

**BOR NANOŞERİTLERİNİN ELEKTRONİK VE YAPISAL
ÖZELLİKLERİ**

Esra EROĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2012

ANKARA

Esra EROĞLU tarafından hazırlanan “BOR NANOŞERİTLERİNİN ELEKTRONİK VE YAPISAL ÖZELLİKLERİ” adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

.....

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Mehmet KABAK

.....

Fizik, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Doç. Dr. Yasemin ÇİFTÇİ

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Tarih:15 /06/2012

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Bilal TOKLU

.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Esra EROĞLU

BOR NANOŞERİTLERİNİN ELEKTRONİK VE YAPISAL ÖZELLİKLERİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Esra EROĞLU

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2012

ÖZET

Bu çalışmada, farklı geometrilere sahip saf bor nanoşeritler ve farklı konumlardaki bor atomlarının karbon ve azot atomlarıyla değiştirilmesiyle oluşturulan yeni nanoşeritler için yoğunluk fonksiyonu teorisi kapsamında ilk-prensipier yaklaşımı kullanılarak geometrik optimizasyonları yapıldı. Yapıların elektronik ve yapısal özellikleri incelendi. Enerjitik kararlılıkları, bağ uzunlukları, atomik yükleri ve bağ popülasyon değerleri, band yapıları ve durum yoğunluğu gibi elektronik özellikleri hesaplandı. Ayrıca, bazı yapılara farklı sayılarda hidrojen ilave edilerek, mevcut yapısal ve elektronik özelliklerinin hidrojen konsantrasyonuna bağıllığı araştırıldı. Sonuçlar birbirleriyle ve mevcut literatürle karşılaştırma yapılarak çizelge ve şekiller halinde sunuldu. Elde edilen yapıların metal olduğu belirlendi.

Bilim Kodu : 202.1.147
Anahtar Kelimeler : Nanoşerit, bor, elektronik yapı, YFT
Sayfa Adedi : 88
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

**STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF BORON
NANORIBBONS
(M.Sc. Thesis)**

Esra EROĞLU

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
June 2012**

ABSTRACT

In this study, for different geometries of boron nanoribbons and the new nanoribbons which are produced by changing the boron atoms at different sites with carbon and also nitrogen atoms are calculated by geometry optimization within density functional theory. The structural and electronic properties of structures are investigated. For constituent structures electronic properties as energetic stability, bond lengths, atomic charges and bond population values, band structures and density of states are calculated. In addition to, adding hydrogens which have different counts to some structures, hydrogen concentration correlation of structural and electronic properties which existed are investigated. The results as table and figure are presented by comparing each other and literature that existed. The structures that have obtained are determined to be metals.

Science Code : 202.1.147

Key Words : Nanoribbon, boron, electronic structure, DFT

Page Number: 88

Adviser : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla, engin tecrübesi ve yorumlarıyla, gösterdiği büyük sabırla beni yönlendiren danışman hocam Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK'e ve yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım, yardımını, desteğini ve emeğini hiçbir zaman esirgemeyen hocam Dr. Sezgin AYDIN'a ve eğitim hayatım boyunca beni her zaman destekleyen aileme çok teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
RESİMLERİN LİSTESİ	xiv
SİMGELER VE KISALTMALAR	xv
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL BİLGİLER	3
2.1. Kristal Yapı	3
2.1.1. Birim hücre	5
2.1.2. Örgü ve örgü noktaları	5
2.1.3. Bravais hücreleri ve bravais örgüleri	5
2.1.4. Üç boyutlu örgü türleri	7
2.1.5. Moleküler modelleme	9
3. BOR	10
3.1. Bor Elementinin Fiziksel ve Kimyasal Özellikleri	11
3.2. Bor Madeninin Önemi ve Kullanım Alanları	13
4. TEORİ VE METOTLAR	17
4.1. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)	17
4.2. Geometrik Optimizasyon	17

Sayfa

4.3. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA).....	18
4.4. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA).....	19
4.5. CASTEP Paket Programı.....	19
5. HESAPLAMALAR	21
5.1. Doğrusal Kenarlı Bor Nanoşeritlerinin (LBNR) Yapısal ve Elektronik Özellikleri.....	23
5.1.1. Doğrusal kenarlı B ₁₄ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	51
5.1.2. Doğrusal kenarlı B ₁₃ C1 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	54
5.1.3. Doğrusal kenarlı B ₁₃ C2 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	56
5.1.4. Doğrusal kenarlı B ₁₃ C4 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	58
5.1.5. Doğrusal kenarlı B ₁₃ C5 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	60
5.1.6. Doğrusal kenarlı B ₁₃ N1 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	62
5.1.7. Doğrusal kenarlı B ₁₃ N2 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	64
5.1.8. Doğrusal kenarlı B ₁₃ N4 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	66
5.1.9. Doğrusal kenarlı B ₁₃ N5 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	68
5.2. Zigzag Kenarlı Bor Nanoşeritlerinin (ZBNR) Yapısal ve Elektronik Özellikleri.....	70
5.2.1. Zigzag kenarlı B ₂₈ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri	73
5.2.2. Zigzag kenarlı B ₂₈ H ₁ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri ..	75

Sayfa

5.2.3. Zigzag kenarlı $B_{28}H_2$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri...	77
5.2.4. Zigzag kenarlı $B_{28}H_3$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri...	79
6. SONUÇ VE ÖNERİLER	82
KAYNAKLAR	84
ÖZGEÇMİŞ	88

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Elementlerin kristal yapıları.....	3
Çizelge 2.2. Üç boyutlu kristal sistemlerin yapısal özellikleri	8
Çizelge 3.1. Bor elementinin atomik ve fiziksel özellikleri	12
Çizelge 5.1. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritleri için toplam enerjileri, bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve enerji farkları.....	31
Çizelge 5.2. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritleri için toplam enerjileri, bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve enerji farkları.....	31
Çizelge 5.3. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritleri için atomik yük verileri	38
Çizelge 5.4. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritleri için atomik yük verileri	39
Çizelge 5.5. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ uzunlukları	42
Çizelge 5.6. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ uzunlukları	43
Çizelge 5.7. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ popülasyonu verileri.....	47
Çizelge 5.8. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ popülasyonu verileri.....	48
Çizelge 5.9. Zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}Hn$ ($n=1,2,3$) nanoşeritlerinin toplam enerjileri, bağlanma enerjileri ve enerji farkları.....	71

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Bir kristal için: (a) birim hücre (b) kristal hücre	5
Şekil 2.2. Bravais hücreleri: (a) basit birim hücre (b) hacim merkezli birim hücre (c) yüzey merkezli birim hücre	6
Şekil 2.3. Üç boyutlu kristal sistemler: (a) basit kübik (b) yüzey merkezli kübik (c) cisim merkezli kübik (d) basit tetragonal (e) cisim merkezli tetragonal (f) hegzagonal (g) basit ortorombik (h) cisim merkezli ortorombik (ı) taban merkezli ortorombik (i) yüzey merkezli ortorombik (j) rombohedral (k) basit monoklinik (l) taban merkezli monoklinik (m) triklinik.....	7
Şekil 4.1. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi grafiği	18
Şekil 5.1. LBNR-C kristal yapılar için birim ve süper hücre.....	24
Şekil 5.2. LBNR-N kristal yapılar için birim ve süper hücre.....	27
Şekil 5.3. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için toplam enerji grafiği....	34
Şekil 5.4. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için toplam enerji grafiği....	34
Şekil 5.5. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için bağlanma enerjisi grafiği.....	35
Şekil 5.6. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için bağlanma enerjisi grafiği.....	36
Şekil 5.7. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için oluşum entalpisi grafiği.....	37
Şekil 5.8. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için oluşum entalpisi grafiği.....	37
Şekil 5.9. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için atomik yük dağılımı	40
Şekil 5.10. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için atomik yük dağılımı ..	40
Şekil 5.11. Doğrusal kenarlı bor nanoşeritler için bağ konumları	41
Şekil 5.12. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için bağ uzunluğu grafiği ..	44

Şekil	Sayfa
Şekil 5.13. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için bağ uzunluğu grafiği	44
Şekil 5.14. C2 ve C3 atomlarının bulundukları hekzagondaki bağ uzunlukları	46
Şekil 5.15. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Cn$ nanoşeritleri için bağ Mulliken popülasyonu grafiği	49
Şekil 5.16. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}Nn$ nanoşeritleri için bağ Mulliken popülasyonu grafiği	49
Şekil 5.17. B_{14} nanoşeritinin band yapısı	52
Şekil 5.18. B_{14} nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	52
Şekil 5.19. Doğrusal kenarlı bor nanoşeritleri için bor ve karbon atomlarının konumları	53
Şekil 5.20. $B_{13}C1$ nanoşeritinin band yapısı	55
Şekil 5.21. $B_{13}C1$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	55
Şekil 5.22. $B_{13}C2$ nanoşeritinin band yapısı	57
Şekil 5.23. $B_{13}C2$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	57
Şekil 5.24. $B_{13}C4$ nanoşeritinin band yapısı	59
Şekil 5.25. $B_{13}C4$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	59
Şekil 5.26. $B_{13}C5$ nanoşeritinin band yapısı	61
Şekil 5.27. $B_{13}C5$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	61
Şekil 5.28. $B_{13}N1$ nanoşeritinin band yapısı	63
Şekil 5.29. $B_{13}N1$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	63
Şekil 5.30. $B_{13}N2$ nanoşeritinin band yapısı	65
Şekil 5.31. $B_{13}N2$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	65
Şekil 5.32. $B_{13}N4$ nanoşeritinin band yapısı	67
Şekil 5.33. $B_{13}N4$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	67

Şekil	Sayfa
Şekil 5.34. $B_{13}N_5$ nanoşeritinin band yapısı	69
Şekil 5.35. $B_{13}N_5$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	69
Şekil 5.36. Zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}H_n$ ($n=1,2,3$) nanoşeritinin toplam enerjisi	72
Şekil 5.37. Zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}H_n$ ($n=1,2,3$) nanoşeritinin bağlanma enerjisi	73
Şekil 5.38. B_{28} nanoşeriti için: a) birim hücre, b) süper hücre	74
Şekil 5.39. B_{28} nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	74
Şekil 5.40. $B_{28}H_1$ nanoşeriti için: a) birim hücre, b) süper hücre	76
Şekil 5.41. $B_{28}H_1$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	76
Şekil 5.42. $B_{28}H_2$ nanoşeriti için: a) birim hücre, b) süper hücre	78
Şekil 5.43. $B_{28}H_2$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	78
Şekil 5.44. $B_{28}H_3$ nanoşeriti için: a) birim hücre, b) süper hücre	80
Şekil 5.45. $B_{28}H_3$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)	80

RESİMLERİN LİSTESİ**Resim****Sayfa**

Resim 3.1. Boraks görüntüsü.....	10
----------------------------------	----

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
Å	Angstrom
eV	Elektron volt
GPa	Giga pascal
MPa	Mega pascal
W	Weber
B	Bor
C	Karbon
N	Azot
m	Metre
cm	Santimetre
nm	Nanometre
K	Kelvin
F	Fahrenheit
°C	Santigrat derece
g	Gram
J	Joule
kJ	Kilo joule
kcal	Kilo kalori
mol	Mol
s	Saniye
ms	Milisaniye
atm	Atmosfer

Kısaltmalar**Açıklama****CASTEP**

Cambridge Serial Total Energy Package

DFT

Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

GGA

Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı

LDA

Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

NLGA

Yerel Olmayan Yoğunluk Yaklaşımı

DOS

Density of States (Durum Yoğunluğu)

BNR

Boron Nanoribbon (Bor Nanoşerit)

LBNR

Doğrusal Kenarlı Bor Nanoşerit

LBNR-C

Doğrusal Kenarlı-Karbonlu Bor Nanoşerit

LBNR-N

Doğrusal Kenarlı-Azotlu Bor Nanoşerit

ZBNR

Zigzag Kenarlı Bor Nanoşerit

1. GİRİŞ

“Mikro-teknoloji” olarak adlandırılan teknolojiler 1980’li yılların başından itibaren günlük hayatımızın vazgeçilmez unsurları haline geldi. Boyutları giderek küçülen güçlü bilgisayarlar, cep telefonları, kameralar vs. ticari ve sosyal hayatta umulmadık boyutlara ulaştı [1].

Yapılan araştırmalar sayesinde teknolojiideki yenilikler her geçen gün hızla artmaktadır. Gündelik olarak kullandığımız birçok elektronik eşyanın kullanım fonksiyonları gelişirken, boyutları ise küçülmektedir. Teknolojiideki bu gelişme, boyutlardaki küçülmeyi de beraberinde getirdiğinden bu yeni araştırma ve uygulama alanı nanoteknoloji adını almaktadır [2].

Bir nanometre (nm) bir metrenin milyarda biri yani bir milimetrenin milyonda biri ya da başka bir deyişle insan saçı çapının yaklaşık yüz binde biridir. Nanoteknoloji, nano boyutlardaki yapıların araştırılması, üretilmesi ve kullanımlarıyla meşgul olur. Bu haliyle nanoteknoloji atom ve moleküllerin küçücük dünyasıyla uğraşır. Bir nanometre uzunluğa, yaklaşık 4 ila 6 arası atom yan yana sıralanabilir [3].

