Şekil 3.1). Böylece “ N ” tane (denklem 3.2) ile verilen TDKNT enerji dispersiyon bağıntılarına karşılık gelen 1 boyutlu enerji dispersiyon bağıntıları oluşur.

$$E_{\mu}(k) = E_{g2D}\left(k \frac{K_2}{|K_2|} + \mu K_1\right), \left(\mu = 0, 1, \dots, N-1 \text{ ve } -\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T}\right) \quad (3.5)$$

Bu bağıntı tek duvarlı karbon nanotüplerinin enerji dispersiyon bağıntısına karşılık gelir



Şekil 3.2 Yarıiletken ve metalik karbon nanotüplerin yapısı (Fujita vd., 1992)

Kesikler, $\left(k \vec{K}_2 / \left| \vec{K}_2 \right| \right) + \mu \vec{K}_1$ çizgilerinde oluştuğunda, “ N ” parça enerji dispersiyon eğrileri, 2 boyutlu grafit için 2 boyutlu enerji dispersiyon alanı kesitine denk olur. Eğer belirli bir (n, m) nanotüp için, kesikli çizgiler, 2 boyutlu grafitin π ve π^* enerji bantlarının simetri tarafından yozlaştırıldığı yerde, 2 boyutlu Brillouin bölgesinin “ K ” noktasına doğru ilerlerse 1 boyutlu enerji bantları, sıfır enerji yarıklarına sahip olurlar. Bu KNT’ler için Fermi düzeyi civarındaki durum yoğunluğu belirli bir değer alır ve böylece bu tüpler metaliktir. Eğer kesikli çizgiler “ K ” noktasına doğru ilerlemezlerse, KNT’ler balans ve iletkenlik bantları arasında belirli enerji yarıklarına sahip olurlar ve böylece yarıiletken davranış gösterirler (Dereli vd., 2003). Şekil 3.1’deki $Y \vec{K}$ vektörünün boyunun, $\vec{K}_1$ boyuna oranı tam sayı ise metalik enerji bandı elde edilmiş oluruz. Burada $Y \vec{K}$ vektörü

$$Y \vec{K} = \frac{2n+m}{3} \vec{K}_1 \quad (3.6)$$

bağıntısı ile verilir. (n, m) bir karbon nanotüp $(2n+m)$ veya $(n-m)$ olmak şartıyla metaliktir. (n, n) ile verilen armchair KNT’ler her zaman metaliktir. $(n, 0)$ ile verilen Zig zag KNT’ler yalnızca “ n ” değerinin 3 sayısının katı olduğu durumlarda metaliktir, diğer durumlardaki Zig zag KNT’ler yarı iletken davranış gösterirler. Şekil 3.2’de metalik olan karbon nanotüpleri kırmızı çemberler ve yarıiletken olan karbon nanotüpleri açık çemberlerle gösterilmiştir. Yaklaşık olarak karbon nanotüplerin üçte biri metalik ve üçte ikisi yarıiletkendir. Elektriksel özelliği hem yarıiletken hem metalik iletkenlerdir iletkenlik 1 milyar Amper/m² olabilir (Bakır=1 milyon Amper/m²). Sadece grafit levhası yarı metaldir. Bu da sahip olduğu özellikleri yarıiletken ile metal arasında orta düzeyde olmasıdır (Şekil 3.2). Grafit levha yuvarlanarak nanotüp oluşturduğunda; daire çevresine yalnızca karbon atomları sıralanmaz, aynı zamanda elektronların kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları da uyumlu olarak düzenlenir. Kuantum sınırlarından dolayı elektronlar sadece nanotüp eksenini boyunca etkili olmaktadır, böylece dalga vektörleri de bu doğrultuda işaretlenir. Bu basit düşünce tek boyutlu bandın dağılımı bağıntısını hesaplamakta kullanılır. Bu da çok iyi bilinen grafit levhası üzerinden, dalga vektörünü enerjiye bağlar. Bu da gösteriyor ki küçük çaplı nanotüplerin 1/3’ü metalik, geri kalanı ise çaplarına ve chiral açılara bağlı olarak yarıiletkendir. Genel olarak (n, m) bir karbon nanotüp $n-m=3$ olmak şartıyla metaliktir. Bütün “armchair” nanotüpler metaliktir. “Zigzag” nanotüplerin 1/3’ü de metaliktir.

3.3 Zigzag ve Armchair Nanotüplerin Enerji Dispersiyon Bağlıtları

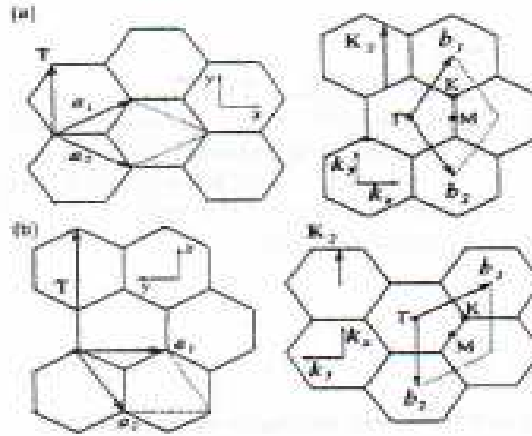
Enerji dispersiyonları için açık ifadeyi nanotüplerin yüksek simetriye sahip olduklarını düşünerek basit bir şekilde elde edebiliriz. (n, n) armchair nanotüplerin enerji öz değerlerini elde etmek için kullanılan uygun sınır koşulları dairesel yönlerde az sayıda $k_{x,q}$ dalga vektörleri ile tanımlanır.

$$n\sqrt{3k_{x,k}}a = 2\pi q, (q = 1, \dots, 2n) \quad (3.7)$$

Denklem (3.7)'de verilmiş olan $k_{x,q}$ nın kesikli ve izinli değerlerini $E_{g2D}(k_x, k_y)$ değerlerini 2D bağıntısının yerine yazarak chiral nanotüpler için enerji dispersiyon bağıntılarını $E_q^a(k)$ 'ları elde ederiz

$$E_q^a(k) = \pm t \left\{ 1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \right\}^{1/2}, (-\pi < ka < \pi, q = 1, \dots, 2n) \quad (3.8)$$

Burada ' a ', armchair nanotüp olduğunu gösteriyor ve $\vec{k}$, $\vec{K}_2 = \vec{b}_1 - \vec{b}_2/2$ vektörünün yönünde bir boyutlu bir vektördür $\vec{k}$ vektörünün yönü grafitin iki boyutlu Brillouin bölgesinin K ve Γ nokta vektörlerine karşı gelir.



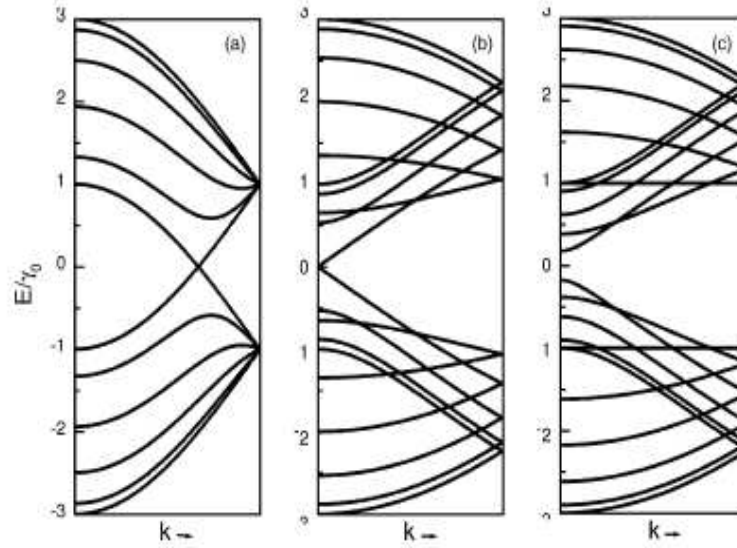
Şekil 3.3 a) Armchair, b) Zigzag nanotüplerin gerçel ve ters uzayda birim hücreleri

(5.5) armchair nanotüp için bir boyutlu dispersiyon bağıntıları E_q^a nın hesaplanmış sonuçları Şekil 3.3'de görülür, burada iletim bantları için altı tane dispersiyon bağıntısı ve balans bantları için altı tane dispersiyon bağıntısı vardır. Şekil 3.4'de " a " ile sınıflandırılanlar iki kat dejeneredir.

Armchair nanotüpler için enerji bantları bölge sınırları $ka = \pi$ de yüksek bir dejenerasyon

gösterir. Bu yüzden $E_{g2D}(k_x, k_y)$ 'de iki boyutlu grafit tabakası için bölge katlanmaları ve n 'den bağımsız olarak aşağıdaki formüle sahip olur.

$$E_{g2D}(k_{x,q}, \pi/a) = \pm t \quad (3.9)$$



Şekil 3.4 Enerji dispersiyon bağıntıları

Gerçek uzay örgüsü için Şekil 3.3 a'da ki birim hücrede dört karbon atomu olmasına rağmen bir grafit tabakanın aynı alt örgüsü üzerinde iki karbon atomu simetrik olarak özdeşleştir ve bu nedenle Brillouin bölgesi sınırlarındaki enerji bantları dejenere olur. Chiral nanotüpler için balans ve iletim bantları $k = 0$ 'dan $k = \pi/a$ bölge sınırına olan mesafenin $2/3$ 'ü olan bir k noktasında çakışırlar. Bu çakışma Fermi enerjisinde meydana gelir ve $\pm k$ değerinde enerji bantları simetriktir. Bant çakışmalarında iletim ve balans bantları arasındaki dejenerasyon noktası nedeniyle (5,5) chiral nanotüpler sonlu sıcaklıkta metalik iletkenlik gösterecek olan bant aralığı sıfır olan bir yarıiletken şeklindedir; çünkü; iletim bandındaki taşıyıcıları uyarmak için yalnızca sonsuz küçük uyarmalara ihtiyaç duyulur. (Dresselhaus vd., 1998).

Benzer hesaplamalar şunu gösterir (n,n) karbon nanotüplerin hepsinin denklem (3.a)'ya analogi yaparak $(2n)$ balans, $(2n)$ iletim bandı olmak üzere $(4n)$ enerji alt bandı verir ve bu $(2n)$ bantların iki tanesi dejenere değil, $(n-1)$ tanesi çift kat dejeneredir. Şekil 3.4.a'daki u ve g sembolleri simetrik terslenme ile ilgili bu durumların çift ve tek davranışını gösterir, $\pm$ işaretler denklem (3.4)'deki işaretlere karşı gelir ve tam sayılar (1,2,3,...), bir diğeriyle sahip enerji bantlarını ayırmak için kullanılır.

Bütün armchair nanotüpler Fermi enerjisinde bantların çakıştığı $k = \pm 2\pi/3a$ 'da en yüksek

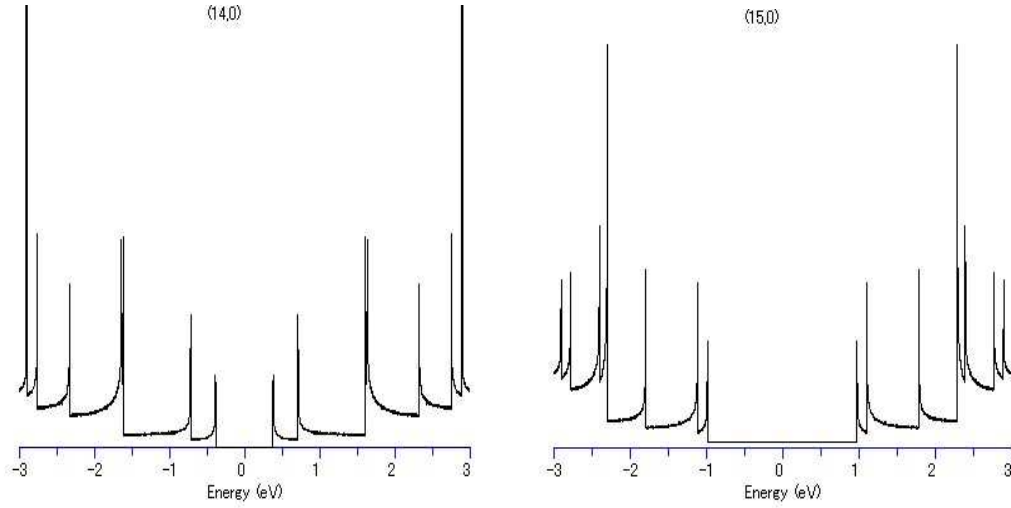
balans ve en düşük iletim bantları arasında bir bant dejenerasyonuna sahiptir, bu yüzden, bütün chiral nanotüplerin, iki boyutlu grafit tabakalarına benzer şekilde metalik iletim göstermesi beklenir $E_{g2D}(k_x k_y)$ denkleminde k_y üzerinden periyodik sınır koşulları

$$nk_{y,q}a = 2\pi q, (q = 1, \dots, 2n) \quad (3.10)$$

Kullanarak $C_h = (n,0)$ Zigzag nanotüpler için enerji bantları $E_q^{a(\cdot)}(k)$ ler elde edilir

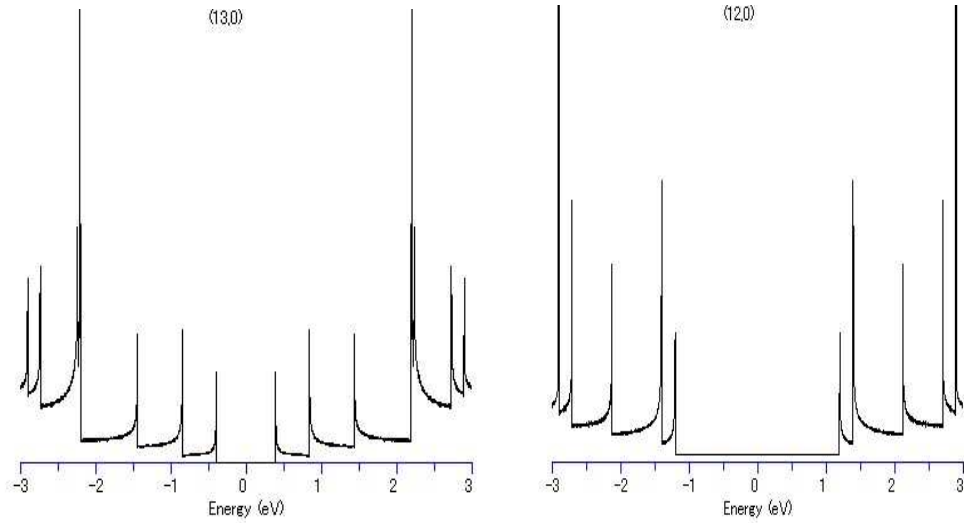
$$E_q^a(k) = \pm t \left\{ 1 \pm 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}ka}{2}\right) \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{q\pi}{n}\right) \right\}^{1/2}, \left(-\frac{\pi}{\sqrt{3}} < ka < \frac{\pi}{\sqrt{3}} \text{ ve } q = 1, \dots, 2n\right) \quad (3.11)$$

Bir enerji fonksiyonu olarak elektronik durumların yoğunluğu nanotüplerin birçok çeşidi için hesaplanmıştır. İlk başta (9,0) ve (10,0) Zigzag karbon nanotüpler için hesaplanmış bir boyutlu dispersiyon bağıntıları $E_q^a(k)$ ların sonuçları Şekil 3.4 b) ve Şekil 3.4.c)'de gösterilmektedir. (9,0) Zigzag karbon nanotüp için $k=0$ da enerji aralığı var iken (10,0) Zigzag karbon nanotüp için $k=0$ da enerji aralığı yoktur, genel olarak (n,0) Zigzag metalik yarı iletken KNT (12,0), (15,0) ve gerçek yarıiletken (13,0), (14,0) Şekil (3,5) ve (3,6) Zigzag karbon nanotüpler için hesaplanmış durum yoğunluklarını göz önünde bulunduralım (13,0) ve (14,0) yarıiletken Zigzag karbon nanotüpler için $k = 0$ 'da enerji aralığı yokken, (12,0) ve (15,0) Zigzag karbon nanotüpler için ise $k = 0$ da enerji aralığı vardır. Özellikle, (12,0) ve (15,0) Zigzag karbon nanotüplerde tekil bir durumlar yoğunluğu veren $E/t = \pm 1$ 'de bir dispersiyonsuz enerji bandı vardır. (12,0) ve (15,0). Zigzag karbon nanotüp için Konvansiyonel metaller düz bir durum yoğunluğuna sahip, bu nanotüpler her uç noktanın (zirve) tek bir kuantum alt bandına benzediği denk düştüğü bir takım tekillikler tuhaflıklarca şekillendirilir. Bu tuhaflıklar deneysel sonuçları yorumlarken önemlidir. Raman spektral ve spektroskopik tünel taramadan elde edilen ölçüler aşağıdaki gibidir.



Şekil 3.5 Zigzag TDKNT'lerin durum yoğunluğu (Saito vd, 1998).

Şekil 3.5'de sırası ile (14,0) (15,0) ve Şekil 3.6'da (13,0) (12,0) Zigzag yapıdaki karbon nanotüplerin durum yoğunluğu grafikleri gösterilmiştir. KNT'nin durum yoğunluğu karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu $E = 0$ konumuna getirilmiştir. Yarıiletken karbon nanotüpler için durum yoğunluğu sıfır değerlerine sahipken, metalik karbon nanotüpler için belirgin durum yoğunluğu değerleri vardır.



Şekil 3.6 Zigzag Karbon nanotüplerinin durum yoğunluğu (Saito vd, 1998).

4. MOLEKÜLER DİNAMİK SİMÜLASYON YÖNTEMİ

Moleküler Dinamik Simülasyon (MD) yöntemi, sistemdeki parçacıkların zamana bağlı davranışlarının incelenmesine izin vermesi nedeniyle önemli bir ayrıcalığa sahiptir. Moleküler Dinamik Simülasyon hesaplamalarından doğru sonuçların elde edilmesi ise atomlar arasındaki fiziksel etkileşmelerin gerçeğe uygun olarak modellenmesine bağlıdır. Bilgisayarın işlem yapabilme kapasiteleri ve hızlarındaki artış ile birlikte son yılları bilgisayar simülasyonu bilimsel çalışmalarda çok yoğun olarak kullanılmaktadır. Atomlar arası etkileşmeyi veren potansiyellerin metalleri de içerecek şekilde oluşturulması ve bunların yaygınlığı nedeniyle Moleküler Dinamik (MD) Simülasyonu sistemin termodinamik, yapısal ve dinamik özelliklerinin hesaplamasında yaygın olarak kullanılmaktadır deneysel çalışmaların yetersiz, çok zor ve pahalı olması bilim araştırmaları Moleküler Dinamik Simülasyon yöntemin kullanmaya sürükledi. Teorik ve deneysel gelişmelerin yanında, bilgisayar dünyasındaki gelişmeler, birçok araştırmacının bilgisayar ortamında simülasyonlarla yapılması yolunu açmış, bilgisayar simülasyonlarına dayalı hesaplama yöntemleri geliştirilmiştir. Ayrıca deney ile teorinin yeterli olmadığı durumlarda bilgisayar benzetiminden faydalanmak kaçınılmaz hale gelmiştir. Fizik alanında da atomlar arasındaki etkileşimleri modellemek için çok hassas kuantum mekaniksel hesaplama yöntemlerinden, daha basit yarı deneysel yöntemlere kadar birçok hesaplama yöntem geliştirilmiştir. Fiziksel bir sistemin, bilgisayar ortamında benzetimi onun küçük bir modelidir. MD simülasyonu atomik moleküler sistemlerin mikroskobik özelliklerini incelemeyi hedeflemektedir. Birçok simülasyonda $100 < N < 10000$ atomlu sistemlerin yapısal ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Bilgisayarların işlem yapabilme kapasiteleri ve hızlarındaki artış ile birlikte son yirmi-otuz yıl içerisinde bilgisayar simülasyonu bilimsel çalışmalarda çok yoğun olarak kullanılmaktadır. Atomlar arası etkileşmeyi veren potansiyellerin metalleri de içerecek şekilde oluşturulması ve bunların yaygınlığı nedeniyle moleküler dinamik (MD) simülasyonu metallerin ve alaşımların termodinamik, yapısal ve dinamik özelliklerinin hesaplanmasında yaygın olarak kullanılmaktadır. MD simülasyonu ile birçok geçiş metali ve bunların alaşımlarının yapısal özelliklerini inceleyen çok sayıda çalışma bulunmaktadır.

Karbon Nanotüplerinin simülasyonunda matris diyagonalleştirme veya dalga fonksiyonlarının ortogonalasyonu sonucunda elde edilen algoritmaların karmaşıklığı (complexity) N^3 gibidir (N atom sayısı olmak üzere). Bu bilgisayar kapasitesi açısından incelenen sistem büyüklüğünü kısıtlamaktadır. Algoritmaların karmaşıklığını Order N 'e indirmek karbon nanotüp simülasyonlarında hedeflenen çalışmalardır. Ayrıca “böl ve kullan” Order “ N ” algoritmaları paralel hesaplama için uygun algoritmalar. Algoritmaların karmaşıklığını Order N 'e indirmek

ve paralel alıřır duruma getirmek eldeki bilgisayar olanaklarını daha büyük sistemler için daha avantajlı bir şekilde kullanma olanağı sağlar (Dereli vd.,2002).

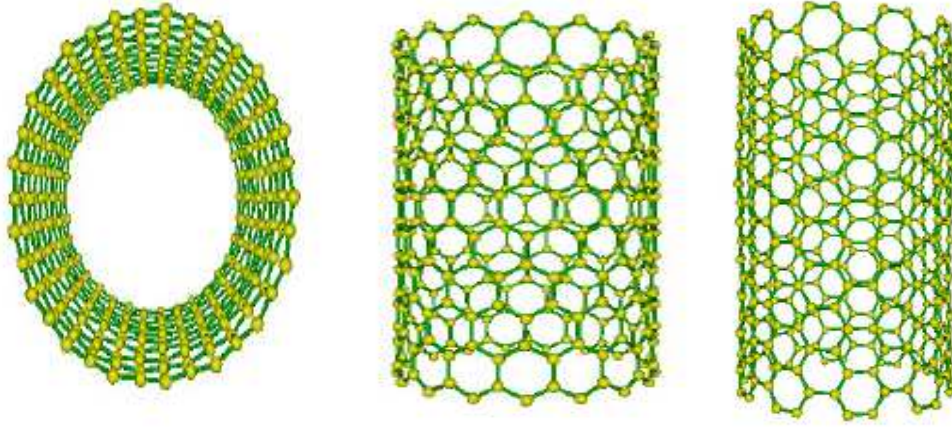
Moleküler Dinamik (MD) metodu, hareket denklemlerini özerek sistemin statik ve dinamik özelliklerini belirtir. MD metodun başlangı noktası, sistemin mikroskobik özelliklerinin Hamiltonien, Lagrangian veya doğrudan Newton hareket denklemlerinin kullanılması ile iyi belirlenmesidir. Sistem birkaç paracık veya ok paracık sistemi olabilir.

MD metodu, hareket denklemlerini bilgisayarda sayısal olarak özer. Bunun için uygun yaklaşımlar yapmak gereklidir. Sürekli deėişkenli diferansiyel denklemlerden, kesikli deėişkenli sonlu fark operatörlerine geişte belirli bir hata oluşur. Bu hatanın derecesi yapılan yaklaşıma baėlıdır (Verlet Algoritması). Fiziksel sistemlerin bilgisayar simülasyonlarında, küme ortalamaları zaman ortalamalarının yerini alır.