Bilimsel yenilikler ve teknolojik gelişmeler açısından önemli ve ilginç uygulama alanlarından biri olan nanoteknoloji, son zamanlarda dikkatleri üzerine çekmeyi başarmıştır. Nanoteknoloji sadece nano bilim alanında sınırlı kalmayıp fizik, biyoloji, kimya, endüstri ve mühendislik alanlarının yanında özellikle de insan hayatını etkileyecek olan tıp alanında çok değişik uygulamalara sahiptir [4]. Yeni bir teknoloji olduğundan, birçok elementin bilinmeyen özellikleri keşfedilmekte ve insan hayatını kolaylaştırabilecek farklı nitelikler ortaya çıkmaktadır [4]. Nanoteknolojiyi bu kadar ilginç kılan unsur; malzemelerin, nano boyutta makro dünyadan daha farklı davranmalarıdır. Külçe şeklindeki altın başka maddelerle reaksiyona girmek istemezken, nano boyuttaki altında bu durumun tam tersi gözlenir. Kuantum etkileri yüzünden maddeler, nano boyutta farklı özellikler ortaya koyarlar [5].

Nanoteknolojinin en önemli uygulama alanlarından biri de nanoşeritler (nanoribbon) dir. Bu alanla ilgili pek çok bilimsel çalışmaya rastlamak mümkündür. Özellikle de karbon nano yapılar bu tür çalışmaların önderliğini üstlenmektedir. Hatırlanacağı üzere 2010 Nobel Ödülü bir nano yapı olan Grafen'i keşfedenlere verilmiştir [6].

Bu çalışmada bir nano yapı olan bor nanoşeritlerinin karakteristik özellikleri incelendi. Daha önceki çalışmalardakine benzer şekilde, farklı geometrilerdeki bor nanoşeritleri (BNR) optimize edilerek bunların yapısal ve elektronik özellikleri karşılaştırıldı. Doğrusal ve zigzag kenarlı olmak üzere iki farklı geometriye sahip saf bor nanoşeritler üretildi. Doğrusal kenarlı saf bor nanoşeritlerde, seçilen bir hekzagon boyunca farklı konumlarda bulunan bor atomları karbon ve azot atomlarıyla değiştirilerek yeni nanoşeritler elde edildi ve bunlar optimize edilerek yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Ayrıca zigzag kenarlı saf bor nanoşeritlere farklı sayılarda ve konumlarda hidrojen atomları eklenerek yine bunların yapısal ve elektronik özellikleri araştırıldı. Elde edilen sonuçlar saf yapıyla karşılaştırıldı.

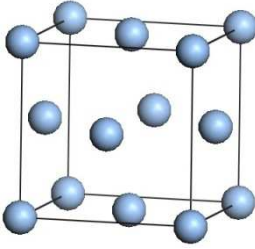
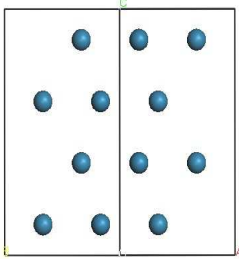
Tüm yapılar ilk-prensipier (First Principles) yaklaşımı kapsamında genelleştirilmiş gradyent yaklaşımının (GGA) PW91 fonksiyoneline ve ultrasoft pseudopotansiyeller kullanılarak CASTEP paket programıyla hesaplandı. İlk prensip hesaplarından elde edilen bağ karakteristikleri ve kristal parametreleri yardımıyla yapıların elektronik ve yapısal özellikleri ele alındı.

2. TEMEL BİLGİLER

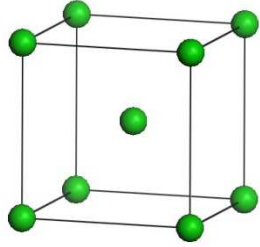
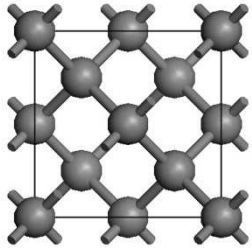
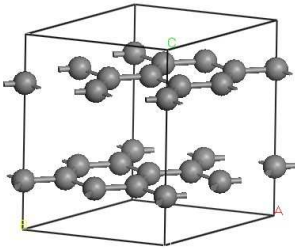
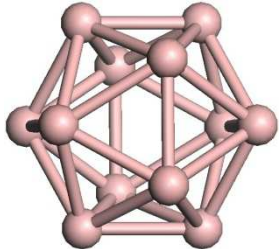
2.1. Kristal Yapı

Katıhal fiziğinin başlıca ilgi alanı kristaller ve bu kristallerdeki elektronlardır. Bir kristal kararlı bir ortamda büyümeye başladığında meydana gelen yapı, birbirine özdeş yapıtaşlarının art arda eklenmesiyle oluşur. Bu yapıtaşları tek atomlar veya atom grupları olabilir. O halde kristal, atom gruplarından oluşan üç boyutlu bir örgüdür [7].

Çizelge 2.1. Elementlerin kristal yapıları [8]

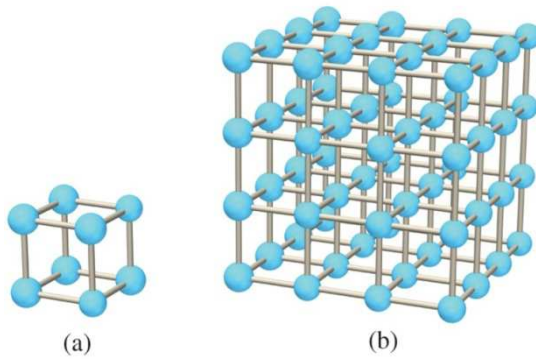
	a) YÜZEY MERKEZLİ KÜBİK YAPI Bu yapıya; Ag, Al, Au, Cu, Ir, Ni, Pb, Pd, Pt, ve Rh metalleri ile Ar, Kr, Ne ve Xe soygazlarında rastlanır.
	b) ALTİGEN SIKI-PAKETLİ YAPI Bu yapıya; Be, b-Ca, Cd, a-Co, Hf, Mg, Os, Re, Ru, Sc, b-Sr, Tc, Ti, Tl, Y, Zn ve a-Zr elementlerinde rastlanır.

Çizelge 2.1. (Devam) Elementlerin kristal yapıları

	c) CİSİM MERKEZLİ KÜBİK YAPI Bu yapıya; Ba, Cr, Cs, α-Fe, K, Li, Mo, Na, Rb, Ta, V ve W elementlerinde rastlanır.
	d) ELMAS YAPI Bu yapıya sahip maddelerdeki atomlar bir düzgün dört yüzlünün köşelerinde bulunurlar. Karbonun elmas allotropu bu yapıya bir örnektir.
	e) GRAFİT YAPI Bu yapıda atomlar katmanlar oluşturur. Katmanlardaki atomlar bir altıgenin köşelerine yerleşmiştir. Karbonun grafit allotropu bu yapıya örnek verilebilir.
	f) BORUN YAPISI Saf bor yapıları genel olarak şekildeki gibi icosahedral (12 atomlu) yapılardan oluşur.

2.1.1. Birim hücre

Kristal yapının en küçük birimidir. Genelde olabilen en fazla simetrideki bu parça, bir, iki veya üç boyutta kaydırıldığında bütün kristali oluşturur. Toplam yedi tane üç boyutlu kristal birim hücre şekli mevcuttur. Bunları tanımlarken birim hücrenin kenarları ve açıları arasındaki bağlantılar kullanılır [9].



Şekil 2.1. Bir kristal için: (a) birim hücre (b) kristal hücre [10]

2.1.2. Örgü ve örgü noktaları

Her noktanın diğer noktalarla özdeş bir ortamda, sınırsız olarak sıralanmasına *örgü* denir. Atomların merkezlerinden geçmeleri şart olmamakla birlikte, asıl kristalin yapıldığı bir asimetrik birimin, atomun, iyonun, molekülün, iyon grubu veya molekül grubunun ortak yerlerini belirten noktalara *örgü noktaları* denir [9].

2.1.3. Bravais hücreleri ve bravais örgüleri

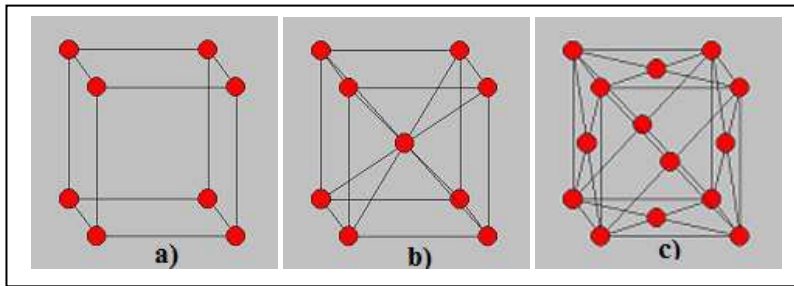
4 temel bravais hücresi mevcuttur. Bunlar birim hücredeki genel atom dağılımlarını gösterir. Bir birim hücre *basit*, *hacim merkezli*, *yüzey merkezli* veya *yan merkezli* olabilir.

Basit birim hücre; basit küpün 8 kenarına da birer tane atom yerleştirilmiştir.

Hacim merkezli birim hücre; basit küpün 8 kenarı yanı sıra küpün merkezine de 1 atom yerleştirilmiştir.

Yüzey merkezli birim hücre; basit küpün 8 kenarı yanı sıra, küpün 6 yüzeyinin merkezlerinde de atomlar yerleştirilmiştir.

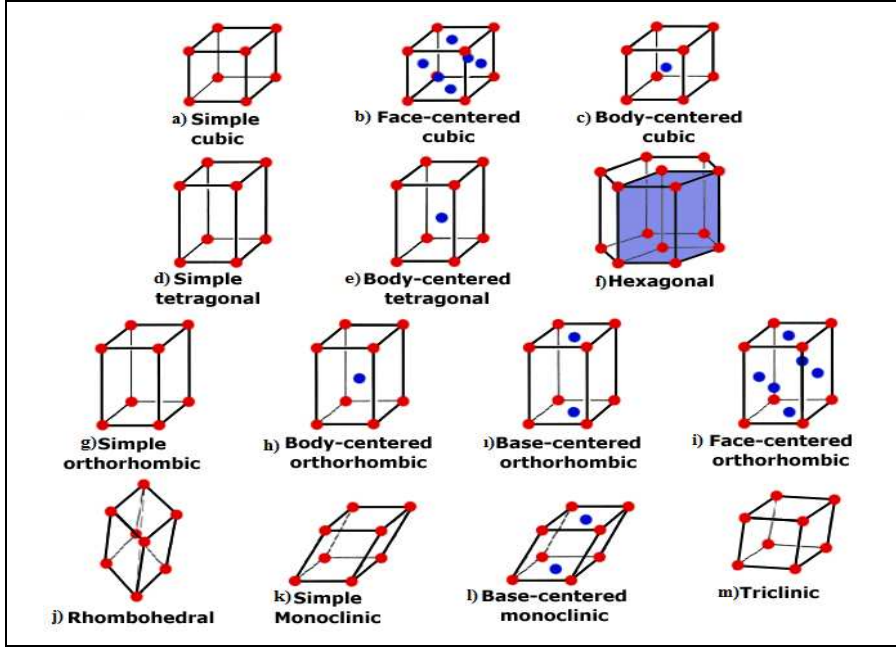
Yan merkezli birim hücre; dörtgen prizmanın 8 köşesi yanı sıra, alt ve üst yüzeylerinin ortasına da birer atom yerleştirilmiştir [9].



Şekil 2.2. Bravais hücreleri: (a) basit birim hücre (b) hacim merkezli birim hücre (c) yüzey merkezli birim hücre [9]

2.1.4. Üç boyutlu örgü türleri

Üç boyutlu noktasal simetri grubu 14 farklı örgü türü gerektirir. Hücre yapısına göre ayrılmak istendiğinde 7 farklı hücre türüne dayanan sistemler şeklinde gruplandırılırlar [7].



Şekil 2.3. Üç boyutlu kristal sistemler: (a) basit kübik (b) yüzey merkezli kübik (c) cisim merkezli kübik (d) basit tetragonal (e) cisim merkezli tetragonal (f) hegzagonal (g) basit ortorombik (h) cisim merkezli ortorombik (i) taban merkezli ortorombik (j) yüzey merkezli ortorombik (k) rombohedral (l) basit monoklinik (m) taban merkezli monoklinik (n) triklinik [11]

Çizelge 2.2. Üç boyutlu kristal sistemlerin yapısal özellikleri [12-13]

Sistem	Eksen Uzunluk ve Açılar	Bravais Örgüsü	Örgü Sembolü
Kübik	$a=b=c;$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit Cisim merkezli Yüzey merkezli	P I F
Tetragonal	$a=b\neq c;$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit Cisim merkezli	P I
Ortorombik	$a\neq b\neq c;$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Basit Cisim merkezli Yan merkezli Yüzey merkezli	P I C F
Rombohedral	$a=b=c;$ $\alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$	Basit	P
Hekzagonal	$a=b\neq c;$ $\alpha=\beta=90^\circ;$ $\gamma=120^\circ$	Basit	P
Monoklinik	$a\neq b\neq c;$ $\alpha=\gamma=90^\circ;$ $\beta\neq 90^\circ$	Basit Yan merkezli	P C
Triklinik	$a\neq b\neq c;$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90^\circ$	Basit	P

2.1.5. Moleküler modelleme

Bir molekülün özelliklerinin fizik yasalarından hareketle bilgisayar ortamında hesaplanmasına moleküler modelleme denir. Bu alanda çalışanlar genellikle yaygın olarak kullanılan paket programlarla çalışırlar ve daha çok var olan metotları kullanırlar. Moleküler modellemenin fizik, kimya, biyoloji, ilaç sanayi ve malzeme bilimi gibi geniş bir uygulama alanı vardır [14]. Bu çalışmada, bir paket program olan CASTEP kullanılmıştır.

3. BOR



Resim 3.1. Boraks görüntüsü [15]

Bor, ayrı bir element olarak ilk defa 1808’de Fransa’da Gay-Lussac, Baron L.J. Thenard ve İngiltere’de Sir Humprey Davy tarafından varlığı ortaya konulduğunda, bor bileşikleri birçok uygarlık tarafından asırlardır kullanılıyordu. Örneğin, Mısırlılar ve Mezopotamya uygarlıkları, bazı hastalıkların tedavisinde ve ölülerin mumyalanmasında boraks kullanıyorlardı.

M.Ö. 800 yıllarında Çinliler porselen cilası olarak, Himalayalar’da Babilonlar kıymetli metallerin eritilmesinde boraks kullanmışlardır. Ayrıca 2000 yıllık Arapça ve Farsça yazıtlarda da borakstan söz edildiği bilinmektedir [16].

Çeşitli metal veya ametal elementlerle yaptığı bileşiklerin gösterdiği farklı özellikler, bor bileşiklerinin birçok endüstride kullanılmasına olanak sağlamaktadır. Bor, bileşiklerinde metal dışı bileşikler gibi davranır, ancak; farklı olarak saf bor, karbon gibi elektrik iletkenidir. Kristalize bor, görünüm ve optik özellikleri açısından ilginç niteliklere sahiptir [17].

3.1. Bor Elementinin Fiziksel ve Kimyasal Özellikleri

Bor, periyodik tabloda “B” simgesi ile gösterilen, metalle ametal arası yarıiletken özelliğe sahip bir elementtir. Periyodik cetvelin 3A grubunun ilk ve en hafif üyesidir.

Bor doğada serbest halde bulunmaz. Doğada yaklaşık 230 çeşit bor minerali olduğu bilinmektedir. Yaygın olarak bulunanlardan bir tanesi Turmalin’ dir. Ancak; sanayide Tinkal, Kernit, Kolemanit ve Üleksit kullanılmaktadır.

Bor elementinin kimyasal özellikleri, morfolojisine ve tane büyüklüğüne bağlıdır. Mikron ebadındaki amorf bor kolaylıkla ve bazen şiddetli olarak reaksiyona girerken kristalin bor kolay reaksiyon vermez. Bor, yüksek sıcaklıkta su ile reaksiyona girerek borik asit ve bazı yan ürünleri oluşturur. Mineral asitleri ile reaksiyonu, konsantrasyona ve sıcaklığa bağlı olarak yavaş veya patlayıcı olabilir ve ana ürün olarak borik asit oluşur.

Bor elementi ^8B , ^{10}B , ^{11}B , ^{12}B , ^{13}B izotoplarından oluşmaktadır. En kararlı izotopları ise ^{10}B ve ^{11}B ’dir. ^{10}B izotopu, çok yüksek termal nötron tutma özelliği gösterir. Böylelikle nükleer malzemeler ve nükleer enerji santrallerinde kullanılabilir. Türkiye’de ^{10}B izotop oranı yüksek bor cevher yatakları bulunmaktadır.

Bor, amorf ve kristalin polimorf olmak üzere, çeşitli allotropik formlarda bulunur. Alfa ve beta rombohedral formlar en çok çalışılmış olan polimorflardır. Alfa rombohedral strüktür, 1200°C ’nin üzerinde bozunur ve 1500°C ’de beta rombohedral form oluşur. Amorf form yaklaşık 1000°C ’nin üzerinde beta rombohedrale dönüşür ve her türlü saf bor ergime noktasının üzerinde ısıtılıp tekrar kristalleştirildiğinde beta rombohedral forma dönüşür [18].

Bor yanıcıdır, fakat tutuşma sıcaklığı yüksektir. Buna ilaveten yanma sonucunda kolaylıkla aktarılabilecek katı ürün vermesi ve çevreyi kirletecek emisyon açığa çıkarmaması gibi bir özelliğe sahip olduğundan katı yakıt hücresi olarak kullanılmaktadır [19].

Çizelge 3.1. Bor elementinin atomik ve fiziksel özellikleri [18]

Atom numarası	5
Periyot	2
Atom ağırlığı	10,811 ± 0,005 g/mol
Elektron dizilimi	1s ² 2s ² 2p ¹
Maddenin hali	Katı (20°C; 1 atm)
Yoğunluk (Katı)	2,34 g/cm ³ (300K)
Sıvı haldeki yoğunluğu	2,08 g/cm ³
Ergime noktası	2573 °K ; 2300 °C ; 4172 °F
Kaynama noktası	4275 °K; 4002 °C ; 7236 °F
Ergime ısısı	50,2 kJ/mol
Buharlaşma ısısı	480 kJ/mol; 128 k cal / g atom
Isı kapasitesi	11,087 (25 °C) J/(mol·K)
Kristal yapısı	Rombohedral
Elektronegatifliği	2,04 Pauling ölçeği
İyonlaşma enerjisi	800,6 kJ/mol; 191 kcal /g atom
Atom yarıçapı	85x10 ⁻³ nm
Atom yarıçapı (hes.)	87x10 ⁻³ nm
Kovalent yarıçapı	82x10 ⁻³ nm
Isıl iletkenlik	27,4 W/(m·K)
Ses hızı	16200 m/s (25 °C)
Mohs sertliği	9,3
Vickers sertliği	39500 MPa [20]

3.2. Bor Madeninin Önemi ve Kullanım Alanları

Ülkemiz yaklaşık 2,5 milyar ton bor rezervleriyle dünya bor rezervlerinin %64'üne sahiptir. Geri kalan %14'ü A.B.D. %22'si ise Rusya, Kazakistan, Çin, Peru, Arjantin ve Şili'de bulunmaktadır. Türkiye dışındaki ülkelerde bulunan bor, dünyanın ihtiyacını en fazla 60 yıl karşılayabilecek durumdadır. Türkiye'nin ise en az 400 yıllık rezervi bulunmaktadır.

Son derece hafif ve dayanıklı malzemelerin imal edilmesi gibi alanlarda da kullanılmasıyla bor minerallerin önemi gün geçtikçe artmaktadır [21].

Ülkemizdeki bor yatakları;

- 1) Balıkesir-Bigadiç, Sındırgı, Susurluk
- 2) Bursa-M. Kemalpaşa
- 3) Eskişehir-Seyitgazi
- 4) Kütahya-Emet [22]

Bor madeninin çok çeşitli kullanım alanları vardır. Bunlardan bazıları aşağıda verilmiştir.

İnşaat-Çimento Sektöründe:

Daha sağlam, hafif, depreme ve ısıya dayanıklı binaların yapılmasında, yalıtımda kullanılmaktadır [22].

Cam Elyafı:

Hafifliği, fiyatının düşüklüğü, gerilmeye olan direnci ve kimyasal etkilere dayanıklılığı nedeniyle plastiklerde, sinai elyaf v.b. de, lastik ve kağıtta yer edinmiş olan cam elyaf, kullanıldığı malzemelere sertlik ve dayanıklılık kazandırmaktadır. Böylece sertleşmiş plastikler; otomotiv ve uçak sanayilerinde, çelik ve diğer

metallerin yerine kullanılmaya başlanmıştır. Ayrıca spor malzemelerinde de (kayaklar, tenis racketleri v.b.) kullanılmaktadır [22].

Ahşap Koruma:

Bakteri ve çürümeye karşı koruyucu ve alev geciktirici olarak kullanılmaktadır [22].

Nükleer Uygulamalar:

Atom reaktörlerinde borlu çelikler, bor karbürler ve titanbor alaşımları kullanılır. Paslanmaz borlu çelik, nötron absorbanı olarak tercih edilmektedir. Yaklaşık her bir bor atomu bir nötron absorbe etmektedir. Atom reaktörlerinin kontrol sistemleri ile soğutma havuzlarında ve reaktörün alarm ile kapatılmasında (^{10}B) bor kullanılır. Ayrıca, nükleer atıkların depolanması için kolemanit kullanılmaktadır [22].

Metalurji:

Boratlar yüksek sıcaklıklarda düzgün, yapışkan, koruyucu, temiz, çapaksız bir sıvı oluşturma özelliği nedeniyle demir dışı metal sanayisinde koruyucu bir cüruf (metal küfü) oluşturu ve ergitmeyi hızlandırıcı madde olarak kullanılmaktadır. Bor bileşikleri, elektrolit kaplama sanayisinde, elektrolit elde edilmesinde kullanılmaktadır. Borik asit nikel kaplamada, fluoboratlar ve fluoborik asitler ise; kalay kurşun, bakır, nikel gibi demir dışı metaller için elektrolit olarak kullanılmaktadır. Alaşımlarda, özellikle çeliğin sertliğini artırıcı olarak kullanılmaktadır. Bu konuda ferrobora oldukça önem kazanmıştır. Çelik üretiminde 50 ppm bor ilavesi çeliğin sertleştirilebilme niteliğini geliştirmektedir [22].

Otomobil Hava Yastıkları ve Antifriz:

Bor hava yastıklarının hemen şişmesini sağlamak amacıyla kullanılmaktadır. Çarpma anında, elementel bor ile potasyum nitrat toz karışımı elektronik sensör ile harekete geçirilir. Sistemin harekete geçirilmesi ve hava yastıklarının harekete geçirilmesi için

geçen toplam zaman 40 ms'dir. Ayrıca otomobillerde antifriz olarak ve hidrolik sistemlerde de kullanılmaktadır [22].

Sağlık:

BNCT (Boron Neutron Capture Therapy) kanser tedavisinde kullanılmaktadır. Özellikle; beyin kanserlerinin tedavisinde hasta hücrelerin seçilerek imha edilmesine yaraması ve sağlıklı hücelere zararının minimum düzeyde olması nedeniyle tercih nedeni olabilmektedir. Metabolizmadaki bor, kalsiyum, magnezyum ve fosfor dengesini ayarlar. Sağlıklı kemiklerin oluşumuna, kasların ve beyin fonksiyonlarının gelişimine yardım eder [22].

Füze / Uçuş Yakıtları:

Bor kimyasalları özellikle füze yakıtı olarak kullanılmaktadır. Sodyum tetraborat, özel uygulamalarda yakıt katkı maddesi olarak kullanılmaktadır [22].

Atık Temizleme:

Sodyum borohidrat, atık sulardaki cıva, kurşun, gümüş gibi ağır metallerin sulardan temizlenmesi amacıyla kullanılmaktadır [22].

Borlu Katı Yakıtlar/Hücre Yakıtları:

Son günlerde sodyum borohidritin'in kullanıldığı, sodyum borohidrattan enerji üreten hücre yakıtıyla ilgili çalışmalar hız kazanmıştır. Sodyum borohidratın kimyasal bağlarında hidrojen mevcut olup, katalist hidrojeni açığa çıkarmakta veya elektrik üretmektedir. Bu üretimde temel prensip ise su ile boraksın reaksiyonudur. Bu reaksiyondan üretilen hidrojen içten yanmalı motorları besleyebilir veya hücre yakıtlarında kullanılabilir [22].

Enerji Üretimi ve Isı Depolama:

Bor, demir ve nadir toprak elementleri kombinasyonu (METGLAS) % 70 enerji tasarrufu sağlamaktadır. Bu güçlü manyetik ürün; bilgisayar disk sürücüleri, otomobillerde doğru akım-motorları ve ev eşyaları ile portatif güç aletlerinde kullanılmaktadır. Son yıllarda, borların piller/akülerde kullanılması ile maliyetler düşürülmüş ve çevre dostu piller/aküler üretilmeye başlanmıştır [23].

4. TEORİ VE METOTLAR

4.1. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi; 1964 yılında Hohenberg-Kohn ve Kohn-Sham' ın elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisini elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak yazmasını temel alır. Taban durum yoğunluk ve enerji fonksiyoneli bilgisiyle sistemin taban durum özelliklerini tanımlamak mümkündür [24].

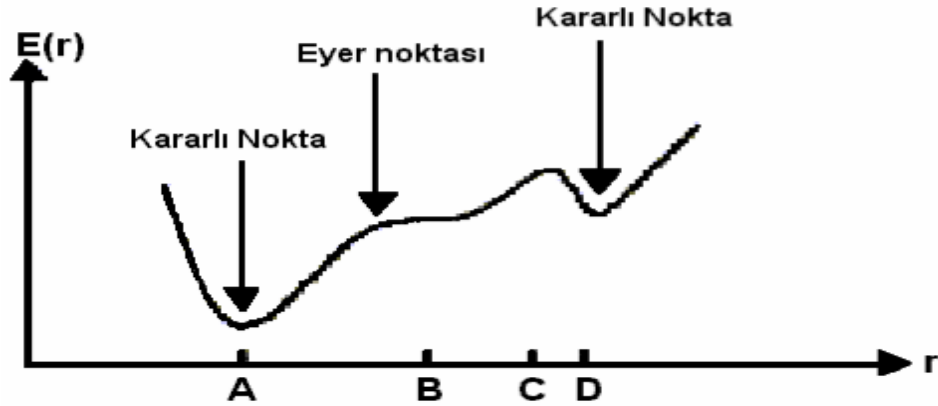
Eğer enerji ifadesi elektron yoğunluğuna bağlı ise buna yoğunluk fonksiyonu teorisi denir. Yani, yoğunluk fonksiyonu teorisinin temel dayanak noktası; elektronik sistemin enerjisinin elektron yoğunluğuna bağlı olduğunu ifade etmesidir [25-26].