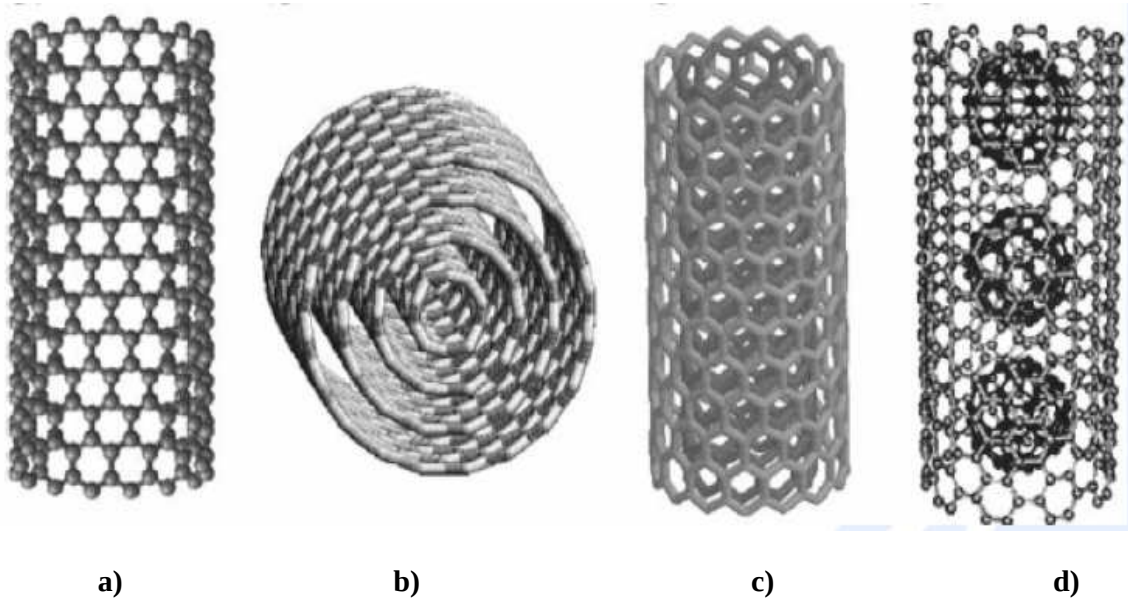
5. LABORATUVAR SONUÇLARI

Bu çalışmamızda “Karbon nanotüplerin elektronik yapısına sıcaklığın etkisi” hakkındaki bilgileri elde etmek için gerekli formalizasyonlar incelendi, O(N) Sıkı Bağ Moleküler Dinamik yöntemini kullanarak yarıiletken karbon nanotüpler (9x0 dan 21x0’ye kadar tüm Zigzag karbon nanotüpler) sıcaklık 0.1K’den 2100 K’e 0,000008eV ve 0,175 eV elektronik sıcaklıklarda elektronik yapılarının incelenmesi, Zigzag karbon nanotüplerin elektronik Durum yoğunluğu (eDOS), Enerji bant aralığı, Fermi enerji değerleri, Toplam Enerjisi, Fermi-Dirac Dağılım fonksiyonu, KNT’lerin yarıçap değerleri ve “Buffer Skin” büyüklüğü Yıldız Teknik Üniversitesi bilgisayar simülasyon laboratuvarında incelendi. Çalışmamızda Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından geliştirilen O(N) Sıkı Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon programını kullanarak “Velocity verlet” algoritmaları kanonik NVT ortamında çalıştırıldı. (G. Dereli, C. Özdoğan (2003) a), G. Dereli, C. Özdoğan (2003) b), C. Özdoğan, G. Dereli, T. Çağın (2002)) Simülasyon süresini belirleyen moleküler dinamik adım 1 fs olarak seçildi ve programda karbon nanotüplerin boyunu belirleyen sayı katmanı (nlayer) 20 olarak alındı. Moleküler Dinamik zaman 50 ve 3000 adımlarda çalıştırıldı. Tüpün atom başına düşen toplam enerjiye bakıldı. Sıkı-Bağ teorisi atomik ve elektronik yapı, toplam enerji, moleküler sistemler için atomlar arası kuvvetlerin hesaplanmasında en iyi yöntemlerden biridir. Sıkı-Bağ teorisi çalışma sırasında kuvantum mekaniksel etkileri en basit biçimde hesaplamakta fiziksel ve kimyasal bakımdan en iyi sonuçlar verir. Temel ilkeler simülasyonları ile model potansiyeller arasında hem sayısal hem de istenilen hassasiyet açısından bir köprü konumundadır. Ancak klasik Sıkı Bağ teorisi Schredinger denklemini hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle çözer. Bu da atom sayısı (N) ile kübik orantılı $O(N^3)$ (N^3 mertebeli) bir çözüm zamanı gerektirir. Diğer yandan O(N) (N mertebeli) metodu, sadece yerel bölgeyi bağa ve bağlanma enerjisi hesaplarına katan bir yaklaşım yapmaktadır ve simülasyon zamanı atom sayısına bağlı olarak doğrusal değişmektedir. Her alt sistem sonuçlarının toplamıyla bütün sistemin çözümü bulunmuş olur. Burada alt sistemlerin büyüklüğünü “Buffer Skin” parametresi belirler bu bölgenin boyutunu belirleyen “Buffer Skin” parametresinin küçük seçilmesi hatayı arttırırken, büyük seçilmesi ise simülasyon zamanını arttırmaktadır. O(N) ve $O(N^3)$ yöntemleri ile ayrı ayrı hesaplanan toplam enerji sonuçları arasındaki fark (hata) “Buffer Skin” parametrelerine göre incelenerek KNT için simülasyon zamanını en kısa değerde tutabilmek için hatanın en az olduğu ilk değerler alınarak “Buffer Skin” parametreleri belirlenmiştir. Sıcaklığın gerçek yarıiletken ve metalik yarıiletken karbon nanotüplerin fiziksel karakteristikleri, sıcaklık üzerindeki etkisi düşük sıcaklıklardan 0,1 K’den yüksek sıcaklıklara 2100K kadar incelenmiştir. Sıcaklığın sistem üzerindeki etkisi,

ısıtmaya dayalı olarak, her bir zaman adımı 1 fs olarak seçilip sistem 0.1 K de çalıştırılmaya başlatıldı, Bu şekilde program devam ederek sistemin sıcaklığı 300K aralıklarla arttırılarak program çalıştırılmıştır. Çalışma sırasında her tüp için belirli sıcaklıklar verilmiştir ve tüplerde sıcaklığın artmasıyla Fermi enerji seviyesine etkisinin yaklaşık 3.71112 (eV)'dan 3.63013 (eV)'a kadar bir azalma olduğu görülmüştür. Fermi Enerjisi gittikçe azalma durumun gösterdi. Böylece sıcaklık yükseldikçe atom başına toplam enerji $E_{(tot)}$ artarken sistemin daha yüksek enerjisinde dengeye ulaşması sağlanmıştır. Aşağıda vermiş olduğumuz Çizelge 5.2'den Çizelge 5.10 tablolarında açıkça gösterilmiştir. Fermi Enerjisinin bütün sıcaklıklar için aynı anda hesaplanarak grafiği çizilmiştir. Sıcaklık yükseldikçe Fermi Enerjisinin azalma (düşme) durumunda olduğu tespit edilmiştir. Ve her bir tüp için sıcaklıklar ayrı ayrı hesaplanıp grafikleri çizilmiştir. Aynı anda (11x0, 15x0 ve 17x0) tüpler için farklı sıcaklıklarda Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu hesaplanarak grafikleri çizilmiştir. Enerji bant aralığı her bir tüp için farklı farklı sıcaklıklarda sonuçları elde edilerek tablo haline getirilmiştir. Çizelge 5.10'dan Çizelge 5.18'e kadar ve son olarak eDOS grafiklerimiz çizildi. Şekil 5.10'dan Şekil 5.45.



Şekil 5.1 Metal ve Yarıiletken KNT' lerin YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ Karbon Nanotüp Simülasyon Laboratuvarında alınan görüntüleri.



Şekil 5.2 Üretilen Karbon Nanotüp formları; a) Tek katmanlı, b) Çok katmanlı, c) Çift katmanlı, d) Fullerin içeren tek katmanlı

Çizelge 5.1’de Zigzag KNT’lerin enerji farkının sıfır veya sıfıra yakın sayılan ‘‘Buffer skin’’ büyüklük parametreleri belirlenmiştir. Hesaplanmış olan ‘‘Buffer skin’’ büyüklük parametreleri N. Vardar ‘‘Farklı simetrik yapılardaki Karbon Nanotüplerin durum yoğunluklarının simülasyonu.’’ (2005) Yüksek Lisans tezinden alınmıştır. ‘‘Buffer skin’’ büyüklük parametreleri MD Simülasyon programında, farklı yapılardaki KNT’ler için belirlenmiş olan adımlarla çalıştırıldı. Çalıştırılan her bir simülasyon adımı belirli bir zamana karşılık gelmektedir Δt (Ek 1). Alt sistemlerin büyüklüğünü ‘‘Buffer skin’’ parametresi belirler. $O(N)$ Sonuçlarının $O(N^3) - O(N)$ hata grafikleri oluşturulmuştur. Bu grafikler tüpün 1 MD simülasyon adımı için, $O(N^3)$ ortalama atom başına toplam enerji değerleri ile $O(N)$ atom başına toplam enerjilerinin farkı alınarak bulunmuştur. Bu farklılıklar sıfır yapan değerler seçilir. ‘‘Buffer skin’’ büyüklük parametresinin büyük seçilmesi simülasyon zamanını artırır küçük seçilmesi ise hatalı sonuçlara sürükler, Bu nedenle enerji farkını minimum yapan değerler ‘‘buffer skin’’ büyüklük parametresi olarak belirlenmiştir ve aşağıdaki Çizelge-5.1’de çalışılan bütün KNT’lerin ‘‘Buffer skin’’ büyüklüğünün parametreleri gösterilmiştir.

Çizelge 5.1 Zig zag KNT’ler için ‘‘Buffer Skin’’ Büyüklüğü (A^0) Değerleri.

$\vec{C}_h = (n, m)$	Atom sayısı	‘‘Buffer Skin’’(A^0)
(9,0)	180	4.6
(11,0)	220	4.5
(12,0)	240	4.5
(13,0)	260	4.6
(14,0)	280	4.5
(15,0)	300	4.8
(16,0)	320	4.6
(17,0)	340	4.6
(21,0)	420	4.8

KNT'lerin, Moleküler Dinamik (MD) adımına göre ortalamaları alınarak, denge durumunda atomların sahip olduğu toplam enerji değerleri bulunmuştur Çizelge 5.2'den Çizelge 5.11'e kadar. Hesaplamış olduğumuz tablo halindeki toplam enerjilerimiz ilk başta 50 adımlarda çalıştırıldı ve sonuçlar alındı, sonra adımları yükselterek 3000 adımla çalıştırıldı. KNT'lerde atom sayısını ' n, m ' değerleri ile KNT eksen doğrultusundaki katman sayısı (nlayer) belirlemektedir. Yapılan çalışmaların neticesinde, (E_g), Fermi enerji değerleri, farklı yapıdaki tüplerin, Enerji Bant aralığı, Elektronik durum yoğunlukları (eDOS) Moleküler Dinamik adımlara bağlı grafikleri elde edilmiştir ve çalışmaların neticesinde alınan grafikleri kullanılarak, farklı yapıdaki KNT'lerin elektronik durum yoğunluğu (eDOS) ile çaplarına (denklem 2.5) bağlı ilişkileri incelenerek literatürdeki yapılan çalışmalarla karşılaştırılmalı olarak değerlendirilmiştir. O (N) Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik yöntemi paralel ortamda çalıştırılarak farklı simetrik yapılarıdaki Tek duvarlı karbon nanotüpler için Fermi enerji değerleri (E_F) farklı sıcaklıklar için denenmiştir ve tablo haline getirilmiştir. (Çizelge 5.2).

Çizelge 5.2 Zigzag KNT'lerin 0.1K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (0,1 K) 50adım	E_F (0,1 K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7.88783	3,71282	3,714721	-8,18075
(11,0)	-7,89785	3,71106	3,711044	-8,22671
(12,0)	-7,89675	3,71223	3,715142	-8,24401
(13,0)	-7,90123	3,71635	3,706665	-8,25531
(14,0)	-7,91606	3,71172	3,712371	-8,26483
(15,0)	-7,94678	3,71032	3,709224	-8,27342
(16,0)	-7,92567	3,72245	3,72683	-8,27769
(17,0)	-7,95763	3,71345	3,72405	-8,27781
(21,0)	-7,97564	3,71677	3,71614	-8,27791

Çizelge 5.3 Zigzag KNT'lerin 300 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (300K) 50adım	E_F (300K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,89675	3,69798	3,709224	-8,22261
(11,0)	-7,89863	3,71781	3,701254	-8,23462
(12,0)	-7,89786	3,71051	3,709953	-8,24288
(13,0)	-7,90122	3,69461	3,705382	-8,25549
(14,0)	-7,91798	3,71499	3,709951	-8,27261
(15,0)	-7,95678	3,71399	3,710635	-8,27267
(16,0)	-7,92675	3,70799	3,709224	-8,27291
(17,0)	-7,95987	3,71198	3,714945	-8,28461
(21,0)	-7,98096	3,71344	3,71451	-8,26567

Çizelge 5.4 Zigzag KNT'lerin 600 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (600K) 50adım	E_F (600K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,91675	3,68172	3,698425	-8,19262
(11,0)	-7,91653	3,69655	3,694361	-8,22773
(12,0)	-7,93456	3,70694	3,700091	-8,24419
(13,0)	-7,94576	3,69832	3,704423	-8,25661
(14,0)	-7,95785	3,69881	3,701644	-8,26545
(15,0)	-7,98764	3,69292	3,694361	-8,27773
(16,0)	-7,97547	3,70752	3,707228	-8,27898
(17,0)	-7,98675	3,70618	3,705253	-8,28597
(21,0)	-7,99654	3,70202	3,712311	-8,29543

Çizelge 5.5 Zigzag KNT'lerin 900 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (900K) 50adım	E_F (900K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,93465	3,67318	3,69578	-8,19469
(11,0)	-7,92657	3,68472	3,68398	-8,22773
(12,0)	-7,94756	3,70548	3,68918	-8,25479
(13,0)	-7,95785	3,68669	3,69132	-8,25771
(14,0)	-7,96745	3,68761	3,68998	-8,26593
(15,0)	-7,98096	3,67984	3,68550	-8,27906
(16,0)	-7,98765	3,69322	3,68236	-8,27987
(17,0)	-7,99567	3,69122	3,69322	-8,28631
(21,0)	-8,01987	3,69516	3,70872	-8,29873

Çizelge 5.6 Zigzag KNT'lerin 1200 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (1200K) 50adım	E_F (1200K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,93562	3,65056	3,68257	-8,19592
(11,0)	-7,97541	3,67071	3,67218	-8,22988
(12,0)	-7,98721	3,69451	3,67501	-8,24532
(13,0)	-7,98931	3,66861	3,67985	-8,25811
(14,0)	-8,01795	3,67534	3,66539	-8,26959
(15,0)	-8,01865	3,66628	3,67680	-8,27708
(16,0)	-8,03245	3,67748	3,68234	-8,27546
(17,0)	-8,03147	3,67524	3,68020	-8,28652
(21,0)	-8,03431	3,67234	3,68973	-8,31768

Çizelge 5.7 Zigzag KNT'lerin 1500 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (1500K) 50adım	E_F (1500K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,93641	3,63338	3,64811	-8,20765
(11,0)	-7,97661	3,65524	3,65794	-8,23178
(12,0)	-7,98863	3,66952	3,66196	-8,25345
(13,0)	-7,98971	3,65968	3,66565	-8,25783
(14,0)	-8,01848	3,66756	3,66539	-8,26748
(15,0)	-8,01954	3,65517	3,66550	-8,27653
(16,0)	-8,03641	3,65873	3,66236	-8,28235
(17,0)	-8,04265	3,66524	3,66667	-8,29876
(21,0)	-8,05543	3,66931	3,66930	-8,32152

Çizelge 5.8 Zigzag KNT'lerin 1700 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri.

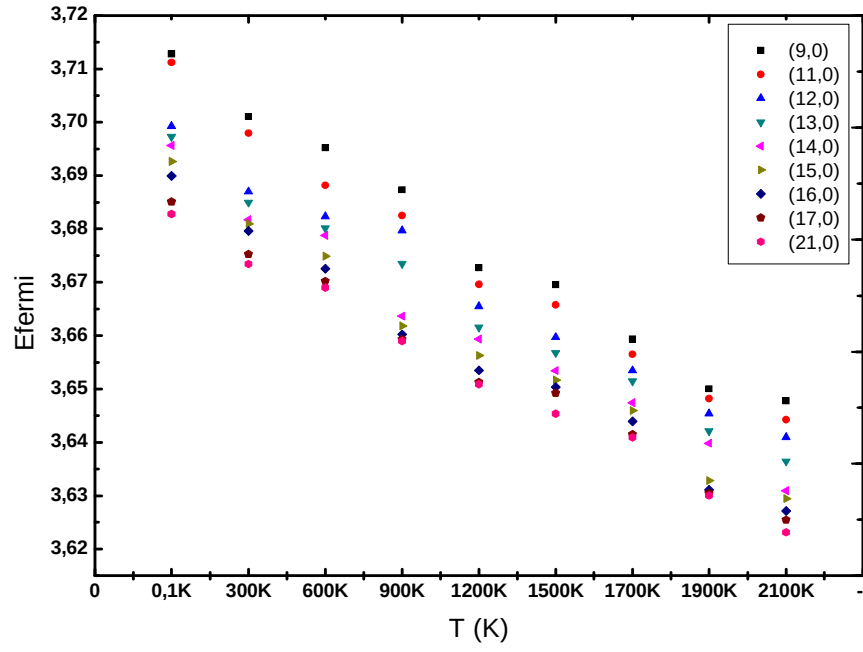
(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (1700K) 50adım	E_F (1700K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,93767	3,63706	3,64076	-8,20941
(11,0)	-7,97872	3,64440	3,64509	-8,23257
(12,0)	-7,97981	3,66302	3,65042	-8,25452
(13,0)	-7,98657	3,65725	3,65725	-8,25764
(14,0)	-8,01899	3,65054	3,65018	-8,27456
(15,0)	-8,01987	3,65781	3,65578	-8,28653
(16,0)	-8,02769	3,65194	3,64756	-8,29985
(17,0)	-8,04781	3,65546	3,65763	-8,31984
(21,0)	-8,06761	3,65096	3,66930	-8,32537

Çizelge 5.9 Zigzag KNT'lerin 1900 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri

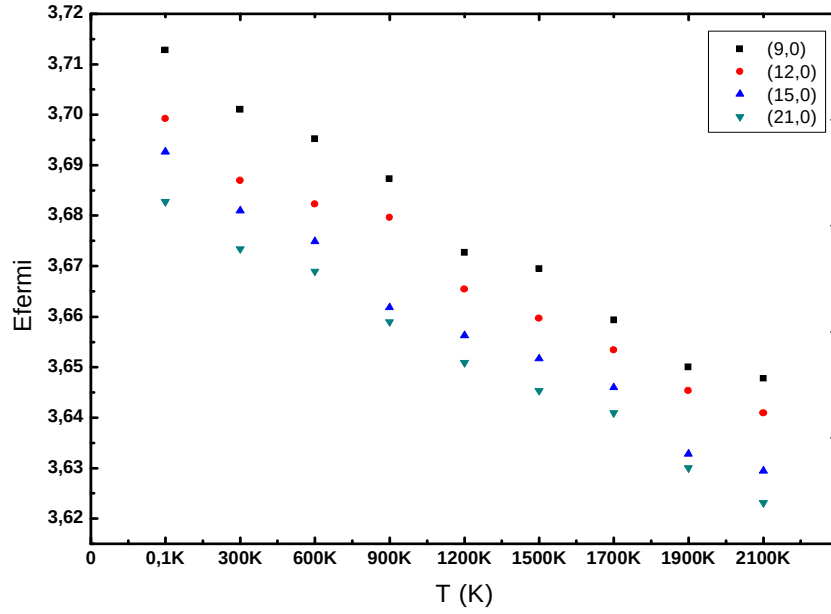
(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (1900K) 50adım	E_F (1900K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,93982	3,64232	3,63090	-8,21981
(11,0)	-7,97987	3,65156	3,61569	-8,23432
(12,0)	-7,97985	3,65176	3,62295	-8,24542
(13,0)	-7,98765	3,65195	3,62615	-8,25872
(14,0)	-8,01997	3,64784	3,64986	-8,27983
(15,0)	-8,02124	3,65182	3,64955	-8,28973
(16,0)	-8,02798	3,64808	3,64657	-8,29995
(17,0)	-8,03873	3,65348	3,64971	-8,31998
(21,0)	-8,06563	3,64613	3,63613	-8,32762

Çizelge 5.10 Zigzag KNT'lerin 2100 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji ve Toplam Enerji Değerleri

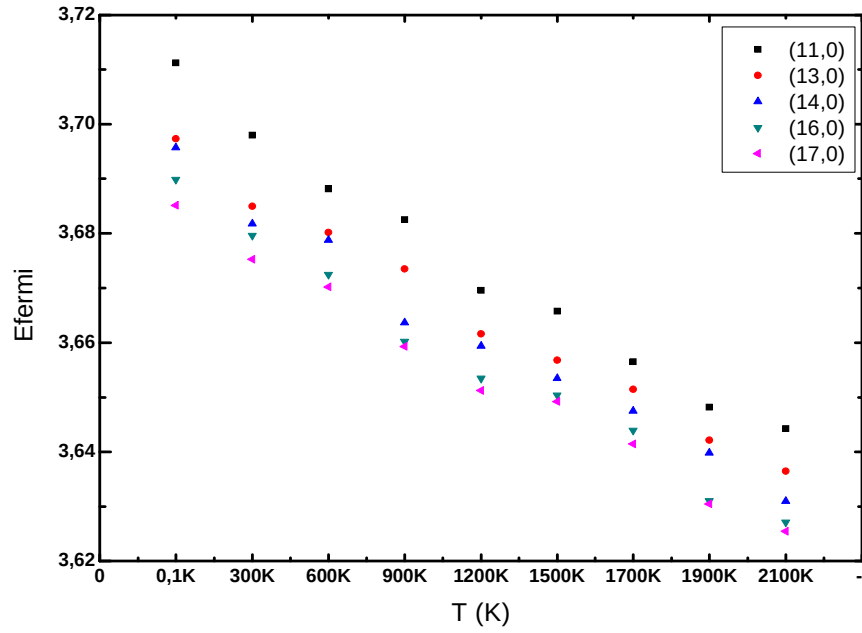
(n,m)	E toplam enerji 50adım	E_F (2100K) 50adım	E_F (2100K) 3000adım	E toplam enerji 3000adım
(9,0)	-7,95254	3,64978	3,63094	-8,22025
(11,0)	-7,97987	3,63261	3,62931	-8,23232
(12,0)	-7,97995	3,63996	3,63721	-8,25456
(13,0)	-7,98786	3,62264	3,63612	-8,26984
(14,0)	-8,01231	3,63394	3,63910	-8,27765
(15,0)	-8,01325	3,62344	3,63996	-8,28947
(16,0)	-8,02453	3,64187	3,63757	-8,29985
(17,0)	-8,03564	3,63946	3,64058	-8,32784
(21,0)	-8,06986	3,63013	3,63678	-8,33879