Yoğunluk fonksiyonu teorisi yalıtkan, yarıiletken ve metallerin temel durum özelliklerini (örgü sabiti, durum yoğunluğu, band yapısı, vb.) belirlemek için oldukça başarılı bir yaklaşımdır. Son yıllarda katıların bulk ve yüzey özelliklerinin yanı sıra protein ve karbon nanotüplerin fiziksel özelliklerinin incelenmesinde de kullanılmaktadır [27-28].

4.2. Geometrik Optimizasyon

Optimizasyon; verilen şartlar altında en iyi sonucun elde edilmesi işidir. Optimizasyon alanındaki en önemli gelişmeler 18.yy'da Newton ve Lagrange tarafından yapılmıştır [29].

Geometrik optimizasyon; moleküllerde ve kristallerde denge durum geometrisiyle ilgilenir. Geometri optimizasyonları genellikle potansiyel enerji yüzeyindeki minimumları araştırır. Buradan yola çıkarak moleküler ve kristal sistemlerin denge yapılarını tahmin eder.



Şekil 4.1. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi grafiği

Şekil 4.1'deki grafik iki boyutta potansiyel enerji yüzeyine aittir. Minimumlarda ve eyer noktalarında enerjinin birinci türevi yani gradyent sıfırdır. Kuvvet gradyentin negatifidir. Bu nedenle bu noktalarda kuvvet de sıfırdır. Potansiyel enerji yüzeyinde gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalara 'kararlı noktalar' denir. Başarılı geometri optimizasyonlarının tümü kararlı noktaları bulmayı hedefler. Geometri optimizasyonu giriş geometrisindeki moleküler yapıda başlar ve potansiyel enerji yüzeyini dolaşır. Bu noktada enerji ve gradyenti hesaplar ve hangi yöne doğru ne kadar gidileceğine karar verir. Gradyent eğimin dikliğini verdiği kadar, yüzey boyunca mevcut noktadan enerjinin çok hızlı düştüğü noktayı da verir [30].

Optimizasyon yakınsadığında tamamlanmış olur. Yani hesaplanan geometride gradyent vektörü sıfır ve bir sonraki aşamada hesaplanan geometrik parametrelerin değerleri ile hesaplanan değerler arasındaki fark ihmal edilebilir bir değerde ise optimizasyon tamamlanmış olur [31-32].

4.3. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA)

Bir sistemde elektron yoğunluğu sabit ise yerel yoğunluk yaklaşımı kullanılır. Yerel yoğunluk yaklaşımı band hesaplamalarında yaygın olarak kullanılır [33]. Temel durum özellikleri (örgü sabiti, bulk modülü v.b.) yerel yoğunluk yaklaşımı ile iyi bir şekilde açıklanabilmektedir [34].

4.4. Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA)

Bir sistemde elektron yoğunluğu yerel olarak değişmekte ise; Genelleştirilmiş Gradyent yaklaşımı kullanılır [33]. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı elektron yoğunluğu eğrisi üzerinde değiş-tokuş korelasyonunun bağılılığıdır. Perdew ve arkadaşları tarafından katıhal uygulamaları için kullanılması önerilen yaklaşım, yerel yoğunluk yaklaşımın eksiklerini oldukça başarılı bir şekilde giderdi. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı, büyük örgü sabitleri ve düşük bağlanma enerjileri için kullanıldı. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı genellikle moleküller ve kristaller içindeki homojen olmayan yoğunluk dağılımları için diğer yaklaşımlar içinde daha iyi sonuçlar verir. Bu sistemlerin örgü sabitleri, temel durum özellikleri, v.b. doğru bir şekilde bulunabilir (35,39).

4.5. CASTEP Paket Programı

Cambridge Sequential Total Energy Package'ın kısaltılması olan CASTEP, Cambridge Üniversitesi Teorik Yoğun Madde Grubu tarafından geliştirilmiştir [33]. CASTEP, özellikle katı haldeki materyaller için tasarlanmış, kuantum mekaniksel tabanlı, materyal biliminde kullanılan önemli yazılımlardan biridir. Hesaplamalarda yoğunluk fonksiyonu teorisi ve düzlem dalga pseudopotansiyel metodunu kullanır. Materyallerdeki (yarıiletkenler, seramikler, metaller, mineraller ve zeolitler) yüzeyler ve kristallerin özelliklerini ilk-prensipier kapsamında kuantum mekaniksel olarak inceler. Tipik uygulamaları; yapısal özellikler, band yapısı, durum yoğunluğu ve optik özellikleri kapsar.

CASTEP, bir sistemin dalga fonksiyonu ve yük yoğunluğunun uzay dağılımını da çalışabilir. Ek olarak, ikinci dereceden elastik sabitlerinin tüm tensörleri ve bir kristalin ilgili mekanik özellikleri (poisson katsayısı, lame sabiti, bulk ve makaslama modülü gibi) de CASTEP programıyla hesaplanabilir. CASTEP ile etkin olarak yarıiletkenler ve diğer materyallerdeki nokta kusurlarının özellikleri (boşluklar, çatlaklar, ara noktalar , ...) ve çok çeşitli kusurlar çalışılabilir. Ayrıca katıların titreşim özellikleri (fonon dağılımı, fonon durumlarının toplam ve kısmi yoğunluğu,

termodinamik özellikler) CASTEP ile doğrusal çözümleme metodu ya da sonlu yer değiştirme tekniği kullanılarak hesaplanabilir [40].

CASTEP ilgili sistemin elektronik durumları için kuantum mekanik denklemleri kullanarak, toplam enerji (pseudopotansiyel yaklaşımıyla) hesaplamaları yapar. Bu hesaplamalar ilgili sistem için taban durum enerjisini, yük yoğunluğu ve toplam enerjiyle ilgili büyüklükleri (örgü sabitleri, elastik sabitler, geometrik yapı, bağlanma enerjisi v.b.) verir.

CASTEP hesaplamaları, süper hücre denilen periyodik olarak tekrarlı birim hücrelerden hesap yapar. Programa giriş verileri sadece ilgili atomların numarası ve başlangıç geometrisidir. Bu metotta pseudopotansiyelleri kullanılmaktadır. Pseudopotansiyeli sadece valans elektronlarında etkin olan bir potansiyeldir. Elektronik dalga fonksiyonu düzlem dalga temel setleri cinsinden yazılmıştır ve elektron-elektron etkileşimleri, yoğunluk fonksiyonu teorisi kullanılarak pseudopotansiyellerinin ve düzlem dalganın birlikte kullanımı, sistemdeki atomlar üzerinde etkin olan atomların hesabında oldukça kolaylık sağlar. Elektronik yapısındaki karışıklık nedeniyle toplam enerji hesaplamalarını metallere uygulamak, yarıiletken ve yalıtkanlara uygulamaktan daha zordur. Ancak CASTEP paket programında kullanılan metotlar sayesinde metaller üzerindeki hesaplamalar kolaylaştırılmıştır.

LDA (Local Density Approximation, Yerel Yoğunluk Yaklaşımı) yaklaşımında bir sistemde elektron yoğunluğu sabit kabul edilir. Elektron yoğunluğu yerel olarak değişiyorsa NLGA (Nonlocal Gradient Approximation, Yerel Olmayan Yoğunluk Yaklaşımı) ya da GGA (Generalized Gradient Approximation, Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı) denir [33].

5. HESAPLAMALAR

Saf bor elementlerin yapıları çok sayıda deneysel ve teorik çalışmalarla dikkatleri üzerine çekmiştir. Bor nanoşeritleri çoğunlukla metalik yapıdadır. Buna rağmen yarıiletken yapıları da gözlenir. Nanoşeritler; yapıdan farklı sayıda ve konumdaki atomların çıkarılmasıyla ya da yapıya başka türdeki atomların bağlanmasıyla çeşitli formlarda oluşturulabilir. Böylece oluşturulan yapıların kararlılıkları ve elektronik özellikleri farklılıklar gösterir. Bu bağlamda literatürde kaynak teşkil edecek çalışmalar yapılmıştır. Bazı çalışmalar ve sağladıkları kritik sonuçlar aşağıda kısaca verildi:

Doğrusal ve armchair (koltuk) kenarlı olmak üzere iki farklı geometriye sahip saf bor nanoşeritler optimize edildiğinde doğrusal kenarlı yapının armchair kenarlı yapıya göre daha kararlı olduğu görüldü. Ayrıca doğrusal kenarlı saf bor nanoşeritler metalik karakter gösterirken armchair kenarlı bor nanoşeritin yarıiletken özellik gösterdiği görüldü [41].

Doğrusal ve zigzag kenarlı saf bor nanoşeritler ele alındığında ise, doğrusal kenarlı bor nanoşeritin zigzag kenarlı bor nanoşerite göre daha kararlı yapıda olduğu görüldü. Ayrıca zigzag kenarlı bor nanoşeritler farklı sayıda hidrojen atomlarıyla pasifize edildiğinde, iki hidrojenle pasifize edilmiş yapının metalik özellik gösteren bir hidrojenli yapıdan farklı olarak yarıiletken davranış gösterdiği ve bir hidrojenli yapıdan daha kararlı olduğu görüldü [42].

Bu çalışmalardan yola çıkarak, farklı geometrilerdeki bor nanoşeritlerin yapısal ve elektronik özelliklerin geometriye göre farklılık gösterdiğini söyleyebiliriz. Çalışmamızda yukarıdaki çalışmalara benzer şekilde, farklı geometrilerdeki bor nanoşeritlerin (BNR) yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Bu çalışmada oluşturulan nanoşeritler, daha önceki bir çalışmada gösterilmiştir ki kararlı bor tabakalarından enerjetik bakımdan en kararlı olanı sekiz bor atomu ile oluşturulan P2M (10) simetrisine sahip monoklinik yapıdaki tabakadır [43]. Bu çalışmada da en kararlı bor tabakasından oluşturduğumuz (14 bor atomlu) nanoşeritler incelendi.

Tüm yapılar için hesaplamalar; CASTEP paket programında, ilk prensipler yöntemi ve yoğunluk fonksiyonu teorisi kapsamında, 400eV'luk enerji aralığı ve genelleştirilmiş gradyent yaklaşımının (GGA) PW91 fonksiyoneli kullanılarak yapıldı. İyon-elektron etkileşmeleri için ultrasoft pseudopotansiyeli ve k-noktaları için 2x3x8'lik Monkhorst-Pack şeması seçildi. Tüm yapıların, iki nanoşeritin etkileşmesini önlemek için en yakın iki komşu atom arası uzaklık en az 10Å [42] olacak şekilde iki boyutu ($a=20\text{\AA}$ ve $b=15\text{\AA}$ örgü parametreleri, x ve y eksenleri) sabit tutularak, yapıların sadece tek boyutta (c örgü parametresi, z eksen) serbest kalması istendi. Tüm yapılar için hesaplamalar birim hücre üzerinden yapıldı.

GGA-PW91 ile hesaplanan doğrusal kenarlı saf B_{14} yapısı LDA-CA-PZ ile tekrar hesaplandı. Serbest bırakılan c örgü parametresinin GGA ile hesaplandığında 4,912Å, LDA ile hesaplandığında ise 4,879 Å olduğu görüldü. Toplam enerjisinin ise GGA-PW91 'de -1074,945 eV iken LDA-CA-PZ' de -1078,864 eV olduğu görüldü. Çalışmamızda [42] nolu referansımız rehber kaynak olarak alınmıştır.