Şekil 5.3 Zigzag TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi



Şekil 5.4 Metalimsemi-yarıiletken Zigzag TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi



Şekil 5.5 Yarıiletken Zigzag TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimi

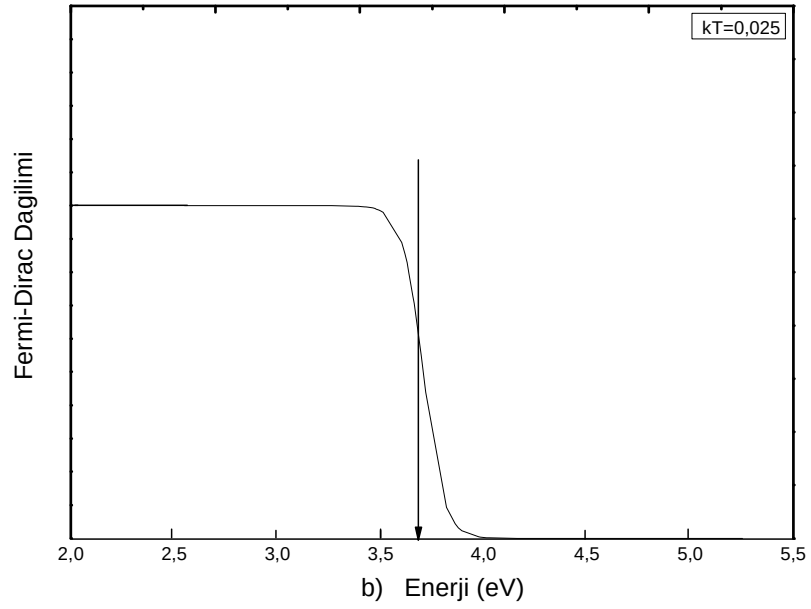
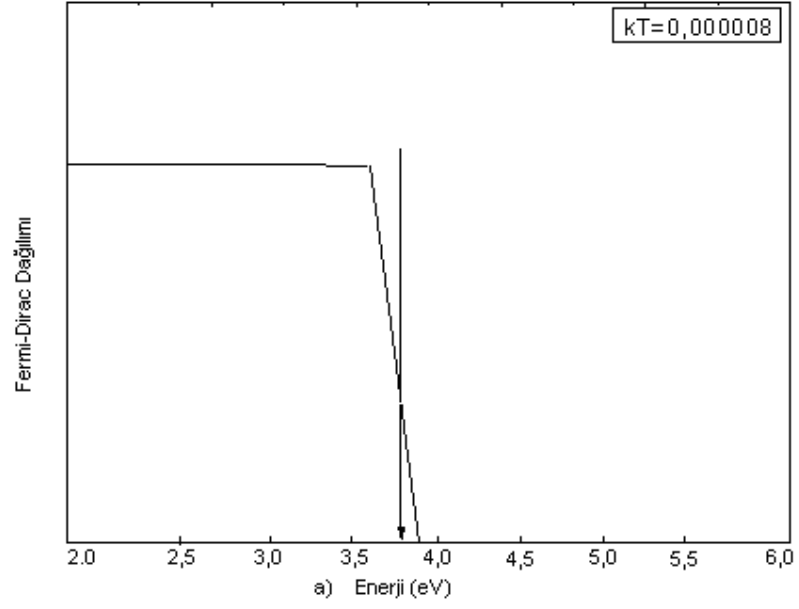
Tek duvarlı karbon nanotüpler için Fermi enerji değerleri (E_F) farklı sıcaklıklar için hesaplanarak (0.1 K, 300 K, 600 K, 900 K, 1200 K, 1500 K, 1700 K, 1900 K, ve 2100 K) sıcaklıklarda (9.0, 12.0, 15.0 ve 21.0) metalimsi-yarıiletken ve (11.0, 13.0, 14.0, 16.0 ve 17.0) Yarıiletken TDKNT'lerin Fermi Enerji Değerlerinin Sıcaklıkla değişimleri hesaplanarak grafikleri çizilmiştir. (Şekil 5.5, Şekil 5.6 ve Şekil 5.7). Çalışma sırasında her tüp için belirli sıcaklıklar verilmiştir ve tüplerde sıcaklığın artmasıyla Fermi enerji seviyesine etkisinin yaklaşık ilk değerimiz 3.71112 (eV)'dan 3.63013 (eV)'a kadar bir azalma olduğu görüldü, demek ki sıcaklık yükseldikçe Fermi enerjimiz azalmaktadır ve bu bize Fermi enerjisi civarında karbon nanotüplerin davranışını belirlememizi sağladı.

Isısal denge şartlarında, yarı-tam değerli spine sahip (fermiyon) olan ve Pauli ilkesine tabi olan parçacıklar Fermi-Dirac Dağılım fonksiyonuna uyarlar. Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu (5,1 denklem) belirli bir sıcaklıkta, belirli bir enerji durumunda (E) parçacığın bulunma olasılığını ifade etmektedir. Fermi fonksiyonunu mutlak sıfırda $T = 0$ göz önüne bulunduralım Elektronların enerjisi Fermi enerjisinden küçük $E \leq E_F$ veya Fermi enerjisinden büyük $E \geq E_F$ olduğunda, (5.1 denklem) Fermi fonksiyonu şu değerleri alır:

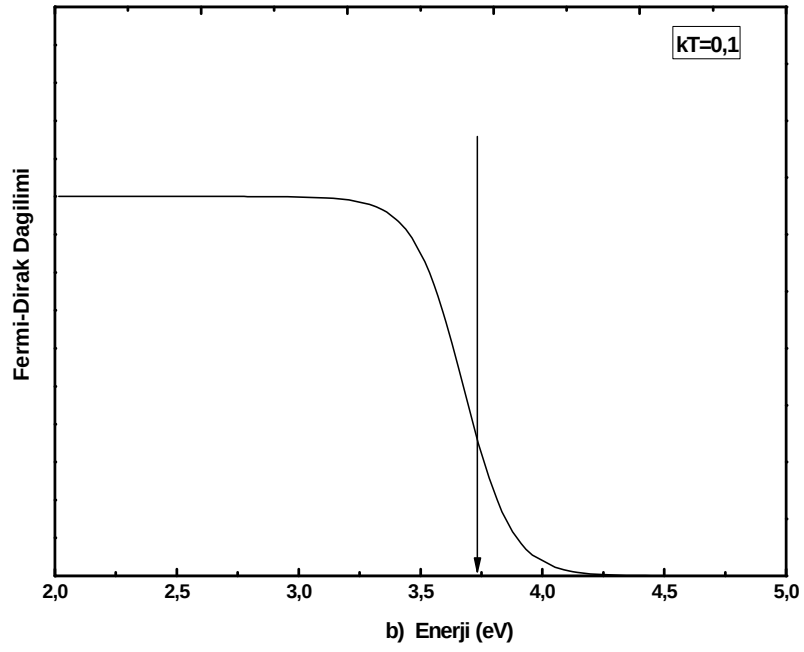
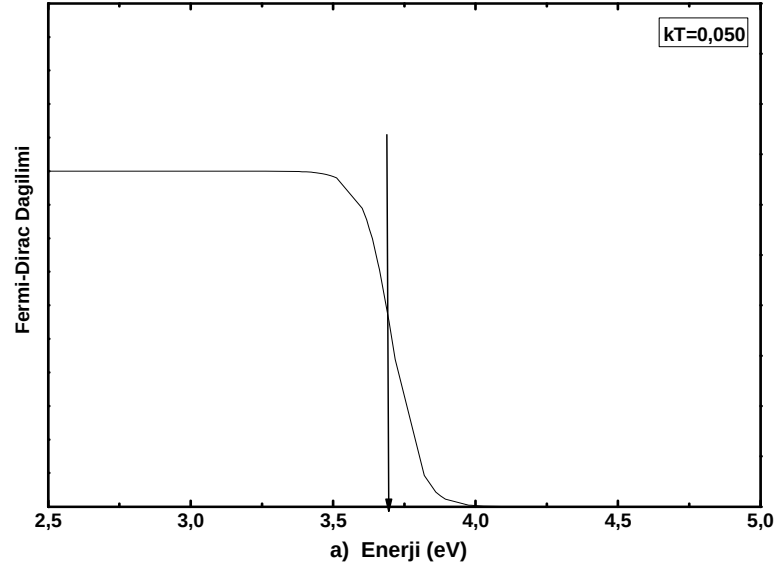
$F(E) = 1$, $E \leq E_F$ için ve $F(E) = 0$ durumu $E \geq E_F$ alır. Mutlak sıfırda Fermi enerjisinden daha küçük enerjili durumlar elektronlarla işgal olunmaktadır ($F(E) = 1$), ve Fermi enerjisinden daha büyük enerjili durumlar boşdur dolayısıyla, mutlak sıfırda elektronlar en küçük enerjili durumlarda yerleşmektedir. Bu dağılım, T sıcaklığı arttıkça (Şekil 5.8, Şekil 5.9, Şekil 5.10 ve Şekil 5.11) deki gibi değişir. Fiziksel olarak bu davranışı anlamak kolaydır. En dipteki elektronların, $k_B T$ kadar az bir enerjiyle geçebilecekleri üst durumlar tamamen dolu olduğu için Pauli ilkesine göre, buralara geçemezler. Boş durumlara geçebilmeleri için daha büyük enerjiler gerekir. Oysa Fermi düzeyine yakın durumlardaki fermiyonlar az bir enerji kazandıklarında, hemen üstlerindeki boş yerlere geçerler. Sıcaklık arttıkça daha alttaki düzeyler de boşalırlar. Farklı sıcaklıklar için bakacak olursak, sıcaklık arttıkça elektronlar daha yüksek enerjili durumlara geçebilir ve bu nedenle Fermi fonksiyonunun karakteri değişebilir. Bir sonraki grafiklerimizde (Şekil 5.8, Şekil 5.9, Şekil 5.10 ve Şekil 5.11) Enerjiye bağlı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonunun değişimi hesaplanarak grafikleri çizilmiştir.

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{(E - \mu)}{k_B T}\right) + 1} \quad (5.1)$$

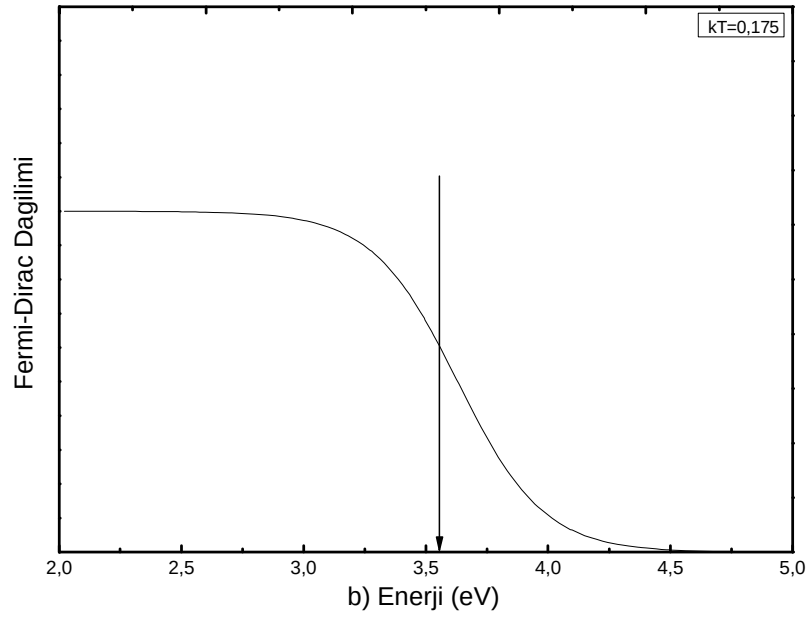
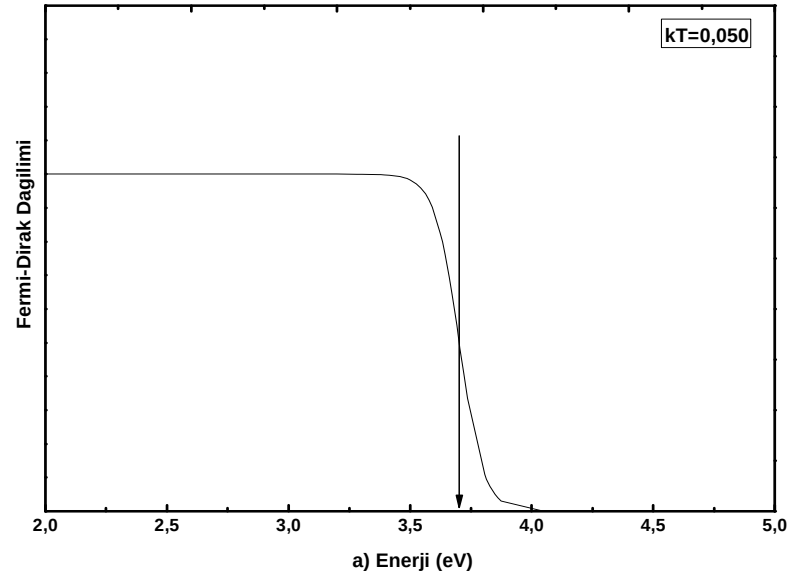
(5.1) ifadesi ile verilen fonksiyon, Fermi-Dirac Dağılım fonksiyonu olarak tanımlanır. Fermi-Dirac dağılımı, ısısal dengedeki ideal bir elektron gazında enerji “ ε ” olan bir yörüngenin dolu olma olasılığını verir. Verilen bir problemde “ μ ” nün seçimi, toplam elektron sayısını doğru (yani N) verecek şekilde yapılır. Mutlak sıfırda $\mu = \varepsilon_F$ olur, çünkü $T \rightarrow 0$ olurken $\varepsilon = \varepsilon_F = \mu$ değerinde $f(\varepsilon)$ fonksiyonu 1 (dolu) değerinden 0 (boş) değerine kesikli bir düşüş yapar. Tüm sıcaklıklarda, $\varepsilon = \mu$ olduğunda $f(\varepsilon) = \frac{1}{2}$ değeri alır, Burada “ ε_F ” Fermi enerjisi veya kimyasal potansiyel enerji “ k ” Bolsman sabiti ve “ T ” mutlak sıcaklık.



Sekil 5.6 (11x0) KNT'lerin a) 0,1K, b) 300K' de Enerjiye bağılı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonunun değişimi.



Sekil 5.7 (15x0) KNT'lerin a) 600 b)1200K' de Enerjiye bağı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonun değişimi.



Sekil 5.8 (17x0) KNT'lerin a) 600 b) 2100 K' de Enerjiye bağılı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonunun değişimi.

Dolu olan seviyeye tekabül eden enerji Fermi enerjisi E_F , olarak adlandırılır. Bu analiz yalnız mutlak sıfır sıcaklığında doğru, fakat daha yüksek sıcaklıklarda elektronlar termal enerji kazanacaklarından daha yüksek enerji hallerine uyarılırlar formülümüz (5.1) de verildi bu Fermi-Dirac Dağılımı olarak adlandırılır. $T=0$ K’de denklem, dağılımın Şekil 5.8 0.1K’de verildiği gibi olur, fakat daha yüksek sıcaklıklarda (300K, 600K, 1200K, ve 2100K) dağılımdaki keskin adım Şekil 5.9, Şekil 5.10, Şekil 5.11’de gösterildiği gibi daha meyilli hale gelir.

Yapılan çalışmaların sonucunda, Zigzag yarıiletken Karbon Nanotüplerin, enerji bant aralığı (E_g), Fermi enerji (E_F) değerleri elektronik durum yoğunlukları (eDOS) grafiklerinden elde edilmiştir. Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafiklerine bakılarak Zigzag karbon nanotüplerin metalimsi yarıiletken veya yarıiletken bir davranış gösterdiği belirlendi. Zigzag yarıiletken karbon nanotüplerde, elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde, Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa karbon nanotüplerde metalimsi davranış göstermektedir, eğer Fermi enerji civarında elektronik durum yoğunluğu gözlenmiyorsa yarıiletken davranış durumunu göstermektedir.

Simülasyon sırasında elektronik durum yoğunluğun hesaplayıcı formül aşağıda verilmiştir.

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{N(\varepsilon + \varepsilon) - N(\varepsilon)}{\varepsilon} \quad (5.2)$$

Bu formülde ' N ' sistemdeki elektron sayısı:

$$N(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{N_{cell}} \sum_{j=1}^{4Nat} \frac{2}{1 + f((E - \varepsilon_i) / k_B T)} * \sum_{j=1}^{4Nat} |H(j, i)|^2 \quad (5.3)$$

Grafikteki değişiklikler bize orada bir elektronik durum yoğunluğu olduğun belirtmektedir. Çizelge 5.10, Çizelge 5.11, Çizelge 5.12, Çizelge 5.13, Çizelge 5.14, Çizelge 5.15, Çizelge 5.16, Çizelge 5.17, Çizelge 5.18 ve Çizelge 5.20' de Zigzag KNT'ler için farklı sıcaklıklarda enerji bant aralığı değerleri 50 adım ve 3000 adım için ayrı hesaplanıp tablo haline getirildi ve farklı sıcaklıklarda elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri çizildi. Grafikteki kesik çizgi durumu, verilen durum yoğunluğu grafikleri her bir enerji değerindeki yerel durum yoğunluklarını göstermektedir.

Herhangi bir sıcaklıkta elektron bulunan en yüksek enerji seviyesine valans bandı, bunu izleyen ilk boş enerji düzeyine ise iletkenlik bandı adı verilmiştir. Bant aralığı iletkenlik bandının en düşük enerjisi ile valans bandının en yüksek enerjisi arasındaki enerji farkıdır. Mutlak sıfır sıcaklığında ($0^\circ K$) elektron bulunan en yüksek enerji düzeyinin adı ise Fermi Enerji seviyesidir.

Çizelgede 5.11 Zigzag KNT'ler için 0.1K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000 adım)
(9,0)	180	0,11	0,71
(11,0)	220	0,69	0,72
(12,0)	240	0,04	0,68
(13,0)	260	0,46	0,48
(14,0)	280	0,53	0,55
(15,0)	300	0,063	0,062
(16,0)	320	0,41	0,43
(17,0)	340	0,45	0,39
(21,0)	420	0,25	0,33

Çizelge 5.12 Zigzag KNT'ler için 300 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50adım)	E gap (eV) (3000adım)
(9,0)	180	0,13	0, 59
(11,0)	220	0,65	0,69
(12,0)	240	0,06	0,073
(13,0)	260	0,44	0,43
(14,0)	280	0,43	0,45
(15,0)	300	0,05	0,42
(16,0)	320	0,36	0,43
(17,0)	340	0,37	0,36
(21,0)	420	0,23	0,31

Çizelge 5.13 Zigzag KNT'ler için 600 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000adım)
(9,0)	180	0,15	0, 68
(11,0)	220	0,62	0, 64
(12,0)	240	0,04	0,65
(13,0)	260	0,42	0,43
(14,0)	280	0,41	0,39
(15,0)	300	0,07	0,06
(16,0)	320	0,28	0,32
(17,0)	340	0,35	0,31
(21,0)	420	0,31	0,32

Çizelge 5.14 Zigzag KNT'ler için 900 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000adım)
(9,0)	180	0,13	0,67
(11,0)	220	0,61	0,66
(12,0)	240	0,73	0,62
(13,0)	260	0,41	0,43
(14,0)	280	0,39	0,41
(15,0)	300	0,49	0,43
(16,0)	320	0,38	0,31
(17,0)	340	0,36	0,33
(21,0)	420	0,33	0,32

Çizelge 5.15 Zigzag KNT'ler için 1200 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000 adım)
(9,0)	180	0,13	0,66
(11,0)	220	0,58	0,65
(12,0)	240	0,62	0,59
(13,0)	260	0,38	0,41
(14,0)	280	0,39	0,42
(15,0)	300	0,54	0,39
(16,0)	320	0,46	0,36
(17,0)	340	0,37	0,33
(21,0)	420	0,29	0,31

Çizelge 5.16 Zigzag KNT'ler için 1500 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000 adım)
(9,0)	180	0,15	0,65
(11,0)	220	0,73	0,64
(12,0)	240	0,47	0,56
(13,0)	260	0,37	0,43
(14,0)	280	0,38	0,44
(15,0)	300	0,53	0,43
(16,0)	320	0,37	0,33
(17,0)	340	0,42	0,37
(21,0)	420	0,36	0,38

Çizelge 5.17 Zigzag KNT'ler için 1700K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

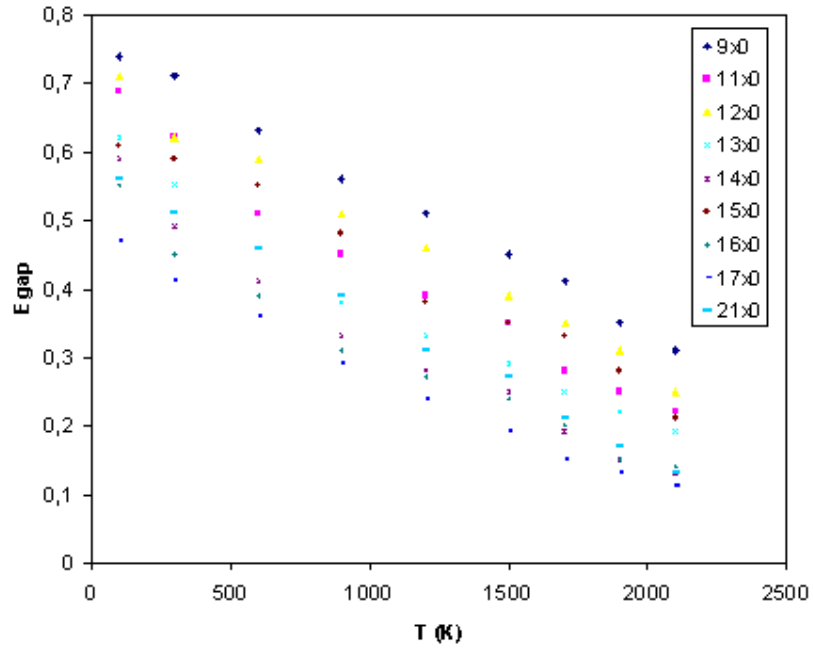
(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000 adım)
(9,0)	180	0,22	0,62
(11,0)	220	0,66	0,63
(12,0)	240	0,73	0,55
(13,0)	260	0,46	0,41
(14,0)	280	0,40	0,39
(15,0)	300	0,06	0,37
(16,0)	320	0,33	0,38
(17,0)	340	0,42	0,32
(21,0)	420	0,28	0,27