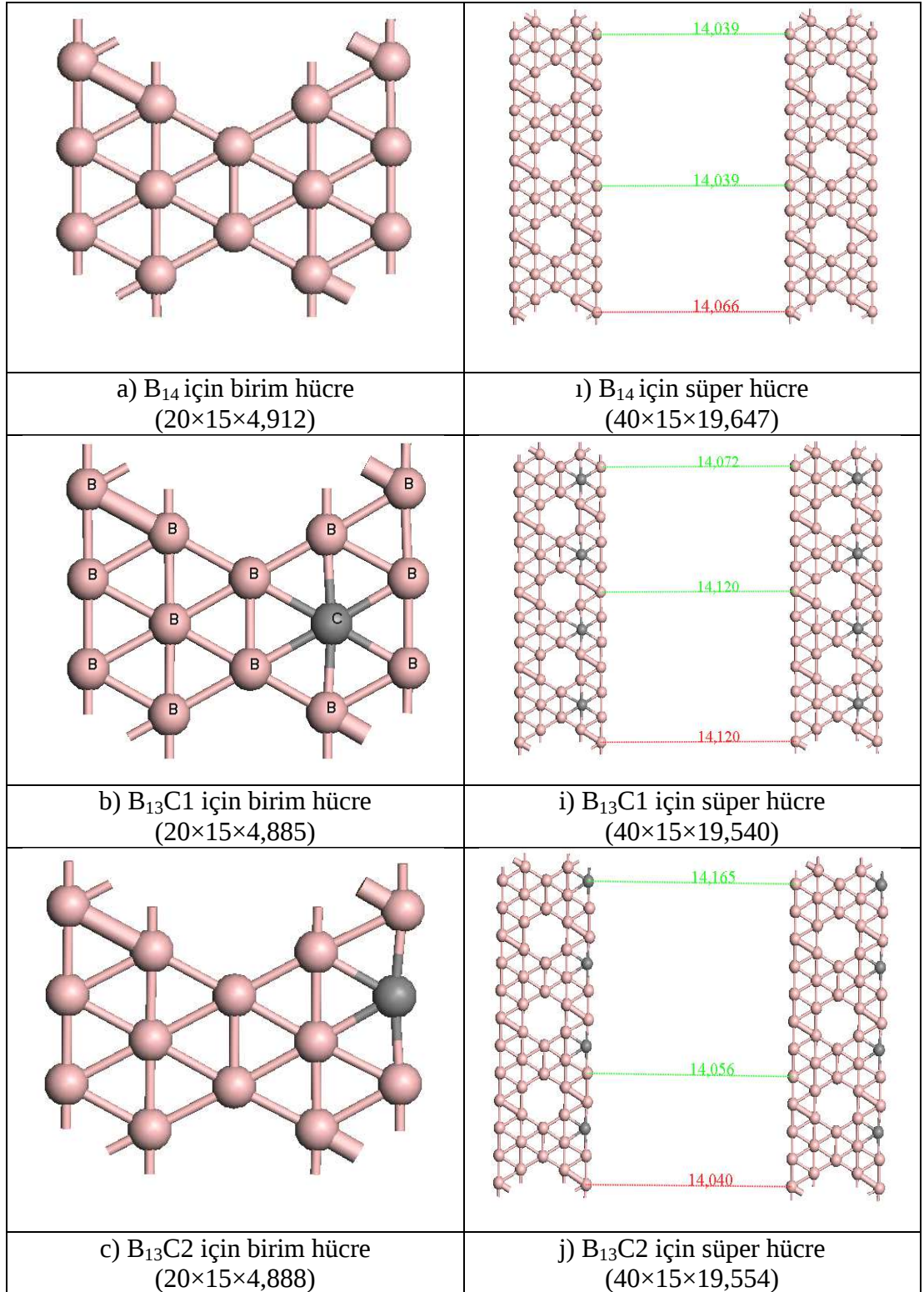
5.1. Doğrusal Kenarlı Bor Nanoşeritlerinin (LBNR) Yapısal ve Elektronik Özellikleri

Doğrusal kenarlı triklinik bor nanoşeritleri Şekil 5.1 (a,b,c,d,e,f,g,h) ve Şekil 5.2 (a,b,c,d,e,f,g,h)'deki kristal boyutlara sahip birim hücrelerin bir eksen boyunca kendini periyodik olarak tekrar etmesiyle oluşturuldu. Ding ve arkadaşlarının bor nanoşeritlerinin elektronik yapılarını ilk prensipler yaklaşımını kullanarak yaptıkları çalışmada [42] doğrusal kenarlı saf bor nanoşeritlerinin elektronik ve yapısal özellikleri ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir.

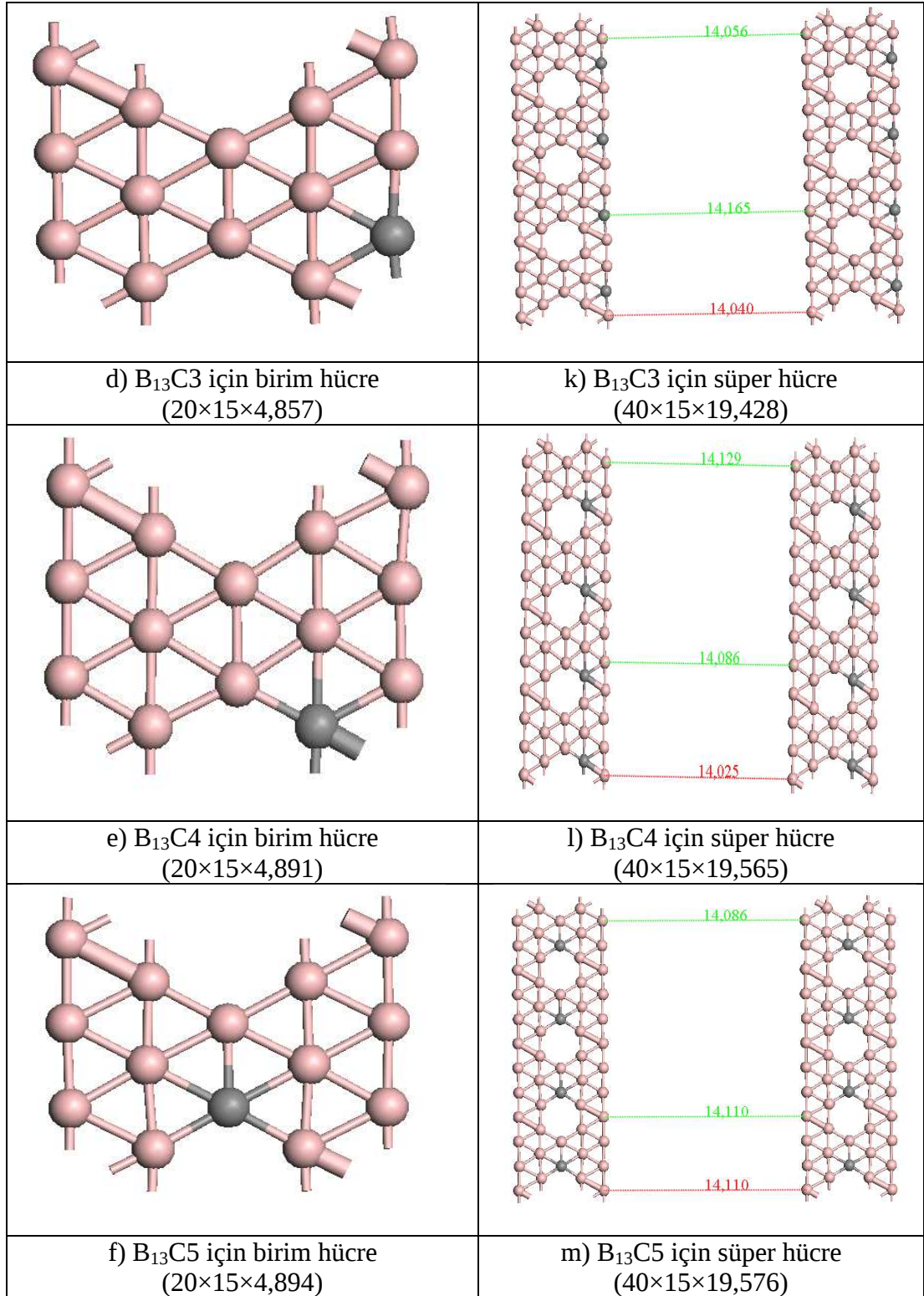
Çalışmamızda ise bu çalışmaya ek olarak doğrusal kenarlı saf bor nanoşeritlerindeki seçilen bir hekzagonu oluşturan bor atomları karbon ve azot atomları ile değiştirilerek yeni nanoşeritler elde edildi. Tüm yapılar optimize edilerek, yapıların elektronik ve yapısal özellikleri araştırıldı.

Optimizasyon sonunda her bir yapı analiz edilerek band yapısı, durum yoğunluğu (DOS), atomik yük, yük yoğunluğu, bağ uzunluğu, bağ Mulliken popülasyonu, toplam enerji, oluşum entalpisi, bağlanma enerjisi grafikleri çizildi. Ding ve arkadaşlarının [42] 20 atomlu birim hücre ile ürettikleri doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerinin benzeri olan bor nanoşeritleri bu çalışmada 14 atomlu birim hücre ile oluşturulmuştur.

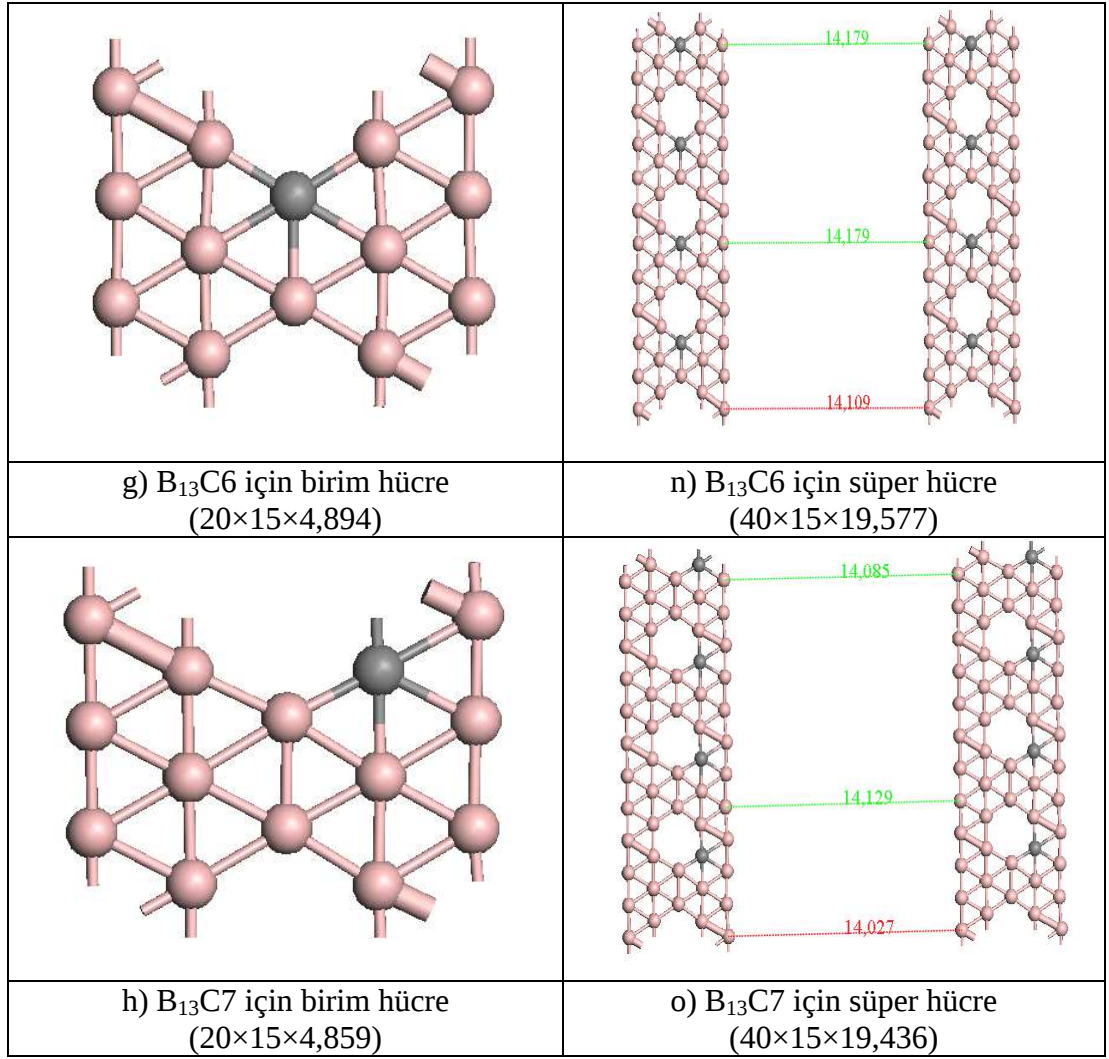
Yapıları daha iyi analiz etmek açısından süper hücre halleri Şekil 5.1 (ı,i,j,k,l,m,n,o) ve Şekil 5.2 (ı,i,j,k,l,m,n,o)'de verildi. Yapıların kristal boyutları (a,b,c kenar uzunlukları) Å cinsinden parantez içerisinde verilmiştir.



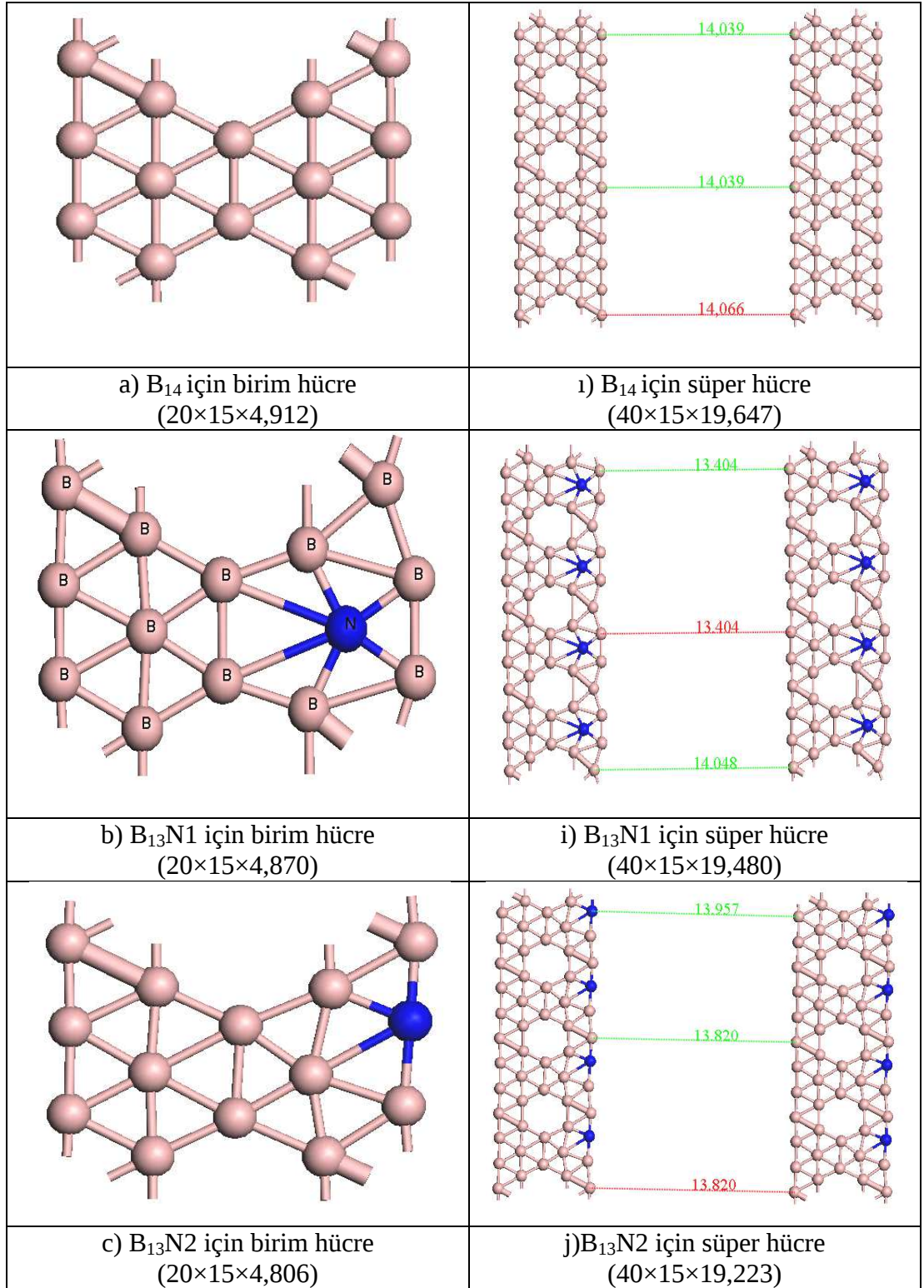
Şekil 5.1. LBNR-C kristal yapıları için birim ve süper hücre



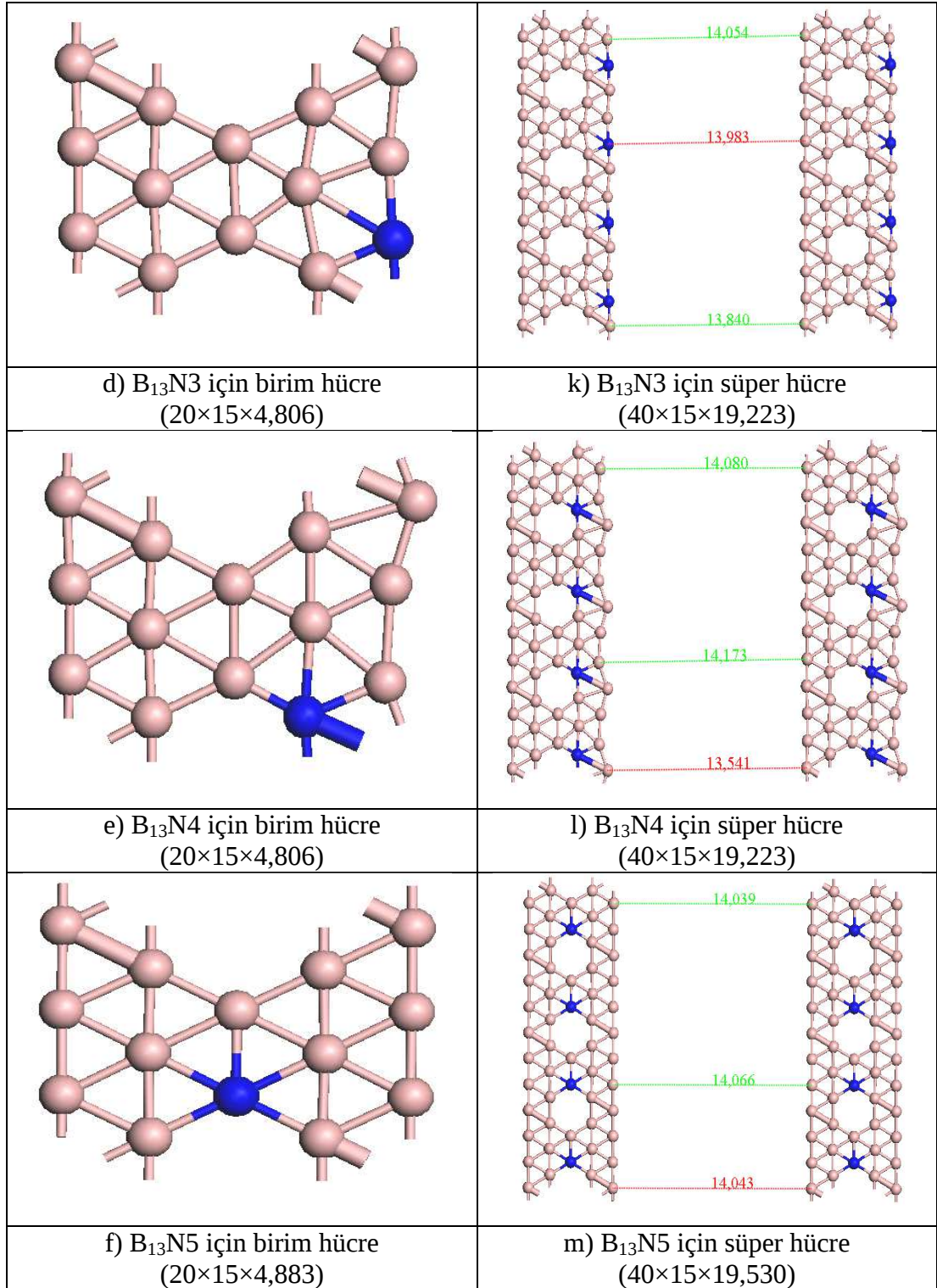
Şekil 5.1. (Devam) LBNR-C kristal yapıları için birim ve süper hücre



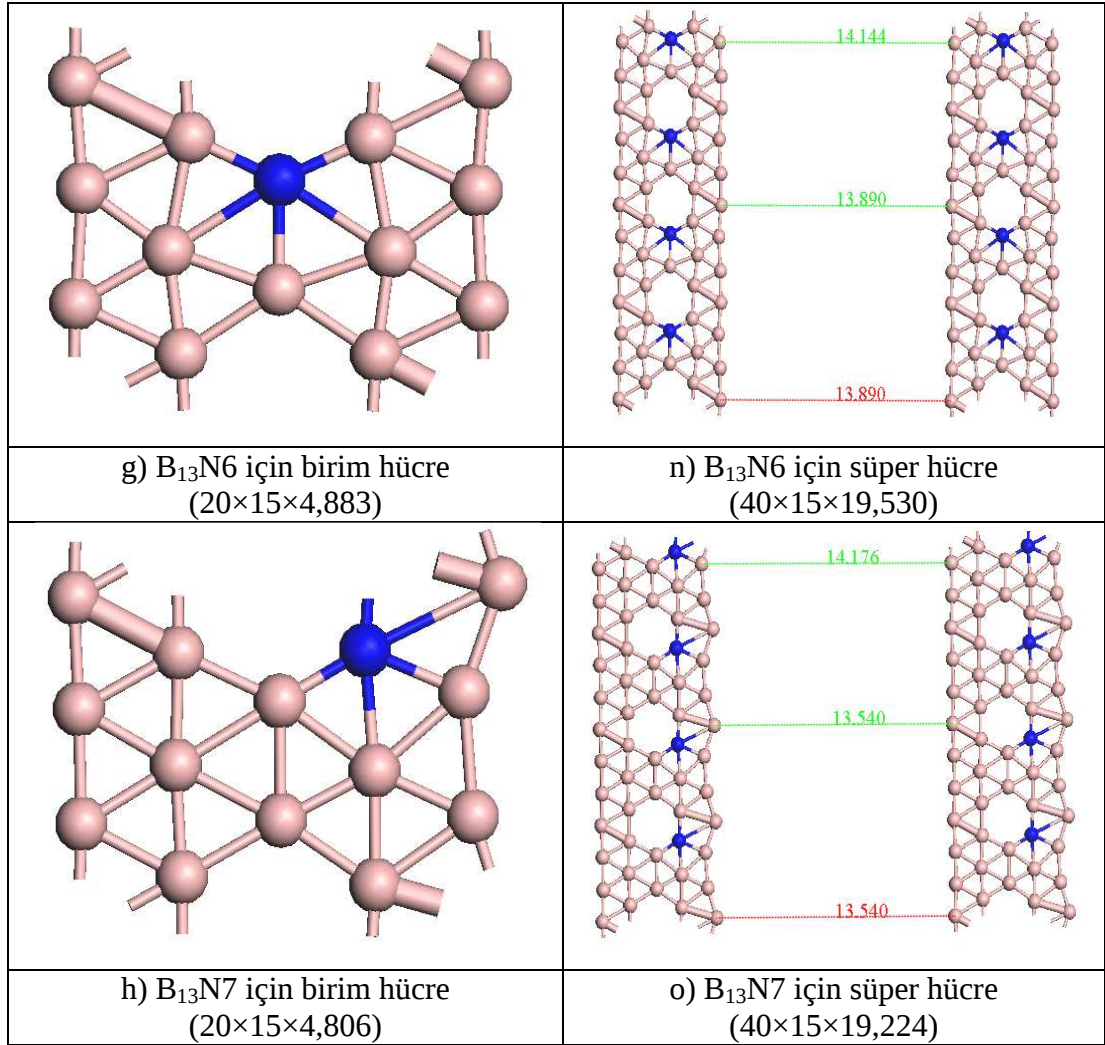
Şekil 5.1. (Devam) LBNR-C kristal yapıları için birim ve süper hücre



Şekil 5.2. LBNR-N kristal yapıları için birim ve süper hücre



Şekil 5.2. (Devam) LBNR-N kristal yapıları için birim ve süper hücre



Şekil 5.2. (Devam) LBNR-N kristal yapıları için birim ve süper hücre

Yapıların serbest bırakılan c örgü parametreleri karşılaştırıldığında saf bor yapının 4,912Å olan parametresinin yapıya karbon ve azot eklendiğinde azaldığı görüldü. Dolayısıyla azotlu ve karbonlu yapıların saf bor yapıya göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz. Azotlu ve karbonlu yapılar karşılaştırıldığında ise; yapının 1. konumuna karbon eklendiğinde (B₁₃C1) 4,885Å olan c parametresi, aynı konuma azot eklendiğinde (B₁₃N1) azalarak 4,870Å olduğu görüldü. Benzer şekilde, azotlu yapıların karbonlu yapılara göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz. Hacimlerine göre yapıları sıralayacak olursak; $V_{\text{saf yapı}} > V_{\text{karbonlu yapılar}} > V_{\text{azotlu yapılar}}$ 'dır.

Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerin enerjistik kararlılıklarını tartışabilmek için toplam enerjileri, oluşum entalpileri ve bağlanma (kohesif) enerjileri aşağıda verildi. Geometri optimizasyonu yapılan B_{14} ve $B_{13}Cn$ ve $B_{13}Nn$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve saf yapıyı referans alan enerji farkları sırasıyla (5.1), (5.2), (5.3) eşitlikleri kullanılarak hesaplandı.

Bağlanma enerjisi için,

$$E_{coh} \left(\frac{eV}{atom} \right) = [E_{top} - ((\eta - 1)E_B^{iso} + E_X^{iso})]/\eta \quad (5.1)$$

eşitliği kullanıldı. Burada, E_{coh} bağlanma enerjisi, E_B^{iso} ve E_X^{iso} sırasıyla izole edilmiş bor atomunun ve X atomunun enerjileridir. E_{top} sistemin toplam enerjisidir. Çalışma kapsamında kullanılan atomlar için hesaplanan izole enerjiler: $E_N^{iso} = -262,7066 \text{ eV}$, $E_C^{iso} = -145,8269 \text{ eV}$, $E_B^{iso} = -70,4917 \text{ eV}$, $E_H^{iso} = -12,4689 \text{ eV}$.

Oluşum entalpisi için,

$$E_{formation} \left(\frac{eV}{atom} \right) = [E_{top} - ((\eta - 1)E_B^{crys} + E_X^{crys})]/\eta \quad (5.2)$$

eşitliği kullanıldı. Burada, $E_{formation}$ oluşum entalpisi, E_B^{crys} ve E_X^{crys} sırasıyla bor ve X atomlarının kristaldeki enerjileri, E_{top} sistemin toplam enerjisidir. Çalışma kapsamında kullanılan atomlar için kristal enerjiler: $E_N^{crys} = -270,469655 \text{ eV}$ (α - N_2 kristali), $E_C^{crys} = -154,938388 \text{ eV}$ (Zinc-blend diamond), $E_B^{crys} = -77,19478858 \text{ eV}$ (α -bor kristali).

Enerji farkları için:

$$\Delta E = |E_{toplamlam(B_{\eta-1}Xn)} - E_{toplamlam(saf yapı)}| \quad (5.3)$$

eşitliği kullanıldı. Bu çalışmada $\eta=14$ ve $\eta=28$ değerleri alındı.

Yapıların hesaplanan toplam enerjileri, bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve enerji farkları karbonlu yapılar için Çizelge 5.1 ve azotlu yapılar için Çizelge 5.2’de verildi. Parantez içinde verilen değer kaynak 42’den alınmıştır.