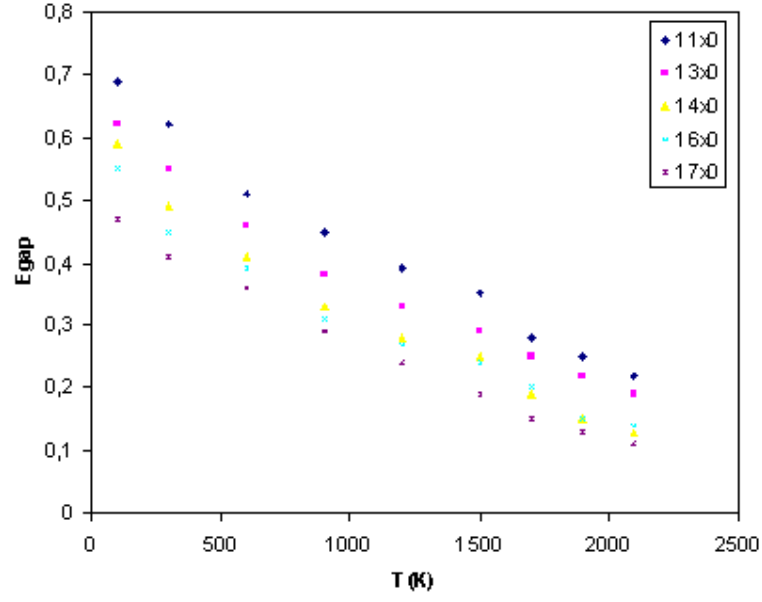
Çizelge 5.18 Zigzag KNT'ler için 1900K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50 adım)	E gap (eV) (3000adım)
(9,0)	180	0,15	0,62
(11,0)	220	0,58	0,63
(12,0)	240	0,42	0,55
(13,0)	260	0,35	0,47
(14,0)	280	0,39	0,41
(15,0)	300	0,49	0,40
(16,0)	320	0,47	0,39
(17,0)	340	0,46	0,38
(21,0)	420	0,29	0,27

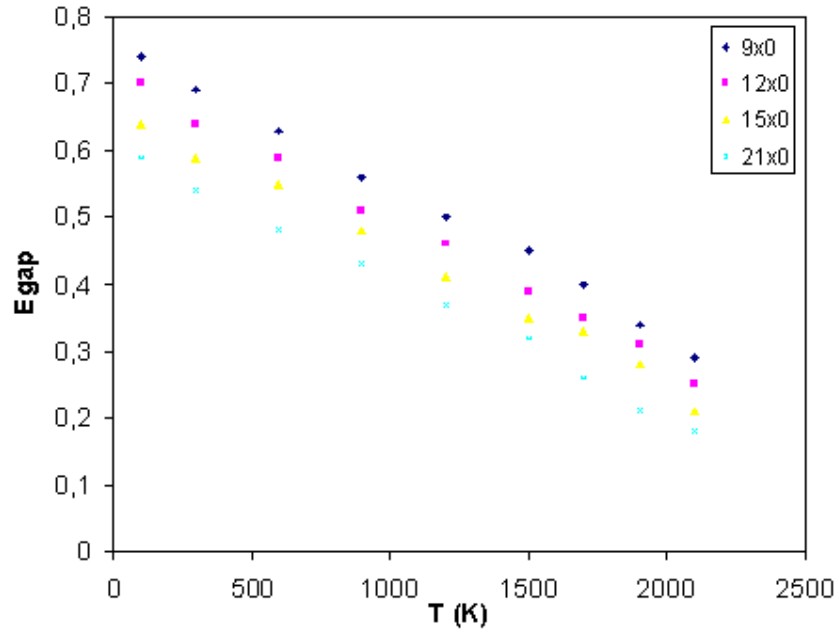
Çizelge 5.19 Zigzag KNT'ler için 2100 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom sayısı	E gap (eV) (50adım)	E gap (eV) (3000adım)
(9,0)	180	0,17	0,52
(11,0)	220	0,59	0,51
(12,0)	240	0,04	0,53
(13,0)	260	0,34	0,35
(14,0)	280	0,38	0,37
(15,0)	300	0,61	0,33
(16,0)	320	0,47	0,30
(17,0)	340	0,38	0,31
(21,0)	420	0,23	0,26

Şekil 5.11 Zigzag TDKNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak E_{gap} değişimi



Şekil 5.9 Yarıiletken Zigzag KNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak Egap değişimi



Şekil 5.13'te Metalimsi-yarıiletken Zigzag KNT'lerin sıcaklığa bağlı olarak Egap değişimi

Şekil 5.11, Şekil 5.12 ve Şekil 5.13'te Zigzag KNT'ler için farklı sıcaklıklarda enerji bant aralığı değerleri alınarak, grafikleri çizilmiştir. KNT'lerin enerji bant aralığı sıcaklık yükseldikçe azalmaktadır.

Çizelge 5.20 Zigzag KNT'lerin Yarıçap Değerleri (Simülasyon 3000adım)

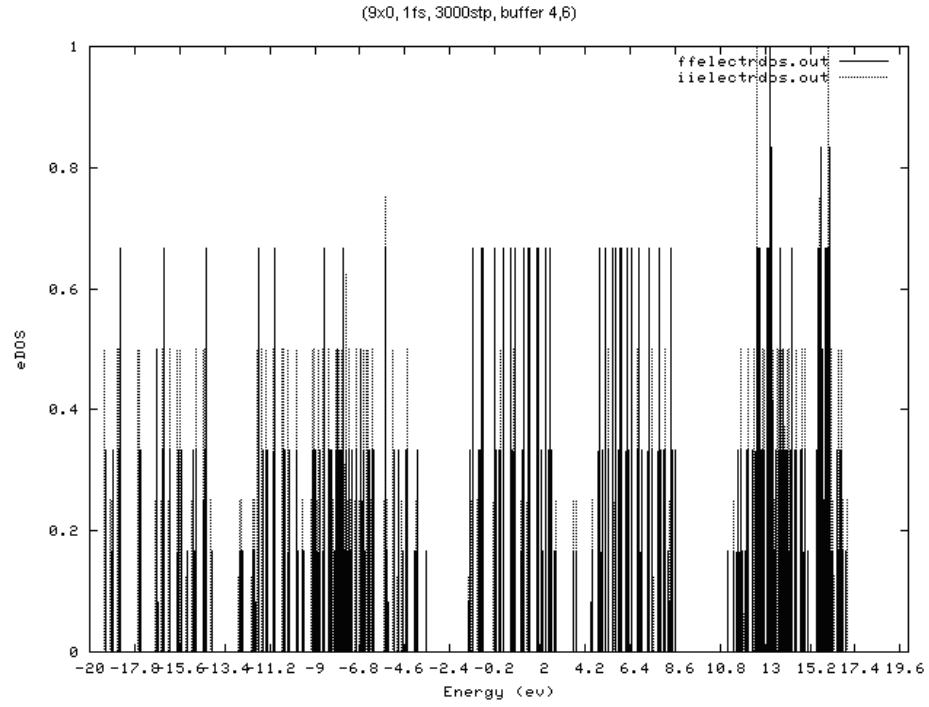
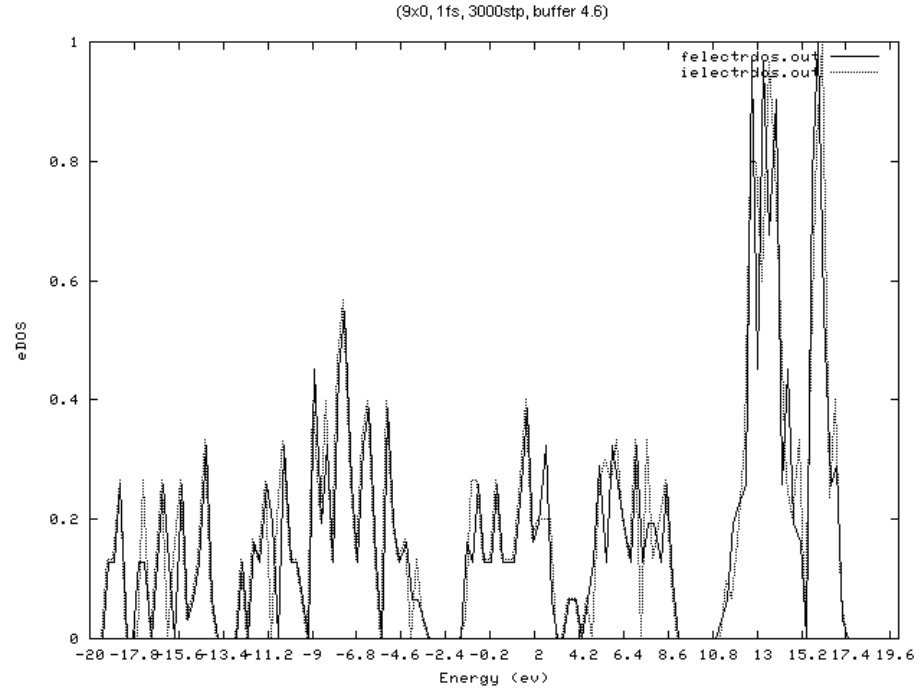
(n _{xm})	0,1K	300K	600K	900K	1200K	1500K	1700K	1900K	2100K
9x0	3,5489	3,5822	3,5861	3,5869	3,5954	3,6009	3,6172	3,6092	3,6138
11x0	4,3408	4,3403	4,3421	4,3444	4,3471	4,3503	4,3632	4,3553	4,3580
12x0	4,7155	4,7273	4,7315	4,7333	4,7360	4,7463	4,7501	4,7541	4,7582
13x0	5,1051	5,1460	5,1556	5,1700	5,1841	5,1948	5,1967	5,2153	5,2243
14x0	5,4931	5,4963	5,4958	5,4971	5,5005	5,5032	5,5067	5,5132	5,5154
15x0	5,8809	5,8823	5,8835	5,8851	5,8998	5,8953	5,8974	5,9095	5,9098
16x0	6,2702	6,2739	6,2782	6,2791	6,2851	6,2888	6,2933	6,2941	6,2950
17x0	6,6602	6,6648	6,6653	6,6664	6,6680	6,6699	6,6700	6,6701	6,6703
21x0	8,2233	8,2279	8,2374	8,2379	8,2490	8,2541	8,2556	8,2623	8,2660

Çizelge 5.20'de Metalimsi-yarıiletken KNT'ler (9x0, 12x0,15x0, 21x0) ve yarıiletken KNT'ler (11x0,13x0, 14x0, 16x0, 17x0) için 0,1K, 300K, 600K, 1200K, 1500K, 1700K, 1900K, 2100K sıcaklıklarda, 3000 adımda yarıçap değerleri alındı.

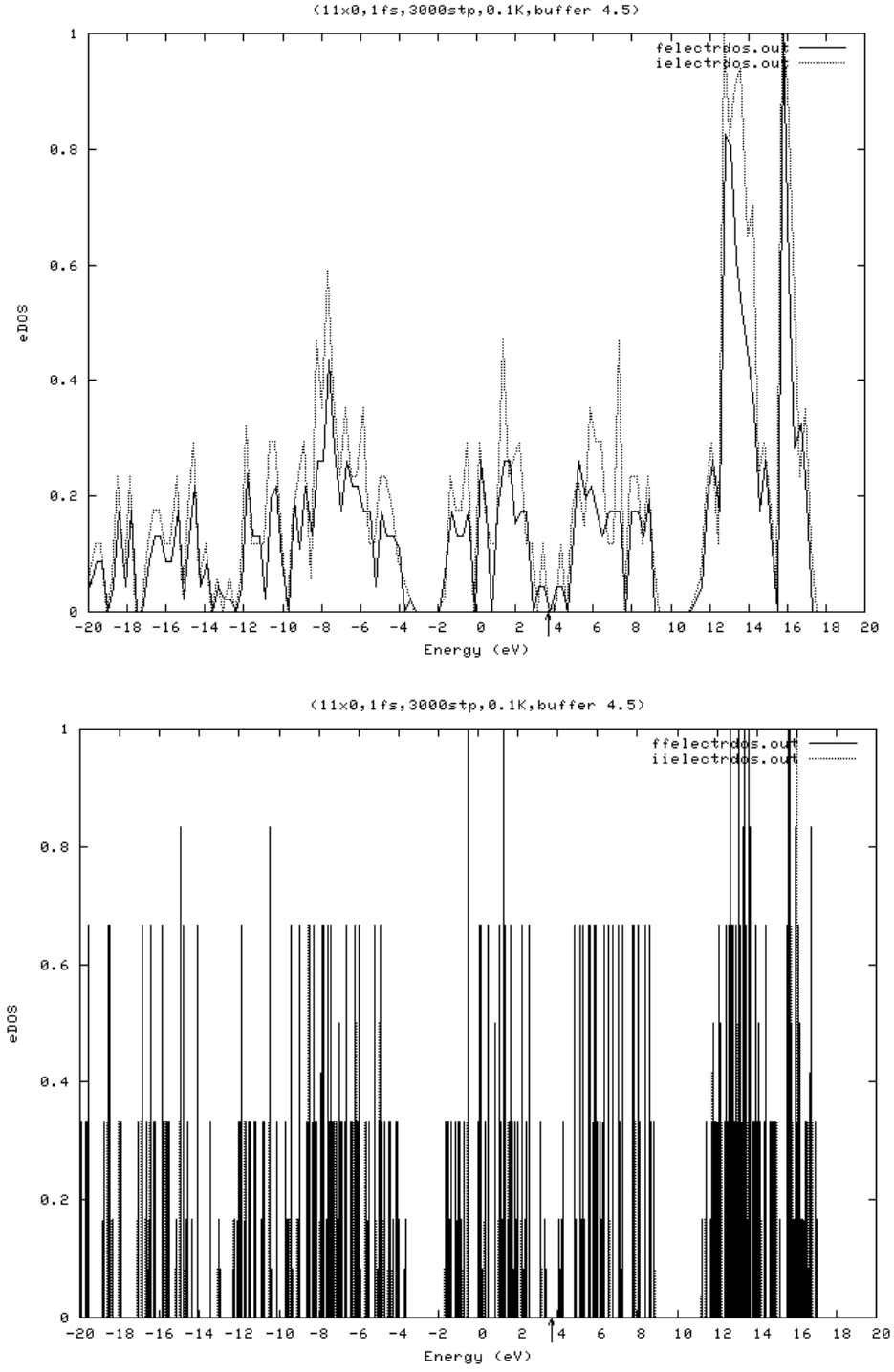
5.1 Farklı yapılardaki Zigzag KNT'lerin eDOS Özellikleri

Zigzag Karbon nanotüplerin Elektronik özelliklerin incelemek için, Zigzag karbon nanotüplerin elektronik durum yoğunlukları (eDOS) incelenmiştir. Her tüp için Fermi enerji değerleri tespit edilmiştir. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde Fermi enerji civarındaki davranışı KNT'lerin iletken yoksa yarıiletken olduğunu göstermektedir. eDOS grafiklerinde, Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa metalik davranış gösterir, Fermi civarında elektronik durum yoğunluğu gözlenmiyorsa yarıiletken davranış gösterir. İlk başta metalimsi-yarıiletken KNT'ler için farklı sıcaklıklarda hesaplamalar yapılarak eDOS grafikleri çizilmiştir. Çizilmiş olan tüplerimiz (metalimsi- yarıiletken Karbon nanotüpler 9x0, 12x0, 15x0, 21x0 yarıiletken Karbon nanotüplerimiz için ise 11x0, 13x0, 14x0, 16x0 ve 17x0) tüplerimiz için kıyaslamalar yapılarak eDOS grafikleri elde edilmiştir. Şekil 5.15' den Şekil 5.26' ya kadar farklı sıcaklıklarda elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri verilmiştir. Grafiklerdeki kesik çizgilerle verilen durum yoğunluğu grafikleri her bir enerji değerindeki yerel durum yoğunluklarını göstermektedir. Simülasyon öncesi ve simülasyon sonrası sistem belli bir dengeye ulaştıktan sonraki durumlar grafik üzerinde belirtilmiştir. Bu grafikler bize Fermi enerjisi civarında yerleşmiş durumların olup olmadığına dair bilgi vermektedir. Bu da bize TDKNT'lerin metalimsi-yarıiletken veya yarıiletken özellik göstereceğin belirlememize yardımcı olmaktadır.

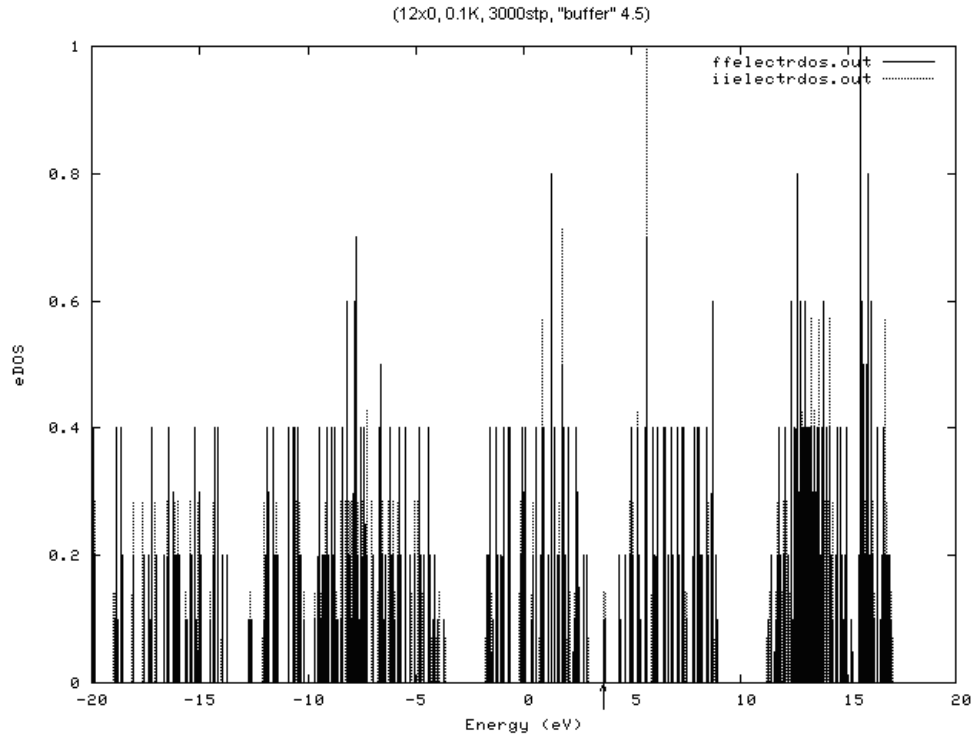
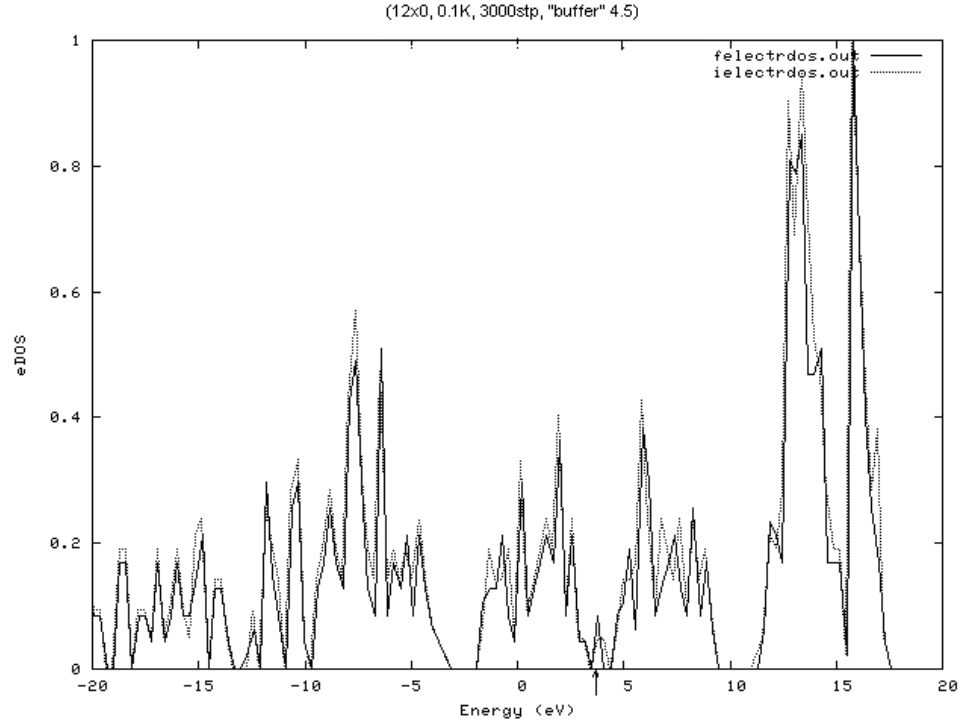
Bundan sonraki grafiklerimiz 3000 adımla çalışmış olan tüplerimizden elde edilmiş grafiklerdir. Çizilmiş olan tüplerimiz (metalimsi-yarıiletken Karbon nanotüpler 9x0, 12x0, 15x0, ve 21x0 yarıiletken Karbon nanotüplerimiz için 11x0, 13x0, 14x0, ve 16x0 ve 17x0) kıyaslamalar yapılarak eDOS grafikler çizildi.



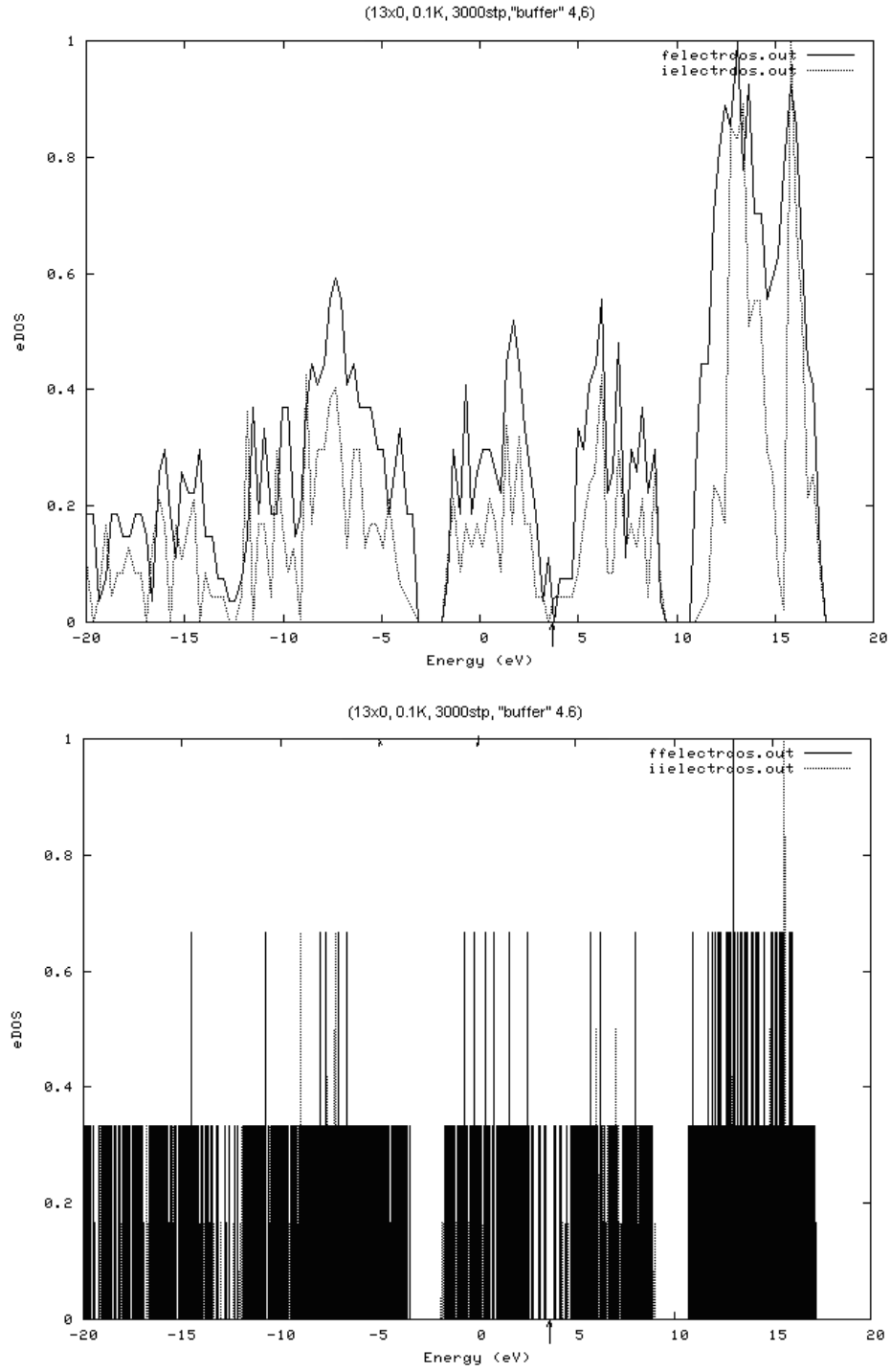
Şekil 5.11 9x0 KNT’ler için, 0,1K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım: 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



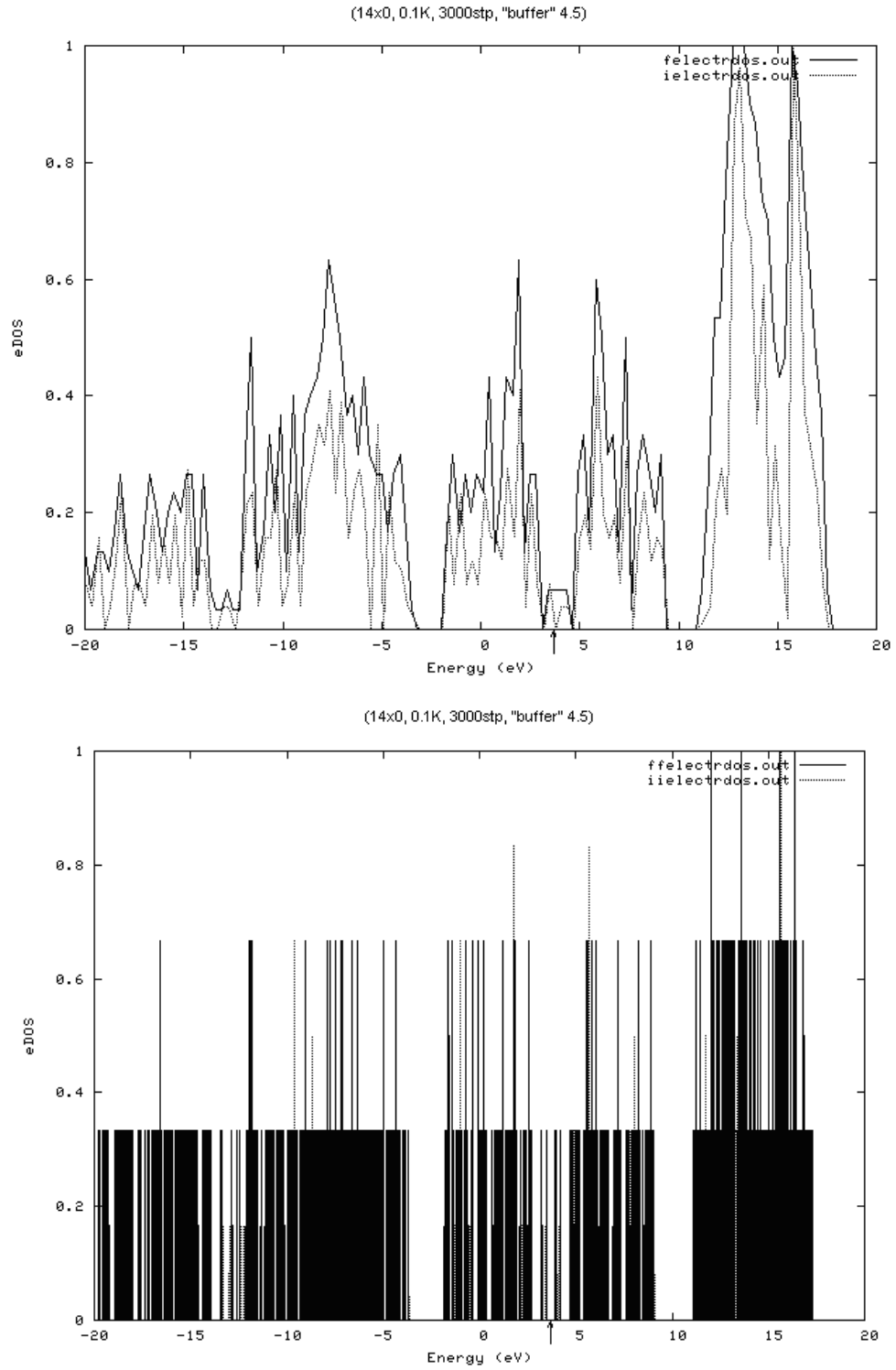
Şekil 5.12 11x0 KNT’ler için 0,1 K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



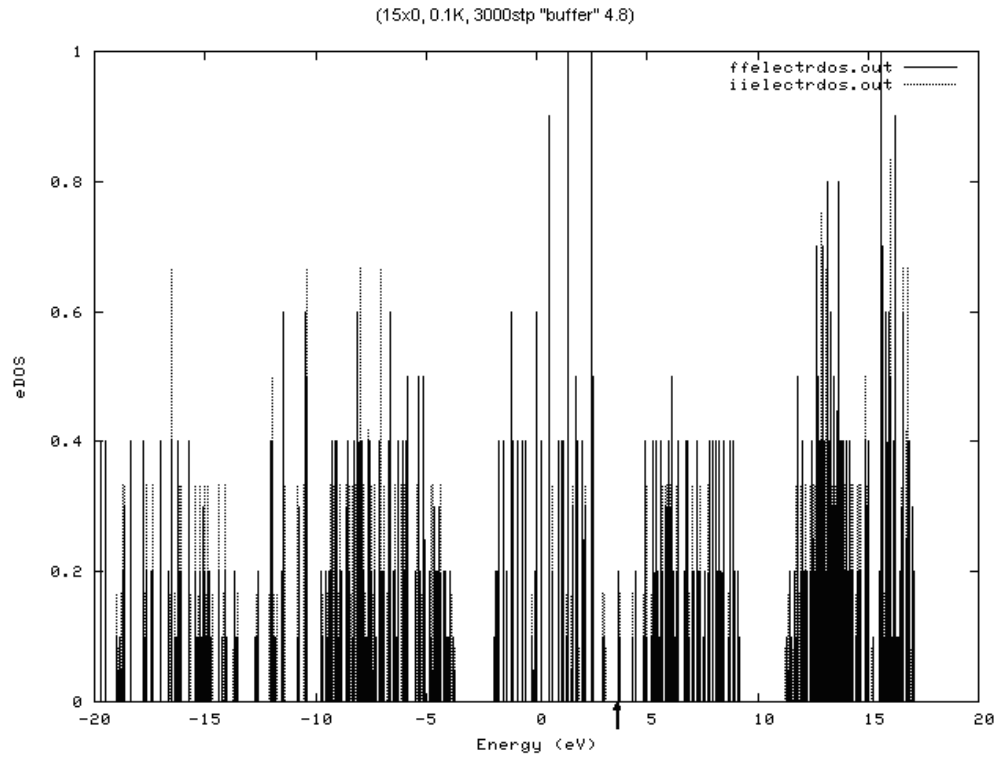
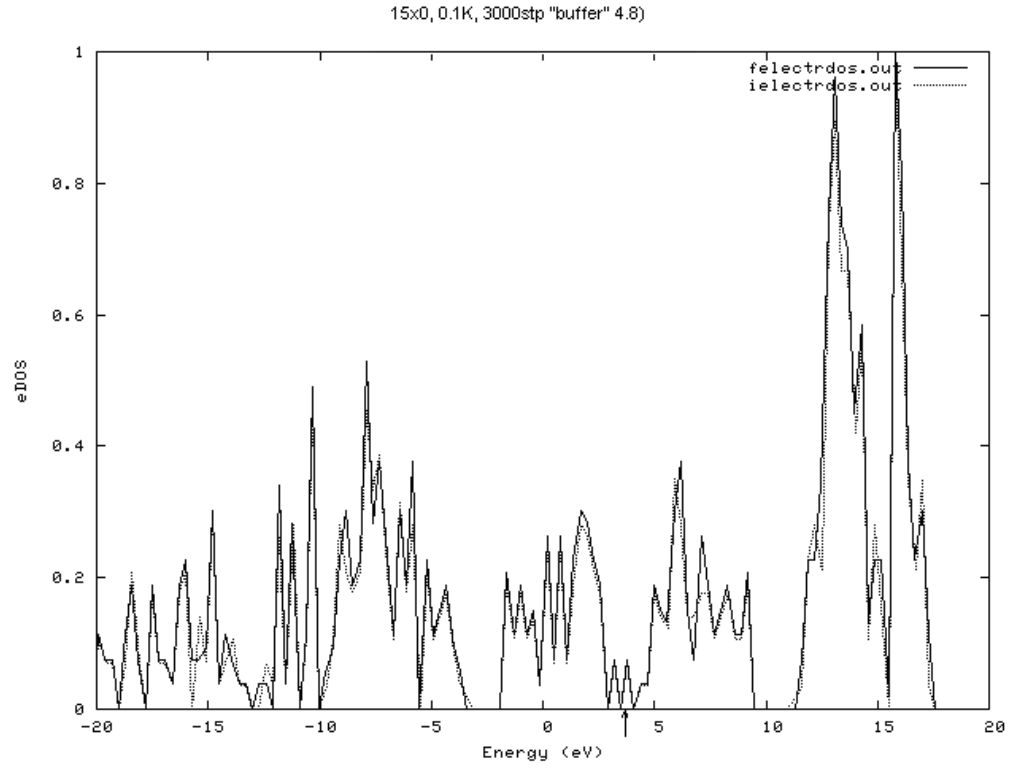
Şekil 5.13 12x0 KNT’ler için 0.1K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 5.14 13x0 KNT’ler için 0.1K, ‘Buffer skin’ Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



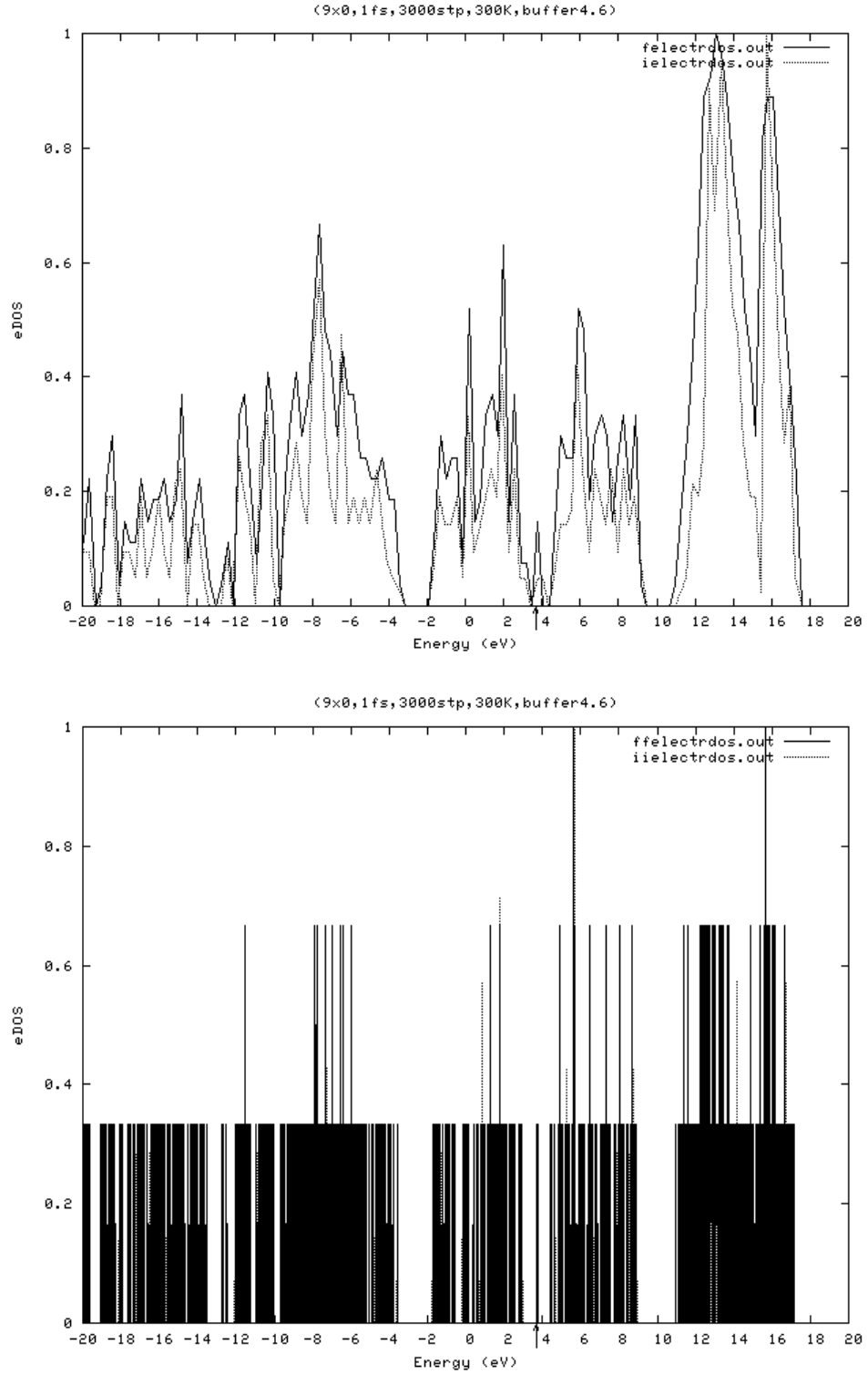
Şekil 5.15 14x0 KNT'ler için 0.1K, "Buffer skin" Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



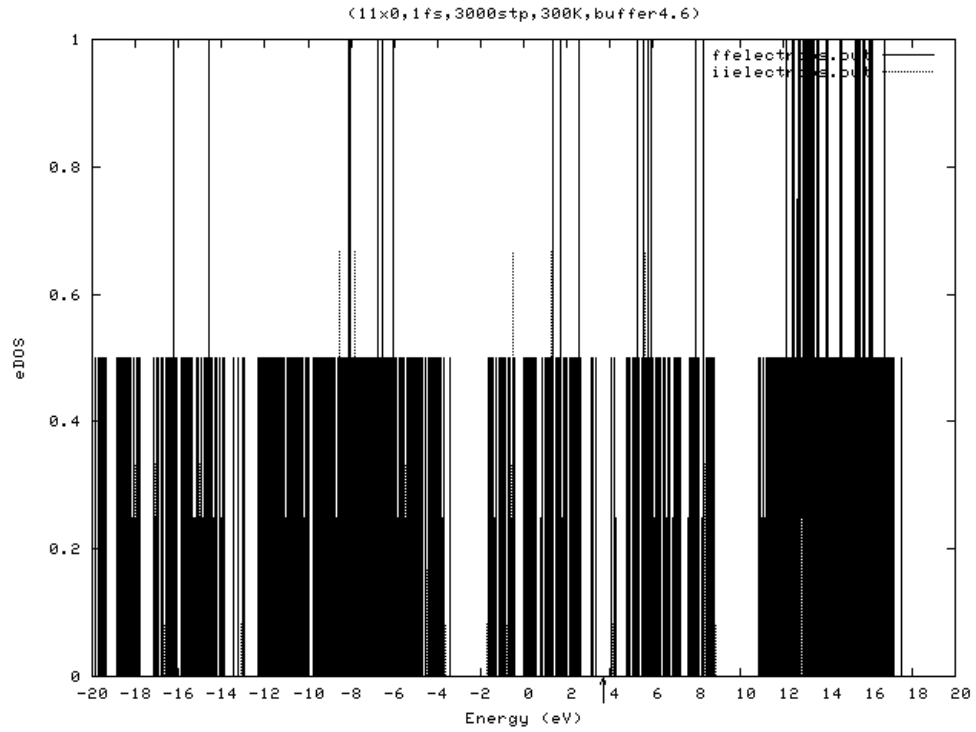
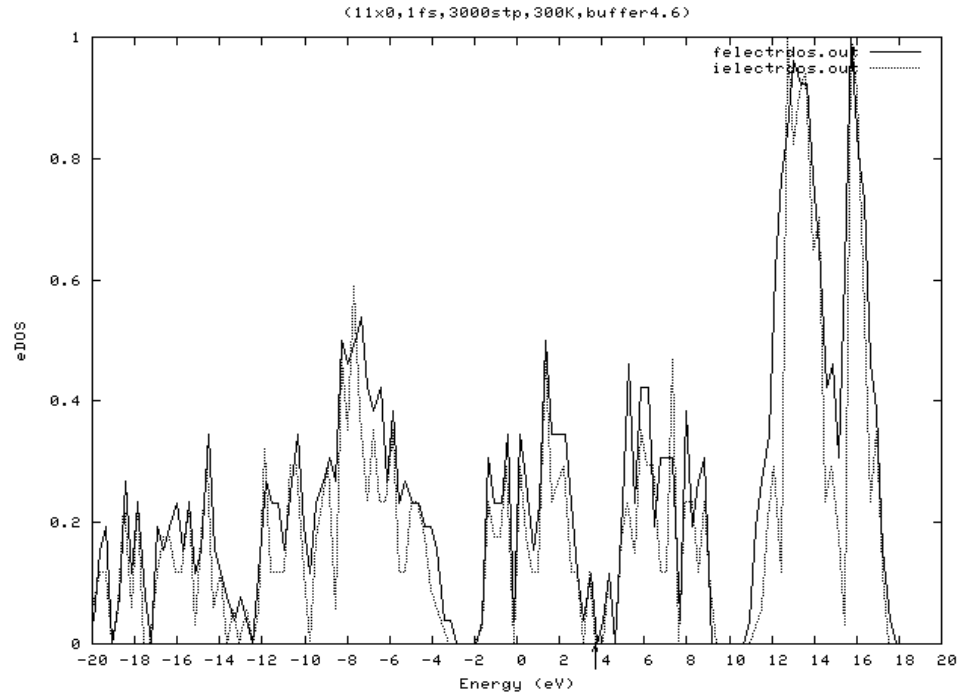
Şekil 5.16 15x0 KNT’ler için 0.1K, ‘Buffer skin’ Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri

Şekil 5.20 dan 5.27 e kadar 300 K’de elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri örnek olarak verilmiştir. Grafiklerin üzerinde belirtilmiş olan kesik çizgilerle verilen durum yoğunluğu grafikleri her bir enerji değerindeki durum yoğunluklarını göstermektedir. Fermi seviyeleri grafikler üzerinde işaretlenmiştir. Bu grafiklerden elde edilen enerji bant aralıkları Çizelge 5.10 ve Çizelge 5.19’ da tablo haline getirilmiştir. (9x0, 11x0, 12x0, 13x0, 14x0, 15x0, 16x0,17x0 ve 21x0) bu tüplerin eDOS grafikleri kıyaslanarak çizilmiştir.

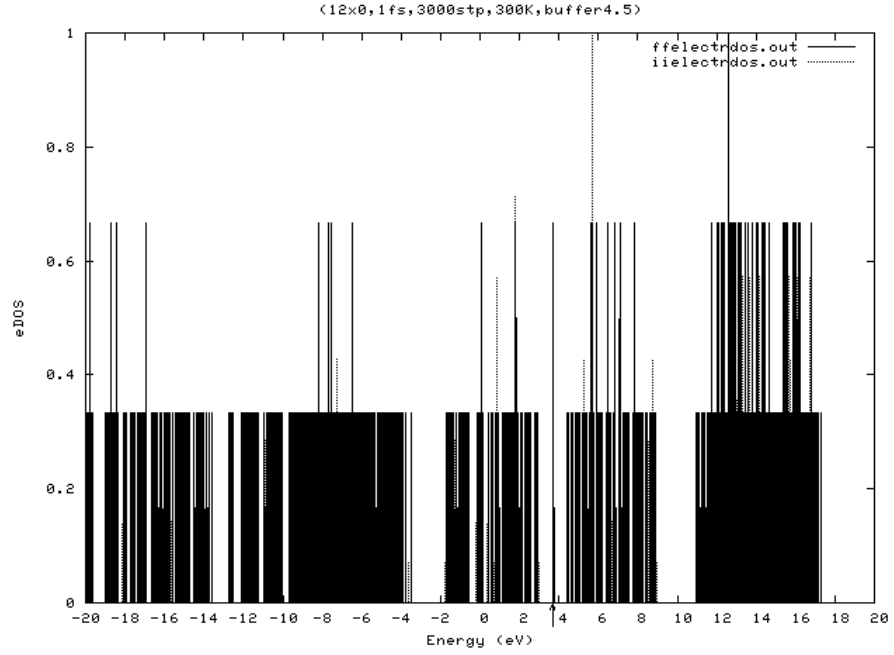
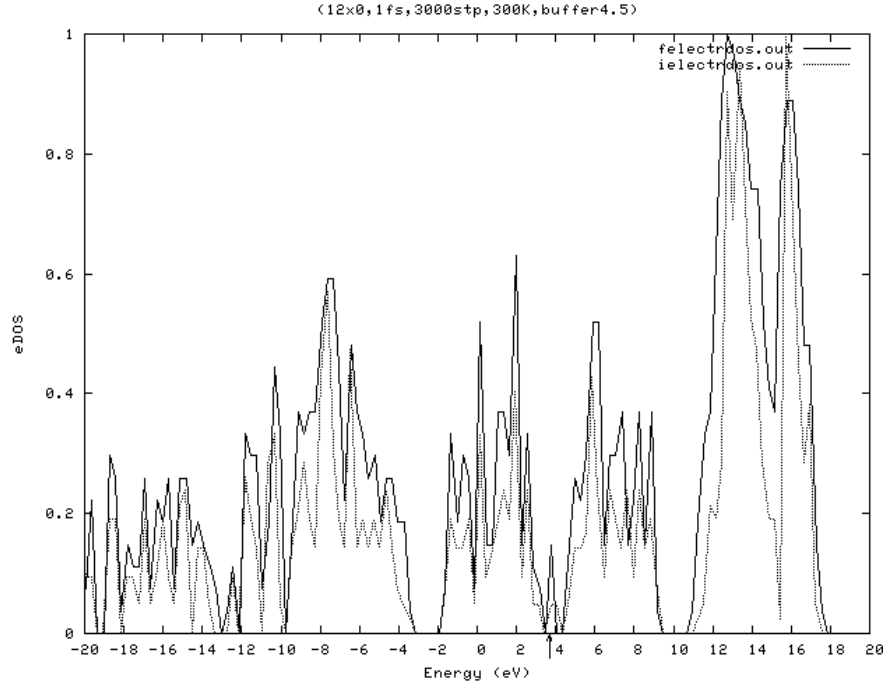
Şekil 5.28’den başlayıp Şekil 5.35’e kadar tüm tüplerin 600 K’de elde edilen elektronik durum yoğunluğu hesaplanarak grafikleri elde edildi. Çizelge 5.10 ve Çizelge 5.19’da grafiklerden elde edilen sonuçlardan enerji bant aralığı belirlenerek tablo haline getirildi.