Çizelge 5.1. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritlerin toplam enerjileri, bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve enerji farkları

LBNR	Toplam Enerji (eV)	Bağlanma Enerjisi (eV)	Oluşum Entalpisi (eV)	ΔE
B_{14}	-1074,945	-6,290	0,413 (0,200)	0,000
$B_{13}C1$	-1150,602	-6,313	0,562	-75,657
$B_{13}C2= B_{13}C3$	-1152,258	-6,431	0,444	-77,313
$B_{13}C4= B_{13}C7$	-1151,862	-6,403	0,472	-76,918
$B_{13}C5= B_{13}C6$	-1151,920	-6,407	0,468	-76,975

Çizelge 5.2. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritleri için toplam enerjileri, bağlanma enerjileri, oluşum entalpileri ve enerji farkları

LBNR	Toplam Enerji (eV)	Bağlanma Enerjisi (eV)	Oluşum Entalpisi (eV)	ΔE
B_{14}	-1074,945	-6,290	0,413 (0,200)	0,000
$B_{13}N1$	-1267,019	-6,280	0,499	-192,074
$B_{13}N2= B_{13}N3$	-1268,065	-6,355	0,424	-193,120
$B_{13}N4= B_{13}N7$	-1267,916	-6,344	0,435	-192,971
$B_{13}N5= B_{13}N6$	-1268,010	-6,351	0,428	-193,065

Çizelge 5.1 ve Çizelge 5.2 ile Şekil 1 ve Şekil 2 birlikte incelendiğinde; $B_{13}C2$ ile $B_{13}C3$, $B_{13}C4$ ile $B_{13}C7$, $B_{13}C5$ ile $B_{13}C6$; $B_{13}N2$ ile $B_{13}N3$, $B_{13}N4$ ile $B_{13}N7$, $B_{13}N5$ ile $B_{13}N6$ yapılarının aynı karakterde yapılar olduğu görülmektedir. Yapıların yapısal

karakteristik özellikleri bu kesimin bağ uzunlukları alt biriminde incelenecektir. İleriki kısımlarda (grafik ve çizelgelerde), özdeş karakterdeki yapıların sadece bir tanesi için analiz yapılacaktır.

Birim hücrelerin toplam enerji farkları ΔE 'si en küçük (-77,313) olan yapıların $B_{13}C2$ ve $B_{13}C3$ özdeş yapıları olduğu ve dolayısıyla bu yapıların karbonlu yapılar arasında enerjistik olarak en kararlı oldukları görüldü. ΔE 'si en büyük (-75,657) olan yapının ise $B_{13}C1$ olduğu görüldü. Bu yapının karbonlu yapılar arasında enerjistik olarak en kararsız yapı olduğu bulunmuş oldu. Sonuç olarak, karbonlu yapıları kararlılıklarına göre büyükten küçüğe sıralayacak olursak; $B_{13}C2=B_{13}C3>B_{13}C5=B_{13}C6>B_{13}C4=B_{13}C7>B_{13}C1$ 'dir.

Azotlu yapılar için ise; birim hücrelerin toplam enerji farkları ΔE 'si en küçük (-193,120) olan yapıların $B_{13}N2$ ve $B_{13}N3$ özdeş yapıları olduğu görüldü. Dolayısıyla bu yapıların azotlu yapılar arasında enerjistik olarak en kararlı yapı olduğu bulunmuş oldu. ΔE 'si en büyük (-192,074) olan yapının ise $B_{13}N1$ olduğu ve bu yapının azotlu yapılar arasında enerjistik olarak en kararsız yapı olduğu sonucuna ulaşıldı. Bununla birlikte, azotlu yapıları kararlılıklarına göre büyükten küçüğe sıralayacak olursak; $B_{13}N2=B_{13}N3>B_{13}N5=B_{13}N6>B_{13}N4=B_{13}N7>B_{13}N1$ 'dir.

Sonuç olarak; doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerin azotlu ve karbonlu yapılardan en kararlı halleri, seçilen hegzagonun dış kenar bor atomlarının karbon ve azot atomlarıyla değiştirilmesiyle oluşturulan yapılardır. Seçilen hegzagonun iç kenarlarındaki bor atomlarının karbon ve azotla değiştirilerek oluşturulan yapılar ise dış kenardakilere göre daha kararsızdır. Hegzagonun merkezindeki bor atomlarının karbon ve azot atomlarıyla değiştirilerek oluşturulan yapılar ise en kararsız yapılardır. Ayrıca doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerin, hegzagonun 1,2,3,4,5,6 ve 7. konumlarındaki bor atomlarının karbon ya da azot atomlarıyla değiştirilmesi yapının kararlılık sıralamasını değiştirmediği görüldü. Hem karbonlu hem de azotlu yapılarda kararlılık sıralamasının aynı olduğu ve sıralamanın değişmediği sonucuna varıldı.

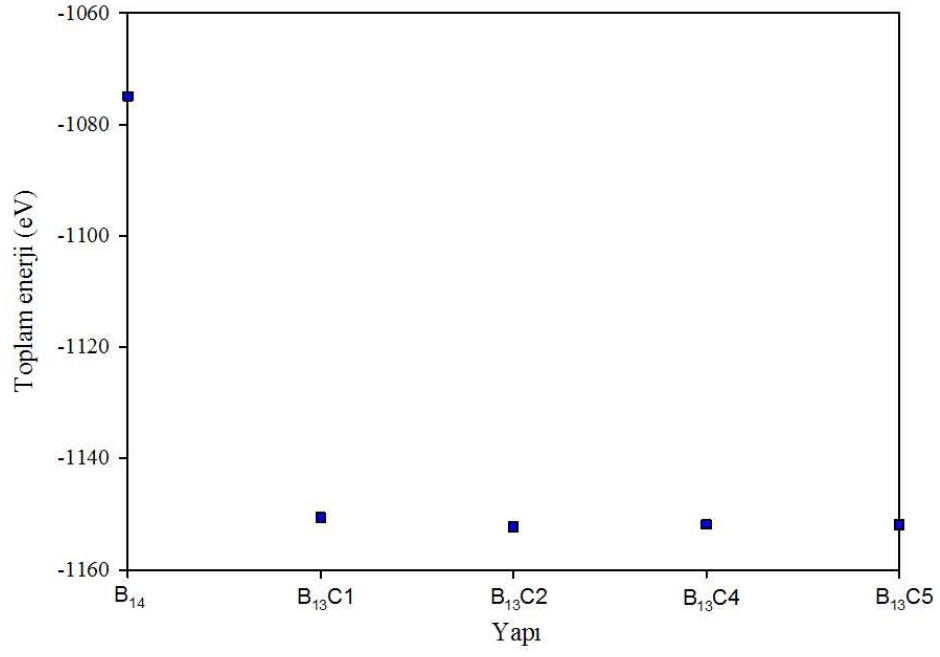
Yapıların bağlanma enerjileri incelendiğinde; karbonlu yapılar içerisinde, bağlanma enerjisi en küçük (-6,431) olan $B_{13}C_2$ ve $B_{13}C_3$ yapılarının en kararlı yapılar olduğu, bağlanma enerjisi en büyük (-6,313) olan $B_{13}C_1$ yapısının en kararsız yapı olduğu görüldü. Benzer şekilde azotlu yapılar incelendiğinde ise; bağlanma enerjisi en küçük (-6,355) olan $B_{13}N_2$ ve $B_{13}N_3$ yapılarının en kararlı yapılar olduğu, bağlanma enerjisi en büyük (-6,280) olan $B_{13}N_1$ yapısının ise en kararsız yapı olduğu görüldü.

Oluşum entalpileri incelendiğinde ise; karbonlu yapılar içerisinde, oluşum entalpisi en küçük (0,444) olan $B_{13}C_2$ ve $B_{13}C_3$ yapılarının en kararlı yapılar olduğu, oluşum entalpisi en büyük (0,562) olan $B_{13}C_1$ yapısının en kararsız yapı olduğu görüldü. Azotlu yapılar içerisinde ise; oluşum entalpisi en küçük (0,424) olan $B_{13}N_2$ ve $B_{13}N_3$ yapılarının en kararlı yapılar olduğu, oluşum entalpisi en büyük (0,499) olan $B_{13}N_1$ yapısının ise en kararsız yapı olduğu görüldü. Ayrıca bütün yapılarda oluşum entalpisi değerlerinin pozitif olduğu görüldü. Değerlerin pozitif çıkması, oluşum reaksiyonunun endotermik olduğunu, yani; bu yapıların oluşması için dışarıdan enerji alması gerektiğini gösterir.

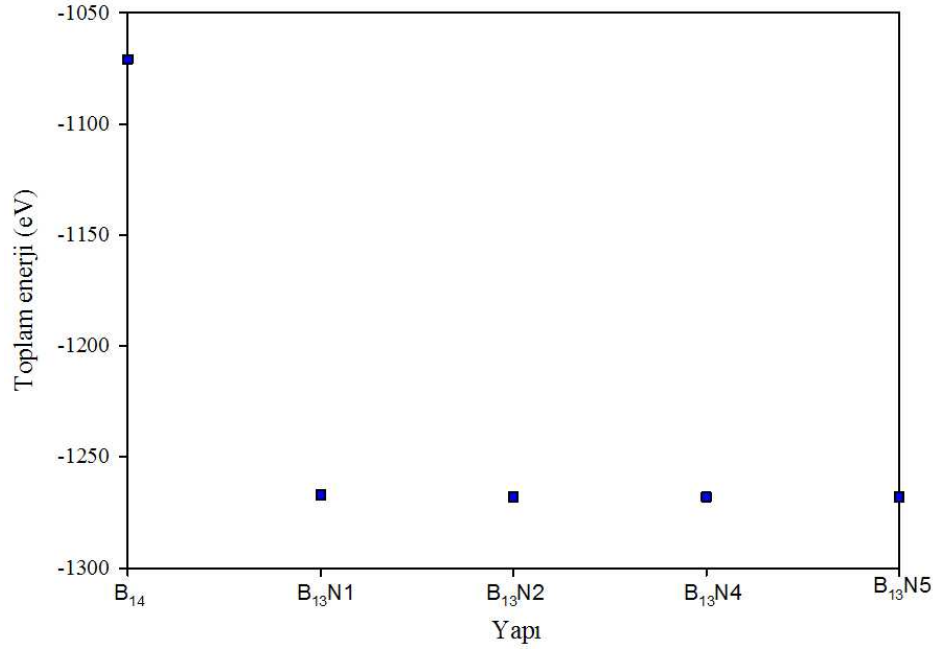
Sonuç itibarıyla; doğrusal kenarlı bor nanoşeritleri, toplam enerji farkı, bağlanma enerjisi ve oluşum entalpisi değerlerine göre analiz edildiğinde yapıların kararlılık sıralamasının değişmediği görüldü. Bu da sonuçlarımızın birbiri ile uyum içerisinde olduğunun göstergesidir.

Toplam Enerjileri:

Yapıların enerjistik kararlılıklarını daha iyi analiz etmek açısından Şekil 5.3'te karbonlu yapılar, Şekil 5.4'te ise azotlu yapılar için toplam enerji grafikleri verildi. Şekil 5.3 ve Şekil 5.4'teki grafikler incelendiğinde; en düşük enerjili yapıların en kararlı, en yüksek enerjili yapıların ise en kararsız yapılar olduğu açıkça görülmektedir.



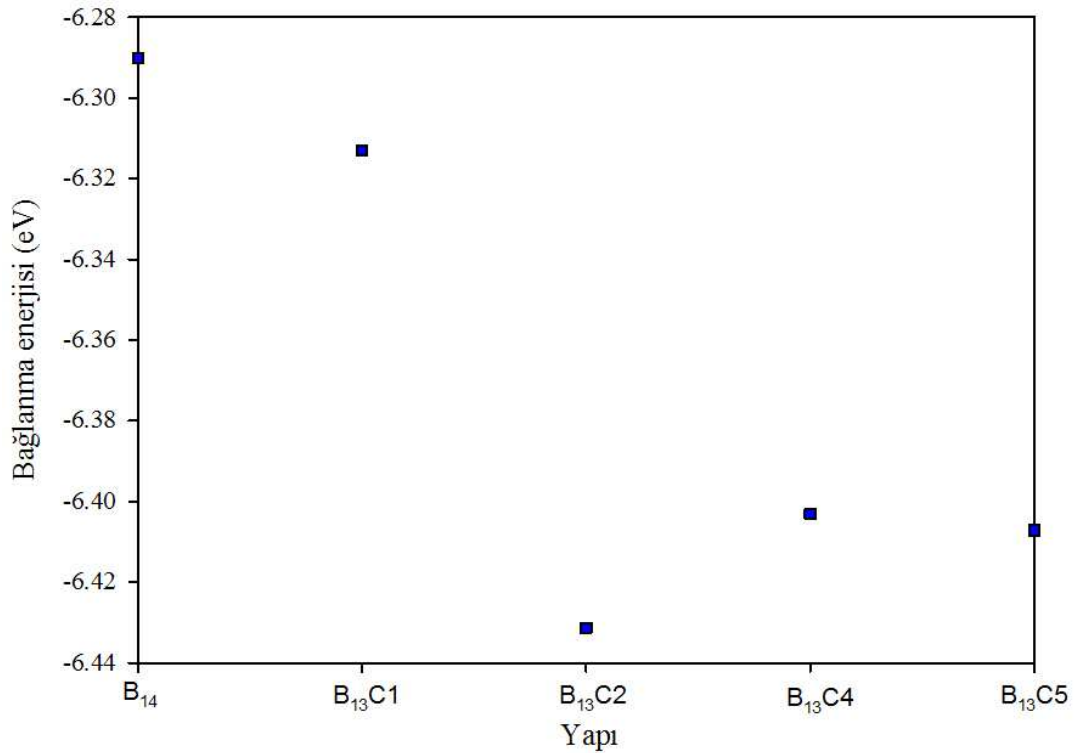
Şekil 5.3. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için toplam enerji grafiği