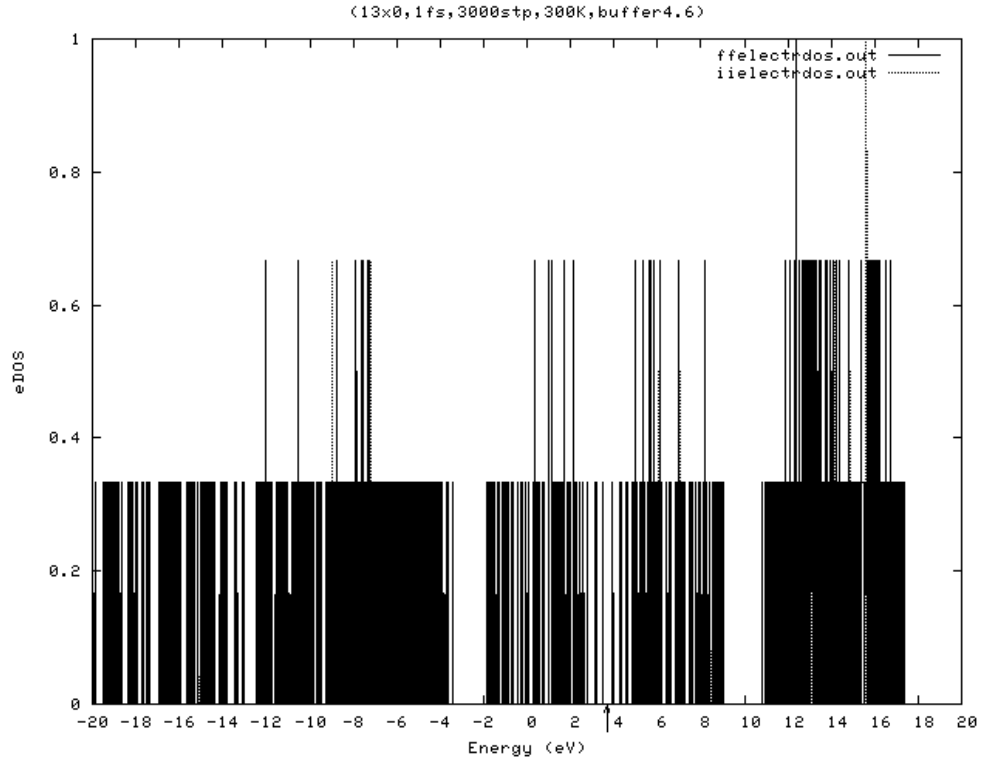
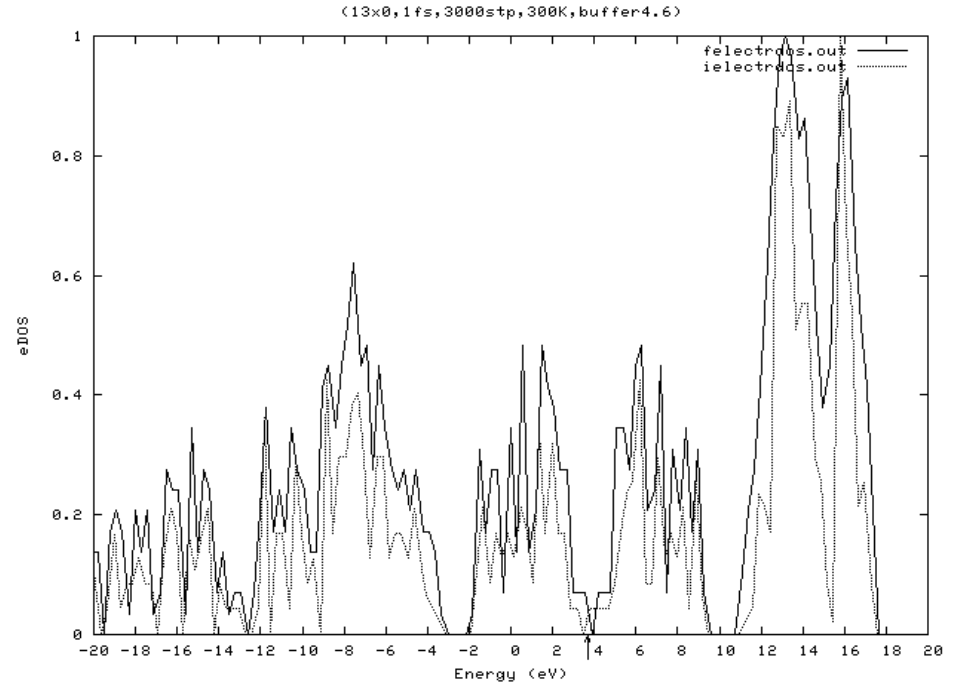
Şekil 5.17 9x0 KNT’ler için, 300K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım: 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



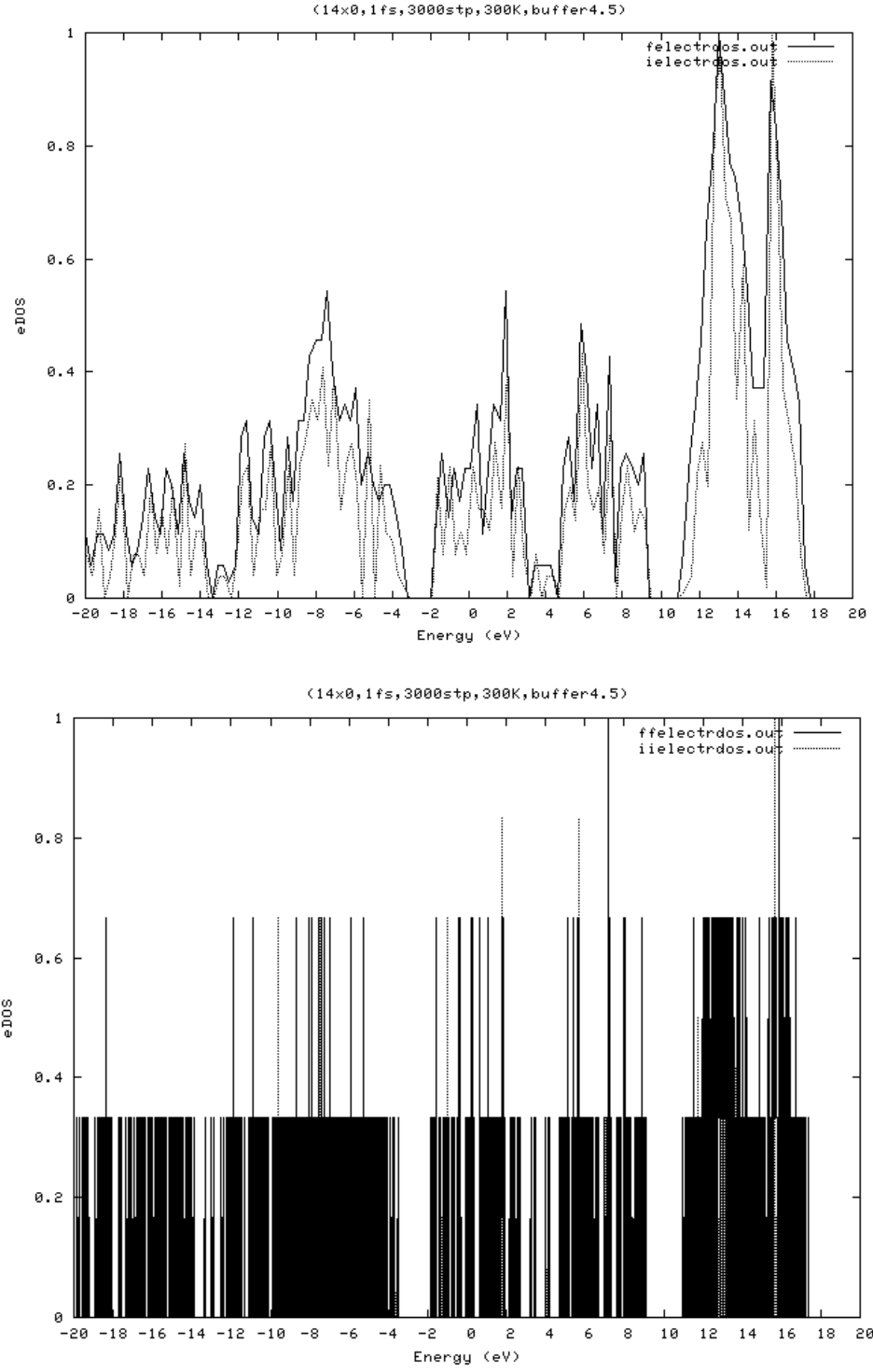
Şekil 5.18 11x0 KNT'ler için 300K, "Buffer skin" Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



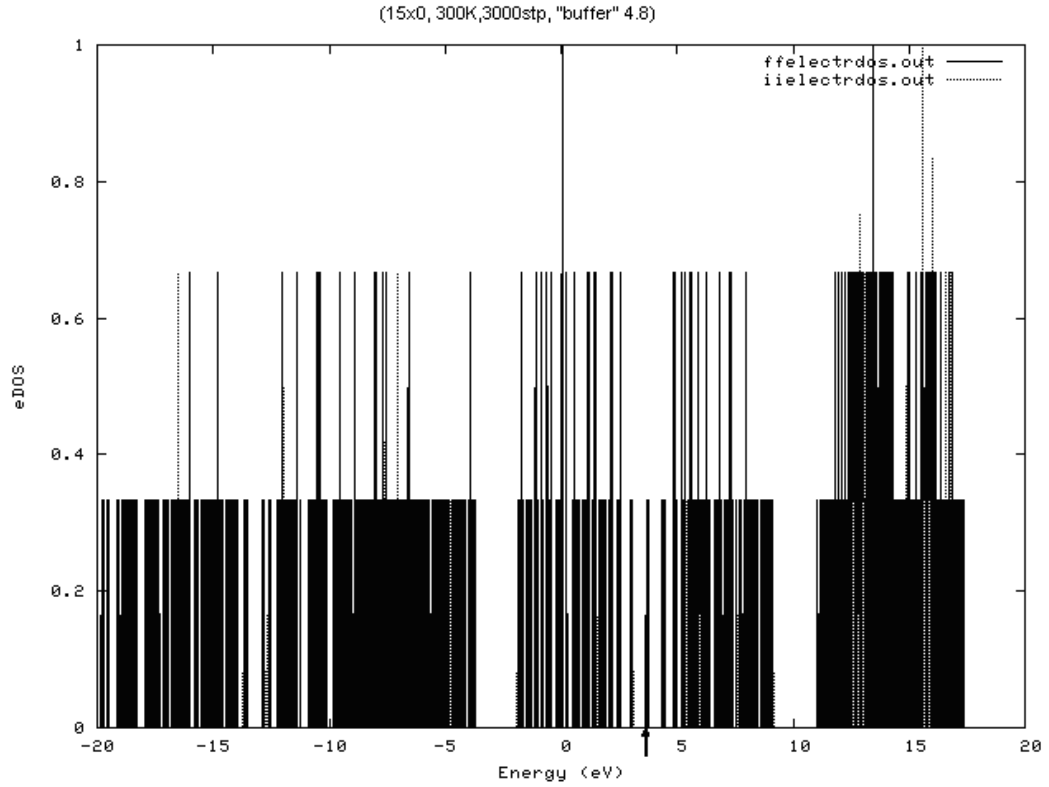
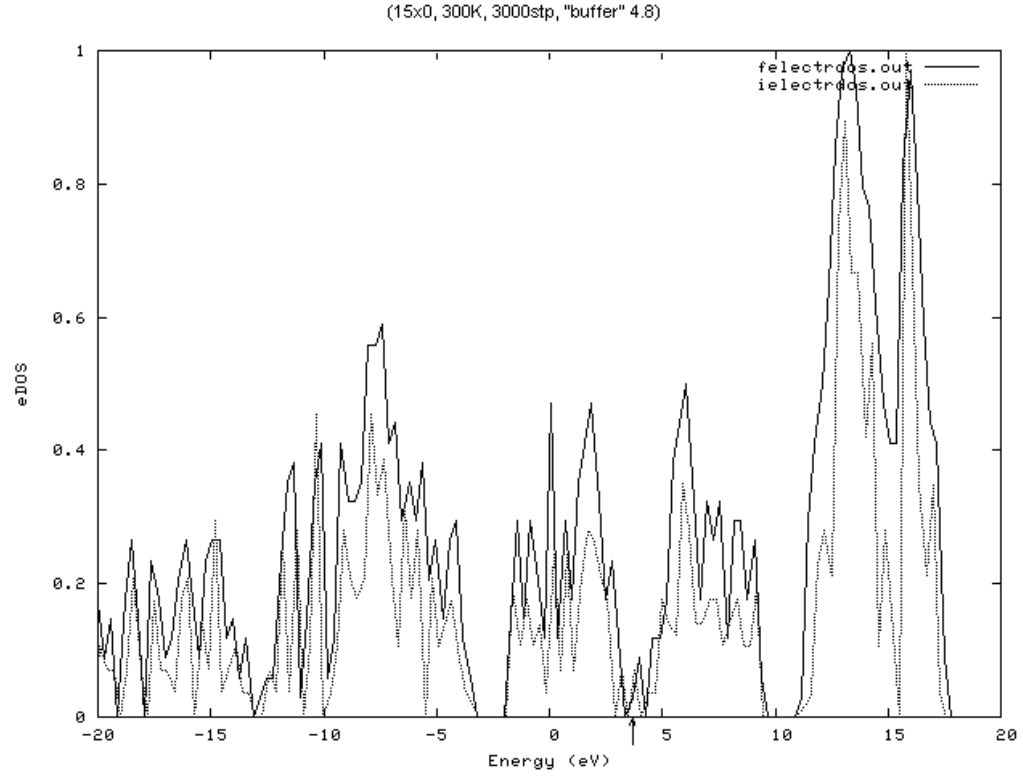
Şekil 5.19 12x0 KNT’ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



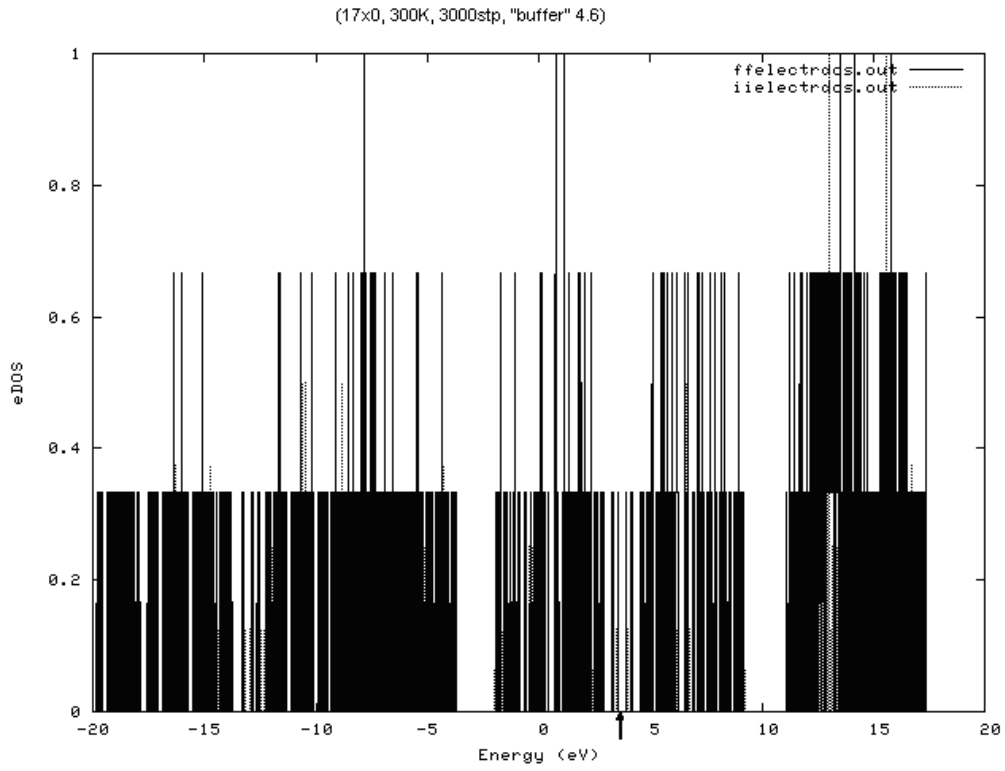
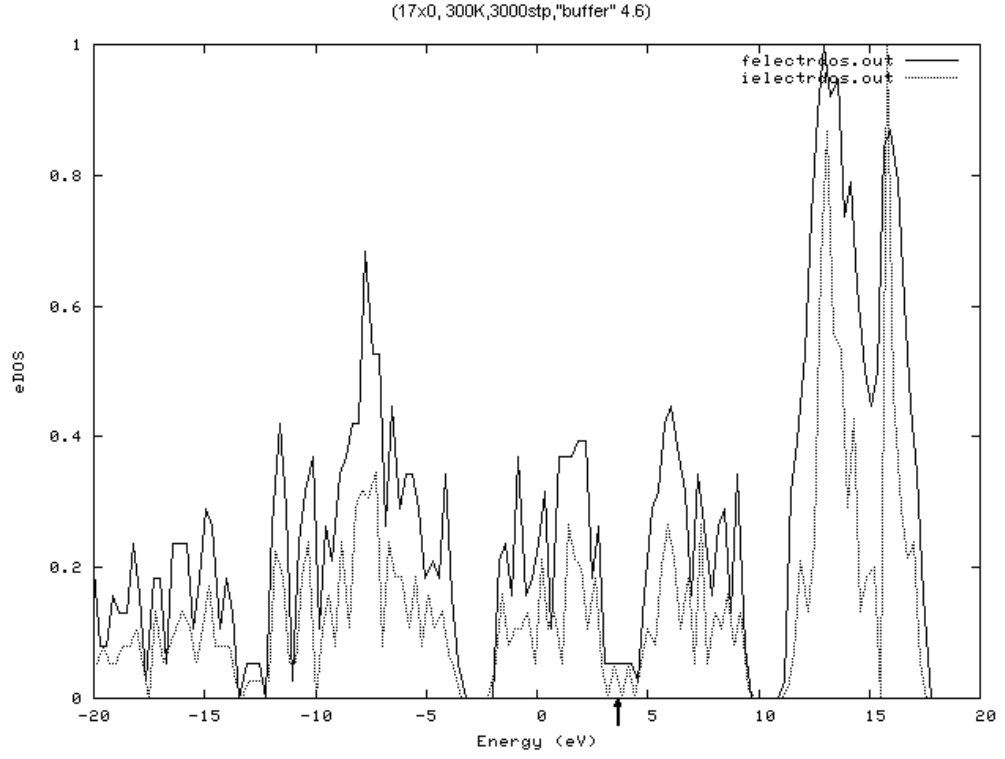
Şekil 5.20 13x0 KNT’ler için 300K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



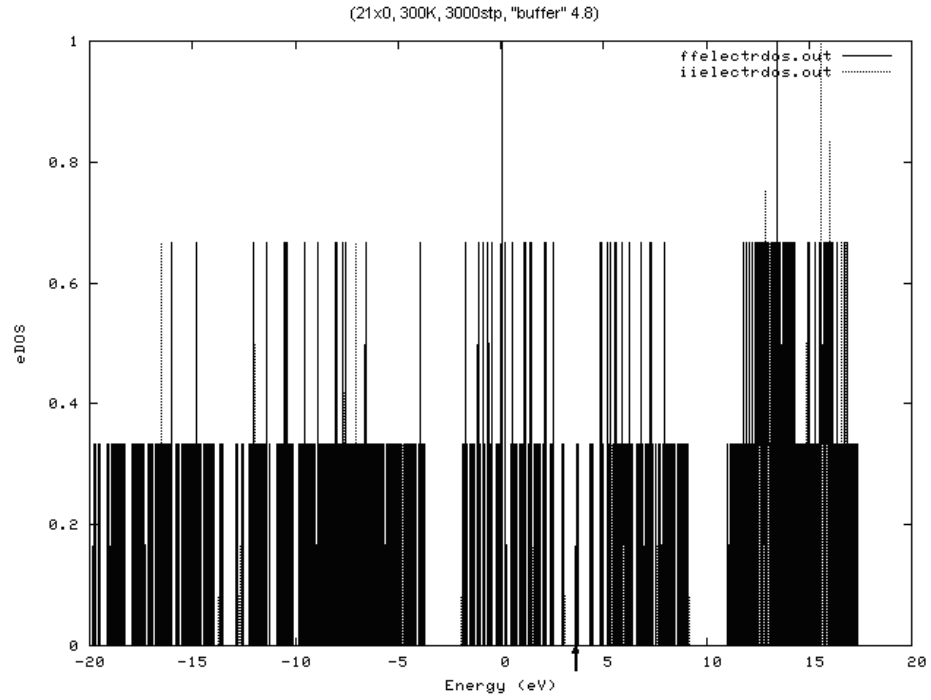
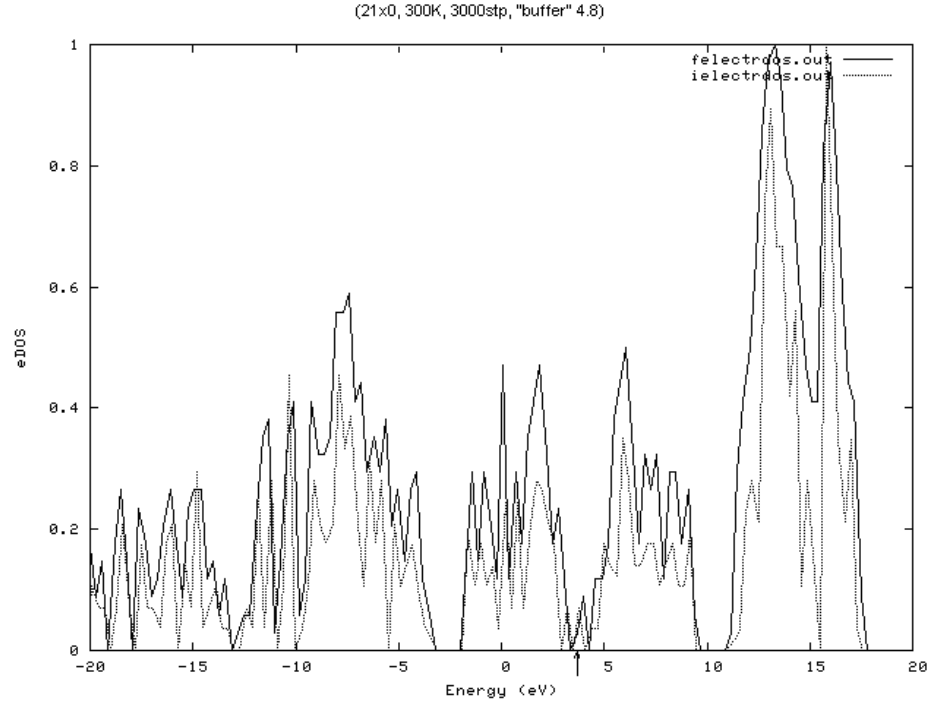
Şekil 5.21 14x0 KNT’ler için 300K, ‘Buffer skin’ Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



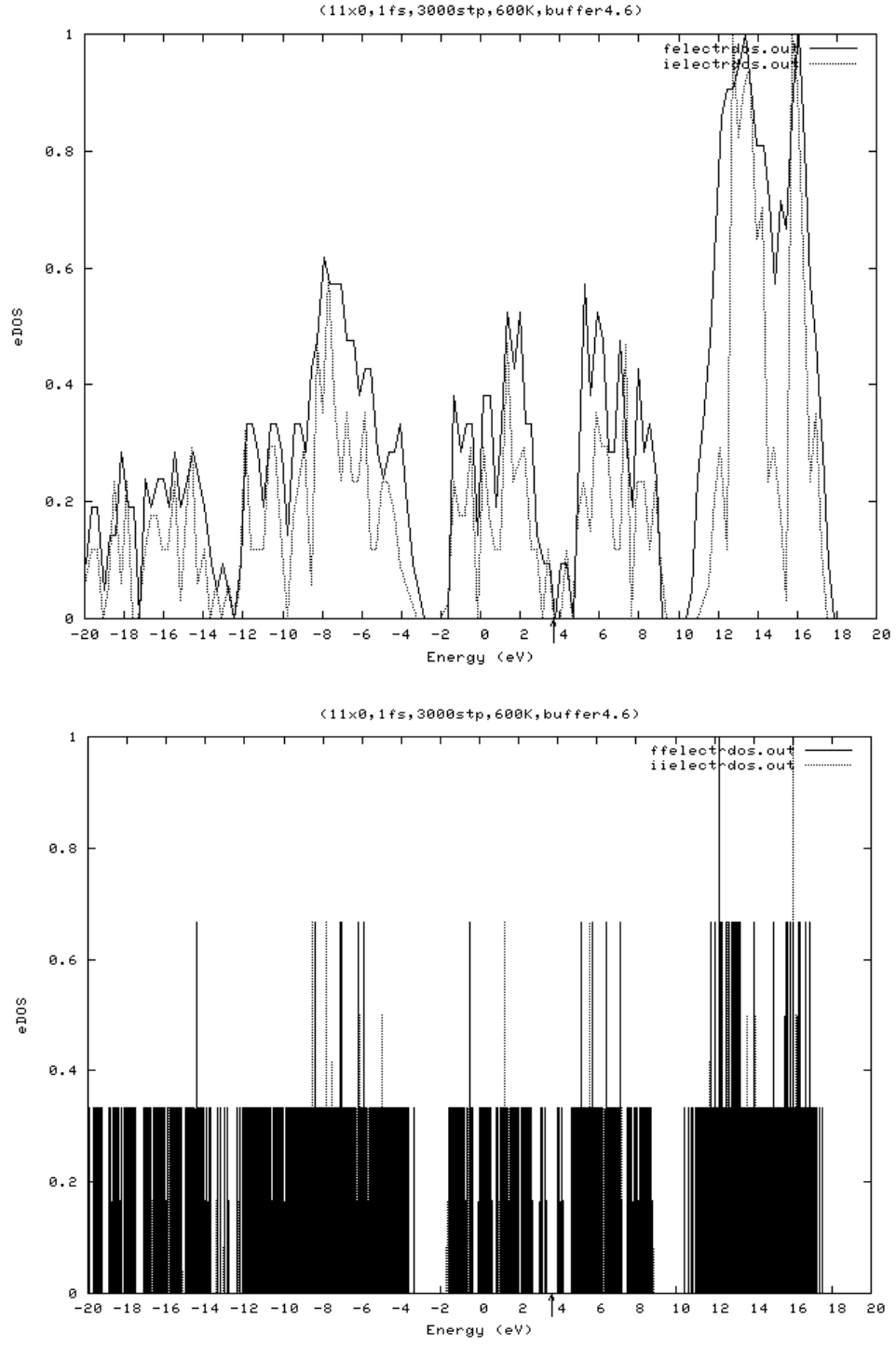
Şekil 5.22 15x0 KNT'ler için 300K, "Buffer skin" Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



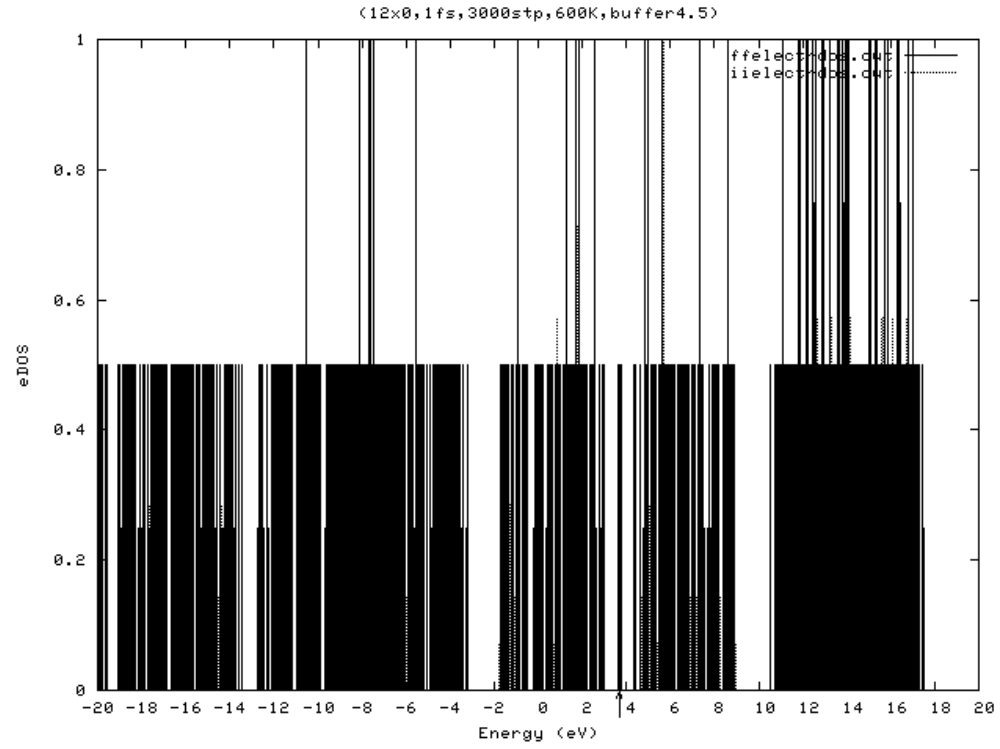
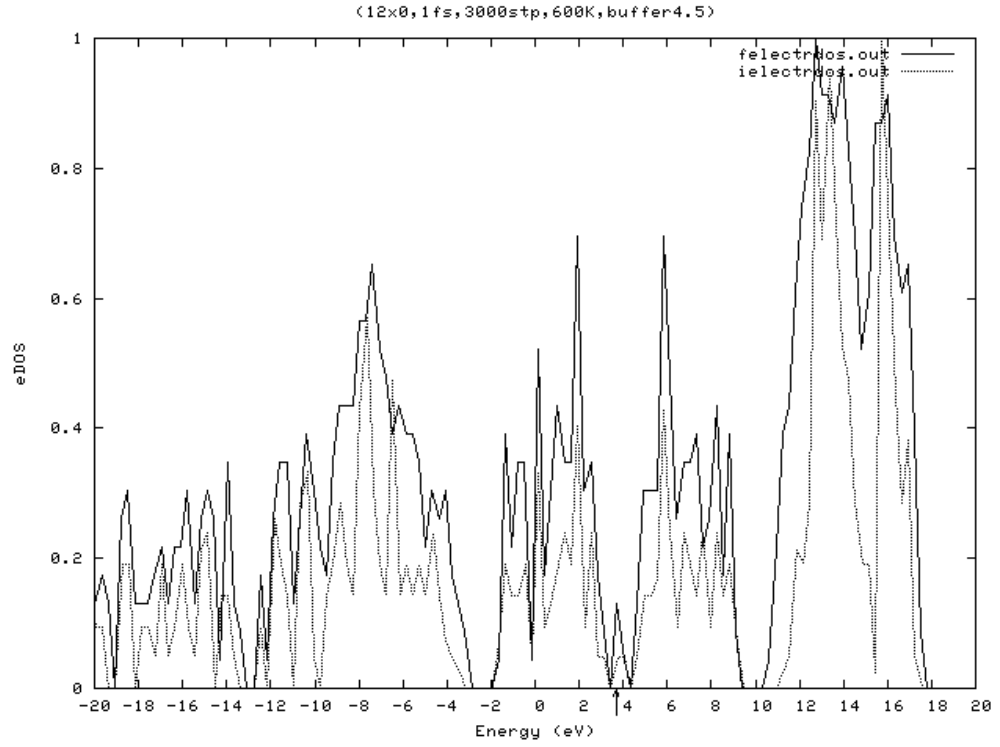
Şekil 5.23 17x0 KNT'ler için 300K, "Buffer skin" Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



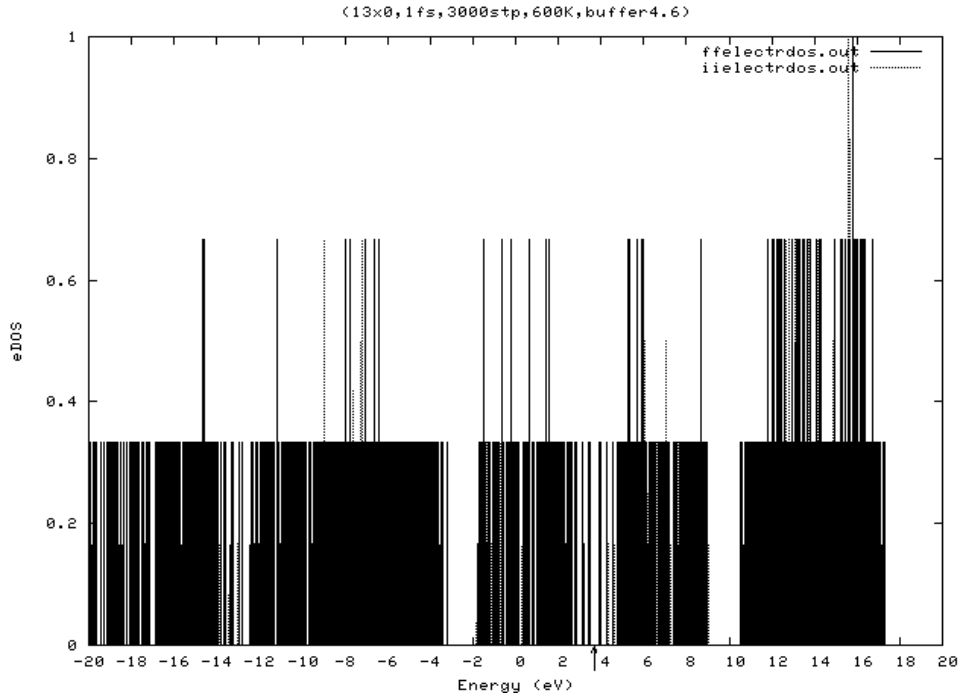
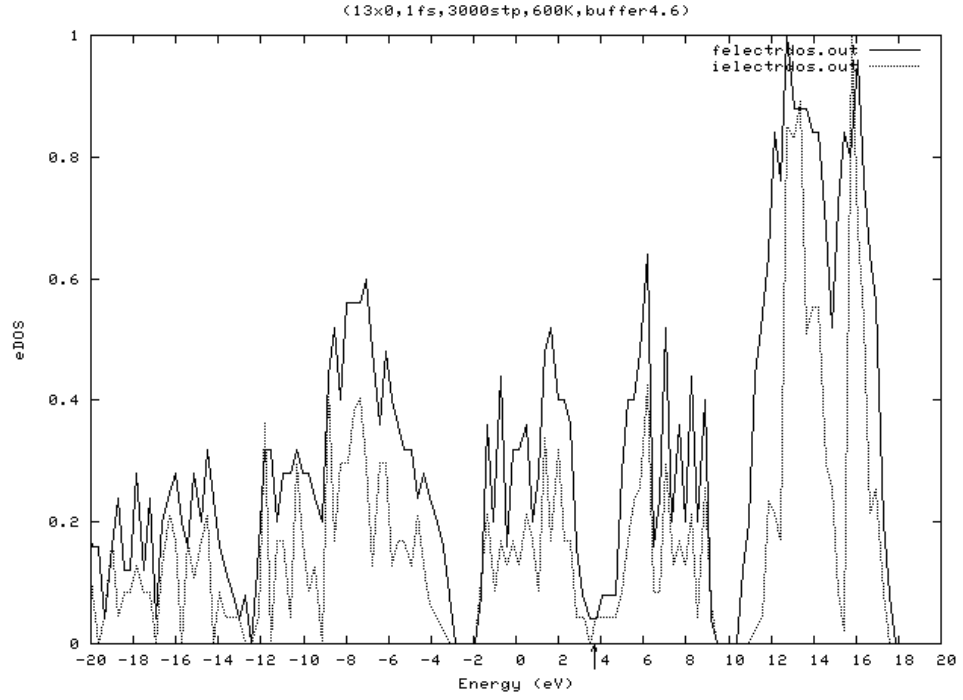
Şekil 5.24 21x0 KNT’ler için 300 K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.8, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.



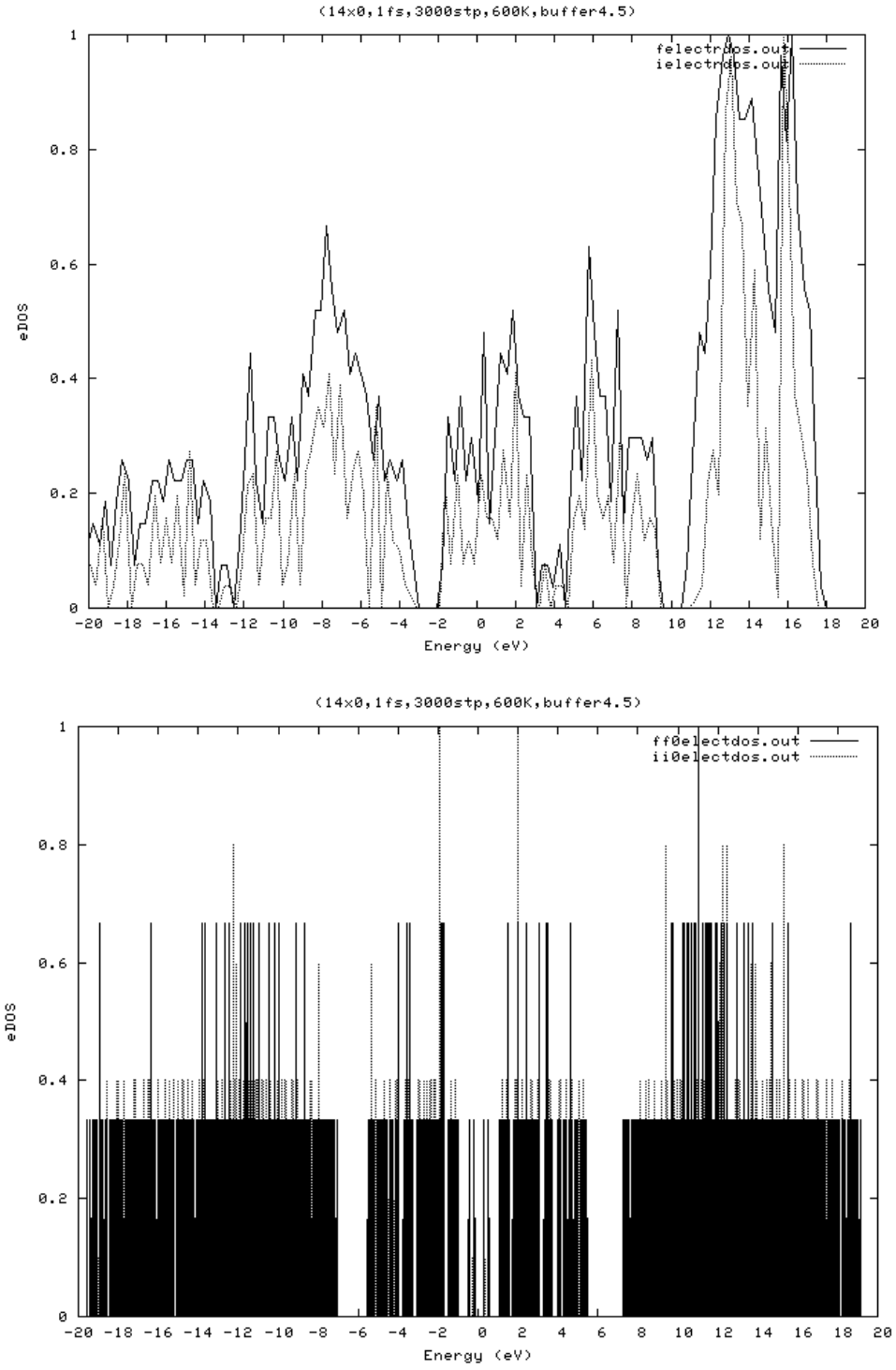
Şekil 5.25 11x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



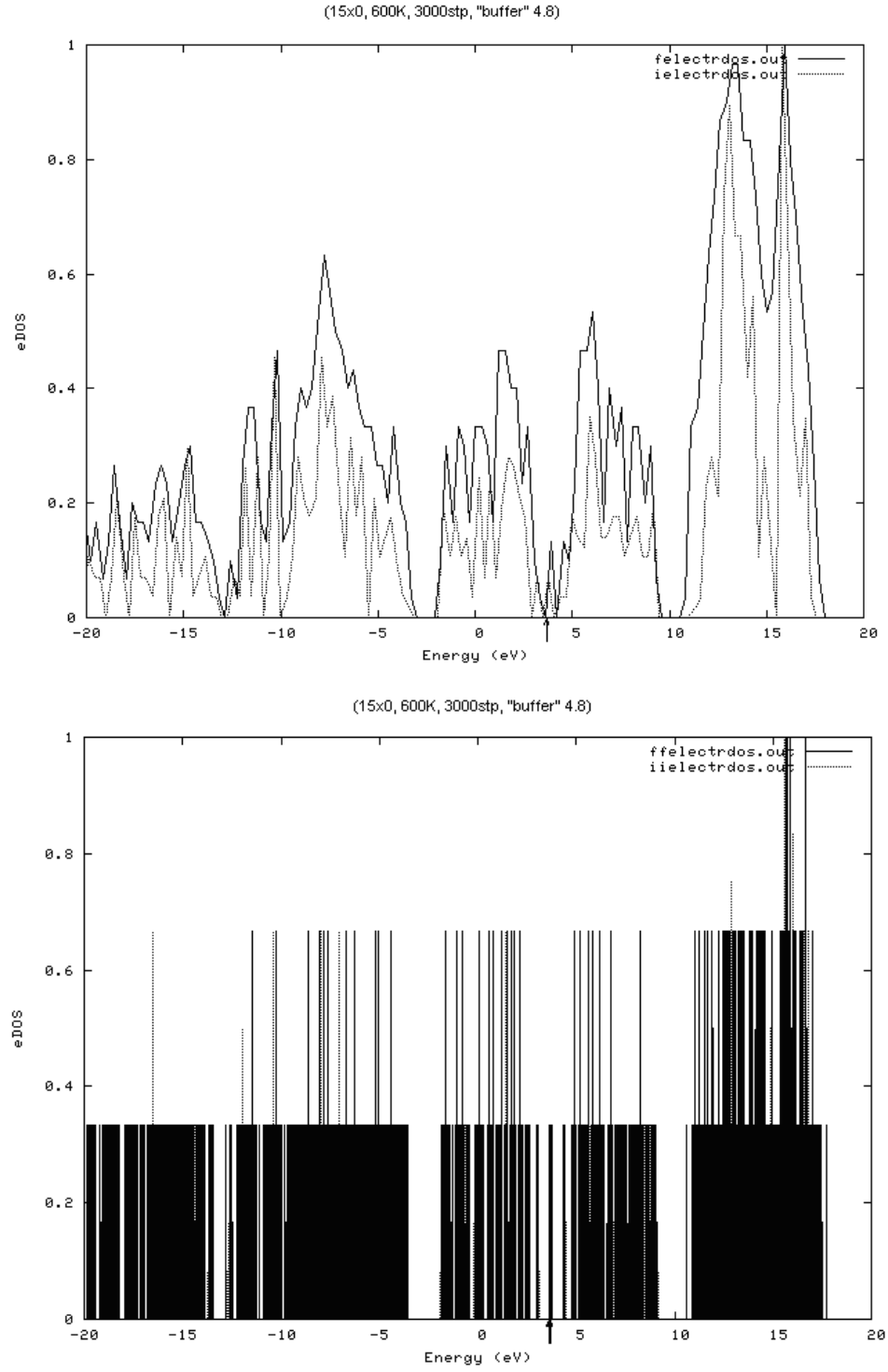
Şekil 5.26 12x0 KNT’ler için 600K, ‘Buffer skin’ Büyüklüğü 4.5, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



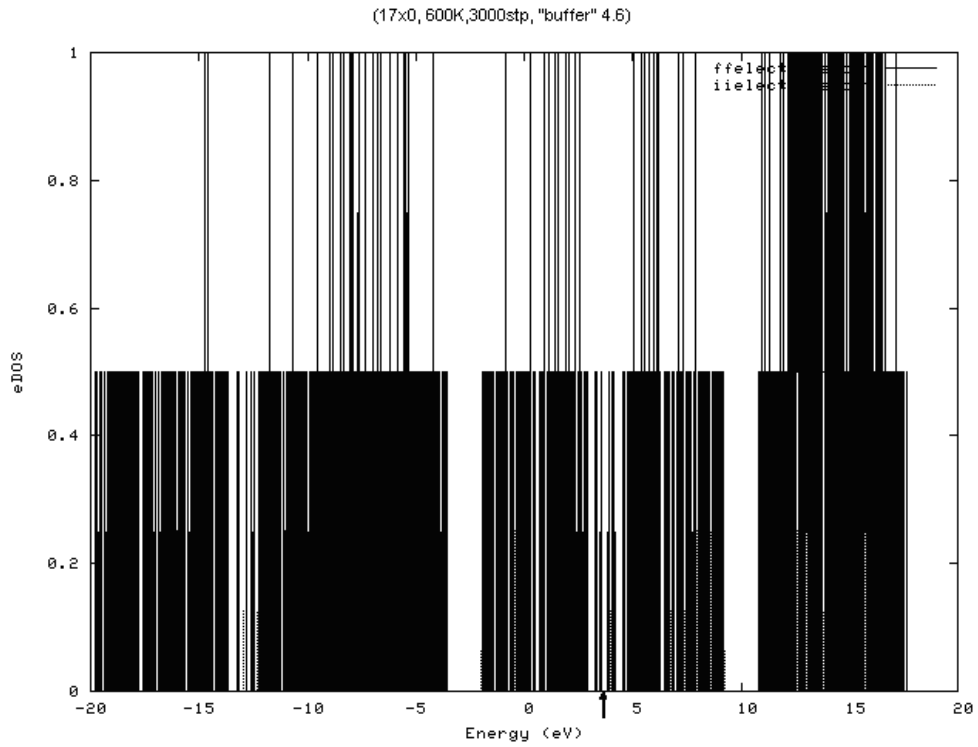
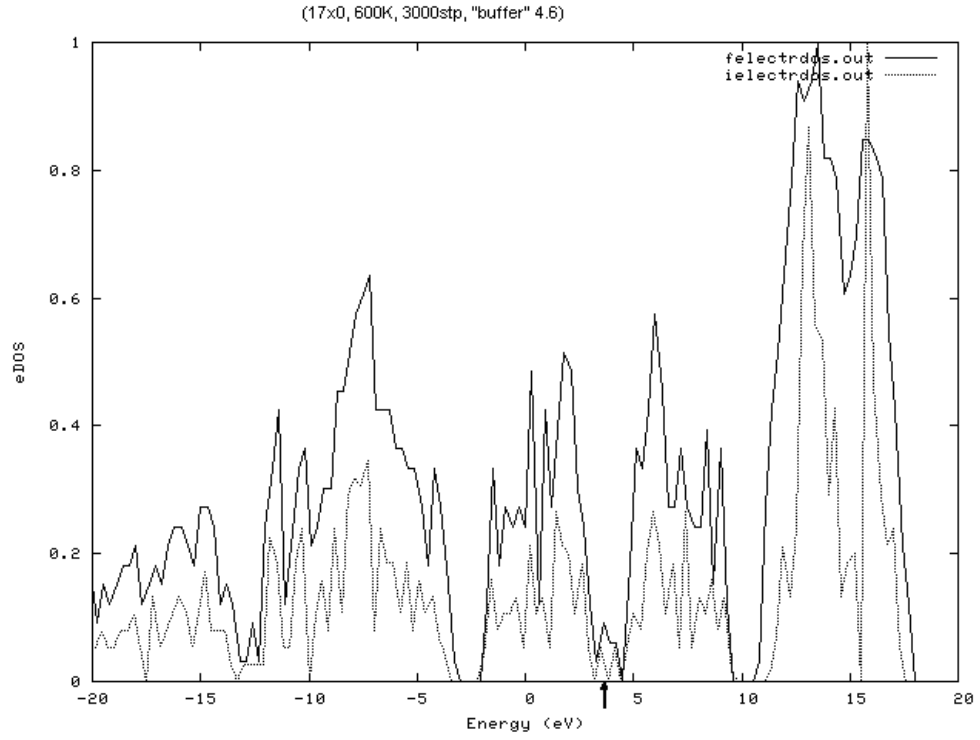
Şekil 5.27 13x0 KNT’ler için 600K, ‘Buffer skin’ Büyüklüğü 4.6, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



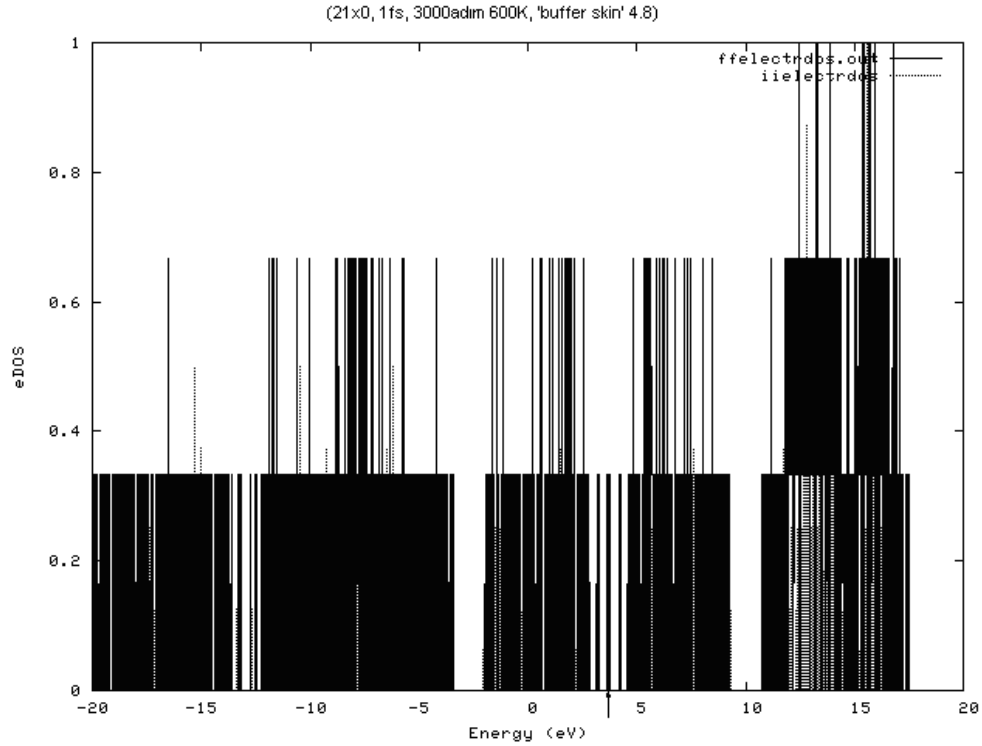
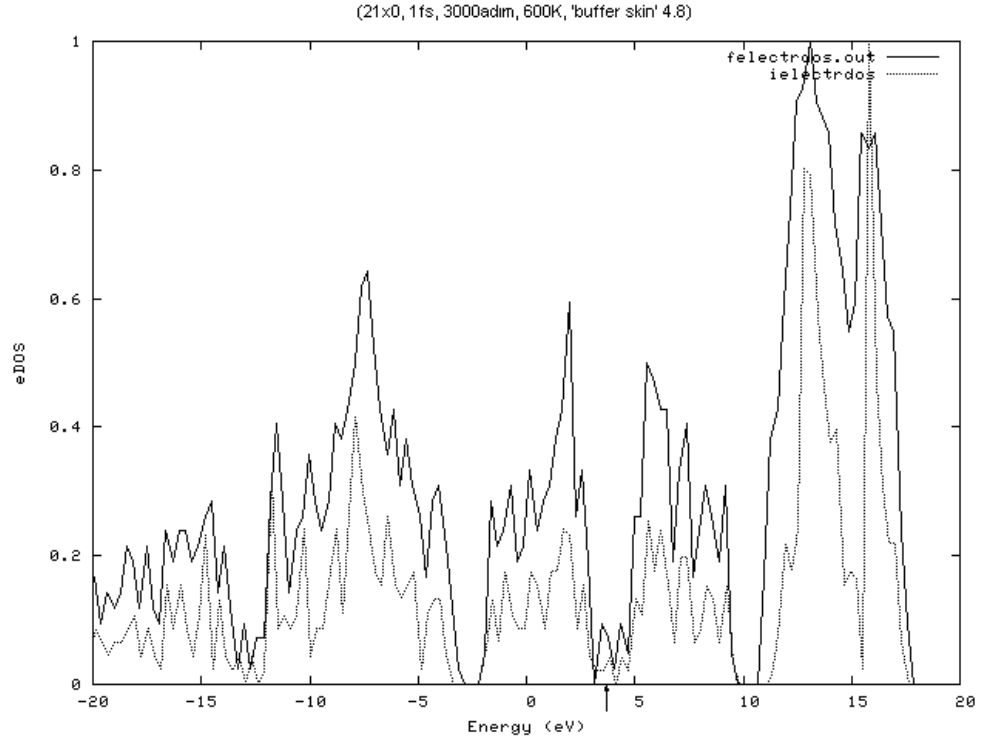
Şekil 5.28 14x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.5 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 5.29 15x0 KNT’ler için 600K, ‘‘Buffer skin’’ Büyüklüğü 4.8 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 5.30 17x0 KNT’ler için 600K, “Buffer skin” Büyüklüğü 4.6 MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 5.31 21x0 KNT’ler için 600 K, “Buffer Skin” Büyüklüğü 4.8, MD adım 3000, dt:1fs, nlayer 20 çalışmaları için eDOS grafikleri.

TDKNT'lerin elektronik özelliğe etkisinin incelemede metalimsi-yarıiletken KNT'ler 9x0, 12x0, 15x0, 21x0 ve gerçek yarıiletken 11x0, 13x0, 14x0, 16x0, 17x0 tüpler seçilmiştir ve bu tüplerin eDOS grafikleri incelenmiştir. Yukarıda incelediğimiz tüplerin "eDOS" grafikleri kullanılarak, enerji bant aralığı (E_{gap}) tablo haline getirilmiştir. (Çizelge 5.10'dan Çizelge 5.19) İletken yoksa yarıiletken KNT'ler grafiklerden ve çizelgeden bakılarak belirlenmiştir. İncelenen (n,0) ile verilen Zigzag KNT'ler yalnızca "n" değerinin 3 sayısının katı olduğu durumlarda metalimsi-yarıiletkendir, diğer durumlarda ise Zigzag KNT'ler her zaman yarıiletken davranış göstermektedir. Deneysel olarak en çok gözlenen KNT'ler için eğrilik etkisiyle ortaya çıkan enerji bandı aralığı çok küçüktür. Daha çok pratik amaçlar için, oda sıcaklığında ısısal enerjileri elektronu balans bandından iletim bandına uyarmak için yeterli olan tüm $n - m = 3j$ olan küçük enerji aralıklı yarıiletken tüpler metalimsi olarak göz önüne alınabilir. Bu betimleme sıkı bağ yaklaşımı üzerine kurulu olup büyük çaplı tüpler $d_t \geq 1$ nm için geçerli olur ve deneysel olarak da kanıtlanmıştır. Çhiral vektörünün ($C_h = (n, m)$), 'n' değeri üçün katı olan 9x0, 12x0, 15x0, 21x0 Zigzag KNT lerin, E_{gap} değerlerinin 0.13 eV, 0.04 eV, 0.62 eV ve 0.23 eV olduğu tespit edilmiştir ve bu KNT' lerinin metalimsi davranış gösterdikleri gösterilmiştir. Fermi enerjisi E_F civarındaki durum yoğunluğu $E = 0$ konumuna getirilmiştir. İncelenen diğer, Yarıiletken nanotüpler için durum yoğunluğu "0" değerine sahiptir. Burada yerleşmiş durum yok boş alan vardır. Yarıiletken TDKNT'lerin (11x0, 13x0, 14x0, 16x0 ve 17x0) E_g değerleri 0.66 eV 0.45 eV, 0.43 eV ve 0.38 eV bulunmuştur ve bu KNT'lerin yarıiletken oldukları belirlenmiştir. Alınan sonuçların teorik ve literatür sonuçları ile karşılaştırılması yapılmıştır.

Yarıiletken nanotüplerin chiral açılarından bağımsız olarak, E_g 'leri $\beta_\pi = 3.3$ eV, $d_0 = a_{c-c}$ (grafin tabakasındaki en yakın iki karbon atomu arası mesafedir) ve dt 'ye bağlıdır. Bu ifadeleri kullanarak yarıiletken KNT'lerin sonuçları literatür sonuçlarıyla kıyaslanma yapılmıştır ve Çizelge 5.20'da verilmiştir. Sonuçlar arasında uygunluk olduğu görülmüştür. Bizim çalıştığımız sonuçlar ile literatür çalışmalarının sonuçlarının değerleri arasında bazı farklılıklar olmasına rağmen iletkenlik davranışları sonuçları uygunluk olmaktadır. Farklılıklar çalışma koşullarının aynı olmamasından kaynaklanmaktadır. Mesela; (11,0) KNT'ün, tüm çalışmalarda yarıiletken ve (12,0) KNT'ler ise daima metalimsi davranış göstermektedir. Durum yoğunluğu metalimsi yarıiletken KNT'ler için E_F Fermi civarında yerleşmiş durumları göstermektedir. Şekil 5.14, Şekil 5.16, Şekil 5.19, Şekil 5.22. Metalimsi-Yarıiletken KNT'lerin (9x0, 12x0, 15x0 ve 21x0) E_{gap} değerleri (0,13 eV, 0,07 eV, 0,04 eV, 0,23 eV) enerji aralıkları daima dardır.

Çizelge 5.20 TDKNT'lerin Enerji bant aralıkları (E_g eV) literatür sonuçları ile karşılaştırılması.

((1) İ. Cabria vd., 2003, (2) X. Benedict vd., 1994, (3) K. Kanamitsu vd., 2002, (4) G. San vd., (2002), (5) O.Dubay vd., 2001, (6) S.Kim vd.,1994, (7) H.Yorikawa vd., 1995, (8) V. Zolyomi vd., 2004, (9) S. Muramatsu vd., 1995.)

$\vec{C}_h = (n, m)$	E_g (eV) (50 adım)	E_g (eV) (3000 adım)	E_g (eV) Kaynaklar (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)
(9,0)	0,11	0,71	0,13(1) 0,17(2) 0,20 (4) 0,09 (6)
(11,0)	0,69	0,72	0,66(1) 1,0(3) 0,13(4) 0,93(8) 0,96(9)
(12,0)	0,04	0,06	0,07(1) 0,08 (4) 0,040 (8)
(13,0)	0,46	0,48	0,45(1) 0,73(4) 0,64(8)
(14,0)	0,53	0,55	0,43(1) 0,90(4) 0,72(8)
(15,0)	0,063	0,062	0,02 (1) 0,14(4) 0,030(5) 0,023(8)
(16,0)	0,41	0,43	0,43(1) 0,61(4) 0,52(5) 0,54(8)
(17,0)	0,45	0,39	0,35(1) 0,58(5) 0,58(8)

5.2 YORUM

Bu çalışmada Zigzag karbon nanotüpler (metallimsi-yarıiletken için 9x0, 12x0, 15x0, ve 21x0 gerçek yarıiletkenler için 11x0, 13x0, 14x0,16x0 ve 17x0'a kadarki tüpler) düşük sıcaklıklardan (0.1K) yüksek sıcaklıklara kadar incelendi. Elektronik durum yoğunluğu (eDOS), Enerji bant aralığı, Fermi enerji değerleri, Fermi-Dirac Dağılım fonksiyonu, Toplam enerjisi, N-mertebeli Sıkı-bağ Moleküler Dinamik Simülasyon laboratuvarında yüksek sıcaklıklara kadar (2100 K) kadar 300K sıcaklık artışlarıyla incelenmiştir. Öncelikle incelenen bütün tüpler için O (N) sonuçlarının O (N³) ile uygun olmasını sağlamamız için ikisinin enerji hata grafikleri belirlenmiştir. Bütün tüpler için O (N) ortalama atom başına toplam enerji değerleri ile O (N³) atom başına toplam enerjisinin farkını minimum yapan değer yani KNT için simülasyon zamanını kısa değerde tutabilmek amacıyla hatanın en az olduğu ilk değer alınarak "Buffer skin" parametreleri belirlenmiştir. Çalışma sırasında kullanılan "Buffer skin" büyüklük parametresi Prof. Dr. Gülay Dereli tarafından yaptırılan Necati Vardar' ın YL tezinden alınmıştır. "Buffer skin" parametresi girildikten sonra, incelenen Zigzag KNT'ler için fiziksel karakteristikleri Moleküler Dinamik (MD) adımına bağlı olarak çalıştırılmıştır. Çalışmalarımızda ilk başta 50 adım ve 3000 adımlar için simülasyonlar yapılarak Fermi enerjileri hesaplanmıştır. Çalışma sırasında her tüp için belirli sıcaklıklar verilmiştir ve sıcaklık yükseldikçe Fermi Enerjisi gittikçe azalma durumun göstermiştir. Böylece sıcaklık yükseldikçe atom başına toplam enerji E_(tot) arttı (yükselme gösterdi). Sıcaklığın gerçek yarıiletken ve metallimsi-yarıiletken karbon nanotüplerin fiziksel karakteristikleri, sıcaklık üzerindeki etkisi düşük sıcaklıklardan 0,1 K'den yüksek sıcaklıklara 2100K kadar incelenmiştir. 0,1 K'den ısıtma işlemi 300K artışlarla uygulanmıştır. Aynı anda (11x0, 15x0 ve 17x0) tüpler için (0.1K, 300K, 600K, 1200K ve 2100K) sıcaklıklarda Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonu hesaplanarak grafiği çizilmiştir. Sıcaklık arttıkça daha alttaki düzeyler boşalırlar. Farklı sıcaklıklar için bakacak olursak, sıcaklık arttıkça elektronlar daha yüksek enerjili durumlara geçebilir ve bu nedenle Fermi fonksiyonunun karakteri değişebilir. Enerjiye bağlı olarak Fermi-Dirac Dağılım Fonksiyonunun değişimi hesaplanarak grafikleri çizilmiştir (Şekil 5.8, Şekil 5.9, Şekil 5.10 ve Şekil 5.11).

Fermi enerji civarındaki elektronik durum yoğunluğu farklı simetrik yapılarıdaki karbon nanotüplerin metallimsi-yarıiletken ve gerçek yarıiletken davranış gösterdiği belirlenmiştir (Şekil 5.14'den Şekil 5.35). Enerji bant aralığı 50 adım ve 3000 adımlar için ayrı ayrı hesaplandı grafikleri çizildi Şekil 5.11, Şekil 5.12, ve Şekil 5.13 ve tablo haline getirildi Çizelge 5.10'dan Çizelge 5.18.

Çalışılmış Zigzag yarıiletken KNT' ler için E_{gap} değerlerini kıyaslayacak olursak (9,0) tüpümüz için 50 adımda 0,11 eV. 3000 adımda ise 0,71 eV literatürlerde 0,13 eV(1), 0,17 eV(2), 0,20 eV (4). (11,0) tüp için 50 adımda 0,69 eV, 3000 adımda ise 0,72 eV, literatürde 0,66 eV (1), 0,13 eV (4), 0,93 eV (8), 0,96 eV(9), (12x0) için 50 adımda 0,04 eV. 3000 adımda ise 0,06 eV literatürde 0,07 eV (1), 0,08 eV (4), 0,040 eV (8). (13x0) tüpümüz için bakacak olursak 50 adımda 0,46 eV, 3000 adımda ise 0,48 eV literatürlerde 0,45 eV(1), 0,73 eV (4), 0,64 eV(8). Bir sonraki tüpümüz (14x0) 50 adımda 0,53 eV 3000 adımda ise 0,55 eV literatürde 0,43 eV(1), 0,90 eV(4), 0,72 eV(4) olmaktadır. (15x0) tüp için 50 adımda 0,063 eV, 3000 adımda 0,062 eV literatürlerde 0,02 eV(1), 0,030 eV(5), 0,023 eV(8), sonraki tüpe bakacak olursak (16x0) için 50 adımda 0,41eV, 3000 adımda ise 0,43 eV literatürlerde 0,43 eV (1), 0,61 eV(4), 0,52 eV (5), 0,54 eV(8). 17x0 tüp için 50 adımda 0,45 eV 3000 adımda ise 0,39 eV literatürlerde 0,35 eV (1), 0,58 eV(5), 0,58 eV(8) olmaktadır. Bu çalışmada Zigzag KNT'lerin teorik ve literatür sonuçları ile karşılaştırılması yapılmıştır ve sonuçların oldukça uygun olduğu tespit edilmiştir.

KAYNAKLAR.

- P. M. Ajayan, T.W. Ebbesen, Rep. Prog. Phys. **60** 1025(1997).
- P. M. Ajayan, H. S. Nalwa Carbon Nanotubes, 329-360, Nanostructured Materials and Nanotechnology, (Derl.), Academic Press. (2000).
- P. N. Dyachov and D. V. Makaev “Bant structure of Carbon Nanotubes” Russian Academy of Sciences Leninski pr 31 Moscow **11** 99 Rusya (1999).
- G. Dereli, C. Özdoğan, Physical Review B **67** 035415 (2003) (a)
- G. Dereli, C. Özdoğan, Physical Review B **67** 035416 (2003) (b)
- G. Dereli, C. Özdoğan ve T. Çagin, “O(N) paralel tight binding molecular dynamics simulation of carbon nanotubes”, Computer Phys. Comm., 148, (2002), pp188-205.
- G. Dereli “Yeni Teknoloji ve Nanobilimde Karbon nanotüp” ders notları (2003)
- G. Dereli, B. Süngü “Temperature dependence of the Tensile Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes: O (N) Tight-Binding MD Simulation” Phys. Rev. 184104 (2007).
- G. Dereli, B.Süngü, C. Özdoğan “ Thermal Stability of Metallic Single Walled Carbon Nanotubes: An O(N) Tight-Binding Molecler Dynamics Simulation Study” nanotechnology 18245704 (2007).
- M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus “Subtitle, Edition Carbon Nanotubes Spinger” Berlin Heidelberg New York (1998).
- G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, and A. Jorio “Unusual Properties and Structure of Carbon nanotubes”.(1998).
- M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, K. Sugihara “Electronic structures of carbon fibers based on C₆₀ ,.Phys. rev B **46** 1804-11(1992).
- N. Hamada, S. Saito, and A.Oshiyama, Phys, Rev. Lett. **68**,1579 (1992)
- J. Kürti, V. Zolyomi, M. Kortesz ve G. Sun “The geomettry and radial breathing mode of carbon nanotubes” New Journal of Physics 3 October **5** 125. 1-125. 21 (2003).
- R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, Appl. Phys. Lett. **60**, No 18, (1992).
- R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus: Physical Properties of Carbon Nanotubes. (Imperial College Press, London, (1998).

- G. Sun, J. Kürti, M. Kertesz, and R. Baughman, J. Phys. Chem. B **107**, 6924 (2003)
- S. Iijima, Nature 354 **56-58**. (1991).
- S. Iijima “Helical microtubules of graphitic carbon” NEC Corporation, Fundamental Research Laboratories 34 Miyukigaoka, Tsukuba Ibaraki 305 Japan (1998).
- R. Iijima, P. M. Ajayan, and T. Ichihashi, Appl Phys. Lett. **69**, 3100. (1992).
- P. H. Lambw, A. A. Lucas and J. N. Charlier “Electronic properties of carbon nanotubes containing” Phys. Chem Solids Vol 58 No11 pp.1833-1837, 1997.
- T. W. Ebbesen, E. Dujardo, and A. Krishnan, P. N. Yianilos, “Young’s Modulus of Single_Woiled Nanotubes”, Physical Review B **58**(20) pp.14013-14019, 15/Nov (1998).
- T.W. Ebbesen , “Carbon Nanotubes, Preparation and Properties”, CRC Press, Boca Raton, (1997).
- Y. İ. Prylutsky, S. S. Dirov, O. V. Ogloblya, E.V. Buzaneva “ Molecular dynamics simulation of mechanical, vibrational and electronic properties of carbon nanotubes” Computational Materials Science **17** 352-355 (2000).
- Y. İ. Prylutsky, O.V. Ogloblya, P. C. Eklund, p. Scharff, Synthetic Metals 121 (2001).
- V. N. Popov “Carbon nanotubes properties and application” Sofia Bulgaristan R 43 **61** (2004)
- J. Peter, F. Haris “Carbon Nanotubes and related structures” Cambridge University Press ISBN 0-521 554462 (1999).
- H. Takeda and K. Yoshino “Electronic band structures of carbon nanotubes with nanoscale periodic pores” 565-0871, Japan 3 October (2002)
- “Nanobilim ve Nanoteknoloji stratejileri” , Vizyon 2023 projesi nanoteknoloji strateji grubu Ağustos Ankara (2004).
- C. ERGUN “Nano Faz Malzemeler”, Bilim ve Teknik, sayı 360, S **95-96**. (1997).
- “Bilim ve Teknik” Dergisi Eylül-(2002).
- N. Vardar “Farklı simetrik yapılardaki Karbon Nanotüplerin durum yoğunluklarının simülasyonu.” Yüksek Lisans (2005).

İNTERNET KAYNAKLARI

<http://www.netlib.com>

<http://www.photon.t.u.-tokyo.ac.jp/mauyama/> nanotube.

www.yildiz.edu.tr/~gdereli/lab_homerpage

<http://www.cordis.lu/nanotechnology/src/publication.htm>

EK I

 Δt BELİRLENMESİ

$$x = (\Delta t)^2 * a = (\Delta t)^2 * F / m = (\Delta t)^2 * E / (x * m)$$

$$\Delta t = [x^2 * m / E]^{1/2} = ((10^{10} A)^2 * (1akb / 1.66 \times 10^{-27}) / (eV / 1,602 \times 10^{-19}))^{1/2} \equiv \text{saniye}$$

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

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

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	14.11.1983
Doğum yeri	KIRGIZİSTAN
Lise	Akçaluu-57 Kız Lisesi
Lisans	Celelabad Devlet Üniversitesi Uygulamalı matematik ve bilgisayar Osh Devlet Üniversitesi Yeni Bilgiler Teknolojisi Uygulamalı matematik ve bilgisayar.
Yüksek Lisans	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı, Nanoteknoloji