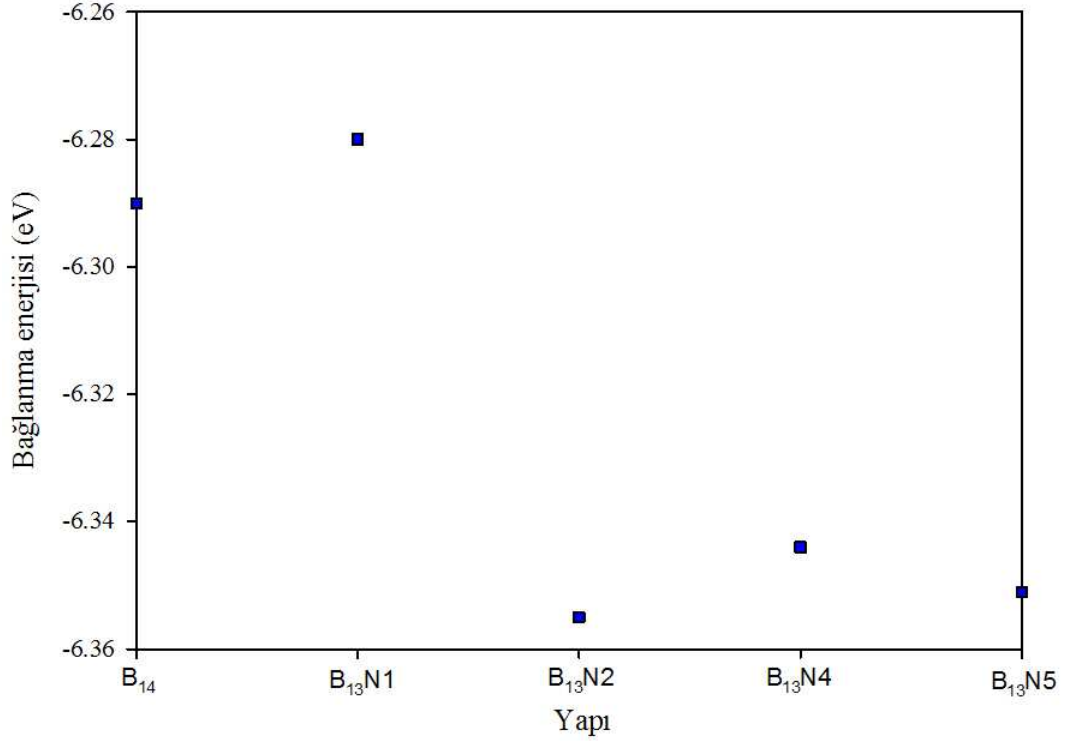
Şekil 5.4. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ nanoşeritleri için toplam enerji grafiği

Bağlanma Enerjileri:

Şekil 5.5'te doğrusal kenarlı nanoşeritlerinin bağlanma enerjilerinin saf bor ve karbonlu yapılara, Şekil 5.6'da ise saf bor ve azotlu yapılara göre değişimi verildi. Bağlanma enerjisi grafikleri incelendiğinde, toplam enerji grafikleriyle benzer şekilde, en düşük enerjili yapıların en kararlı, en yüksek enerjili yapıların ise en kararsız yapılar olduğu görülmektedir.



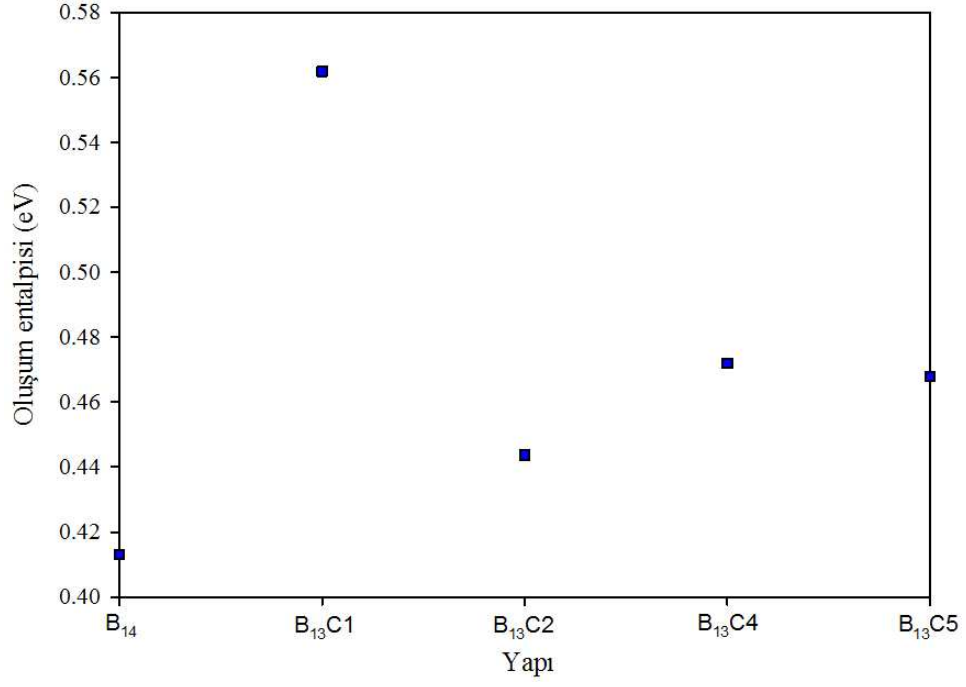
Şekil 5.5. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için bağlanma enerji grafiği



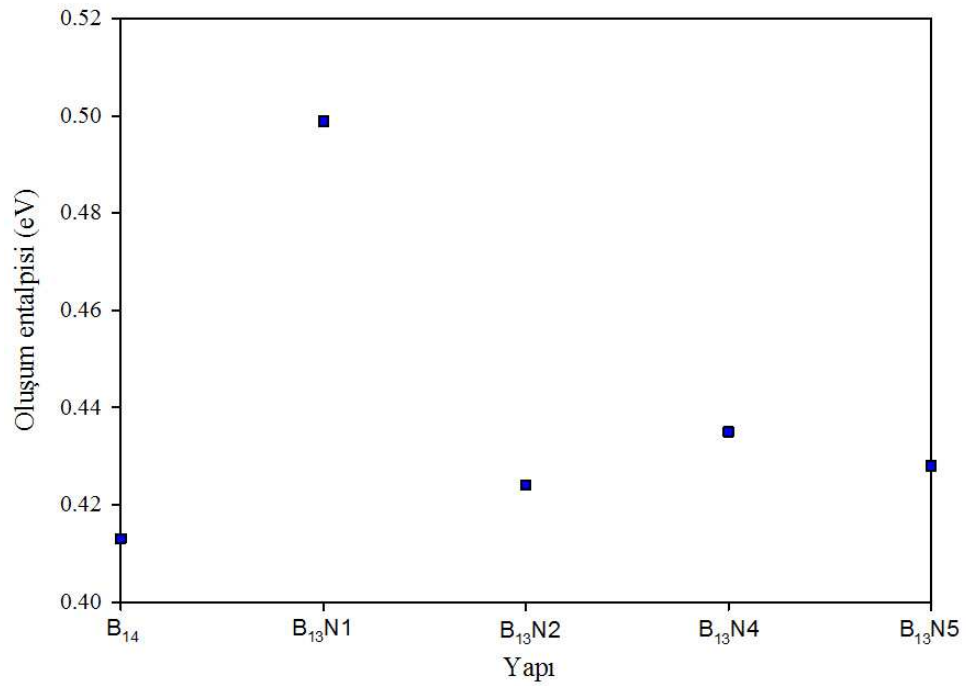
Şekil 5.6. Doğrusal kenarlı B₁₄ ve B₁₃Nn nanoşeritleri için bağlanma enerjisi grafiği

Oluşum Entalpileri:

Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerinin; oluşum entalpilerinin Şekil 5.7’ de saf bor ve karbonlu yapılara, Şekil 5.8’de ise saf bor ve azotlu yapılara göre değişimi verildi. Toplam enerji ve bağlanma enerjisi grafiklerine benzer şekilde; oluşum entalpisi grafikleri irdelendiğinde de en kararlı yapıların oluşum entalpisi en düşük olan yapılar olduğu görülür.



Şekil 5.7. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için oluşum entalpisi grafiği



Şekil 5.8. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ nanoşeritleri için oluşum entalpisi grafiği

Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerin bağlanma karakteristiklerini ayrıntılı bir şekilde analiz edebilmek için bağ uzunlukları, bağ Mulliken popülasyonları ve atomik yükler hesaplandı.

Atomik Yük:

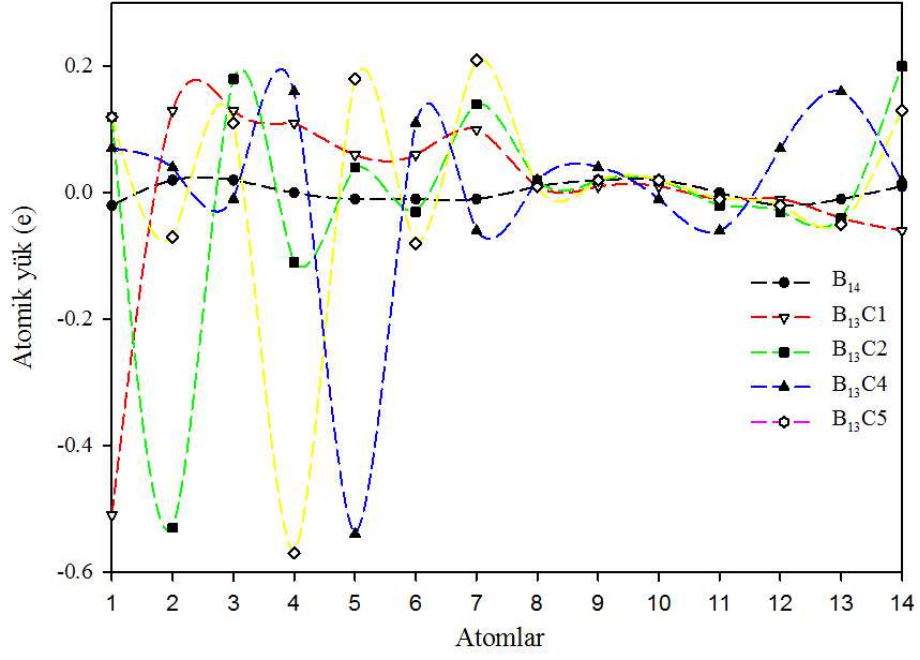
Çizelge 5.3'te doğrusal kenarlı saf bor ve karbonlu yapıların, Çizelge 5.4'te ise saf bor ve azotlu yapılarının atomik yükleri verildi.

Çizelge 5.3. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin atomik yük verileri

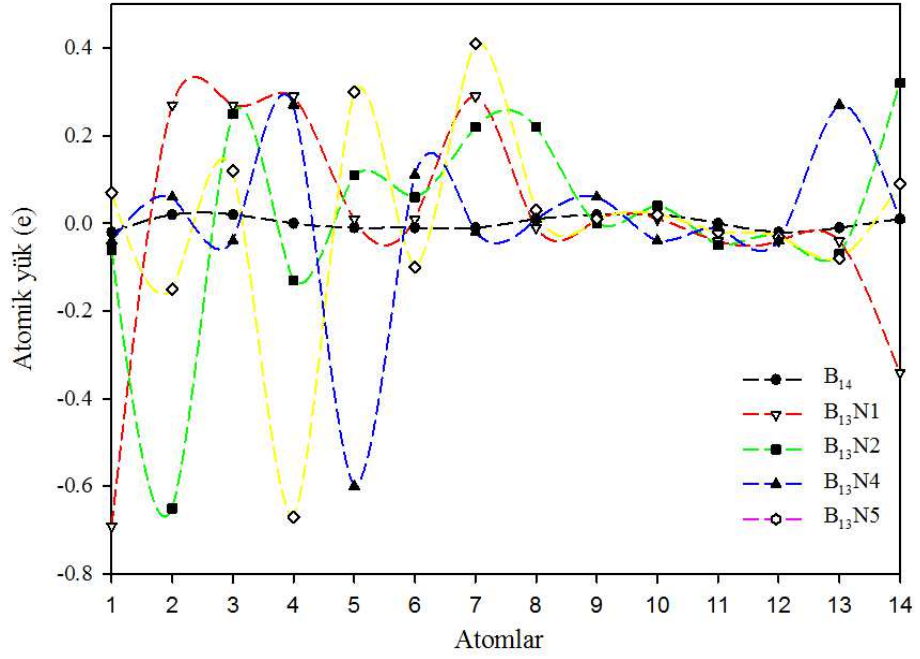
LBNR	Atomik Yük						
Yapı	1.atom	2.atom	3.atom	4.atom	5.atom	6.atom	7.atom
B_{14}	-0,020	0,020	0,020	0,000	-0,010	-0,010	-0,010
$B_{13}C1$	-0,510	0,130	0,130	0,110	0,060	0,060	0,100
$B_{13}C2$	0,120	-0,530	0,180	-0,110	0,040	-0,030	0,140
$B_{13}C3$	0,120	0,180	-0,530	0,140	-0,030	0,040	-0,110
$B_{13}C4$	0,120	-0,070	0,110	-0,570	0,180	-0,080	0,210
$B_{13}C5$	0,070	0,040	-0,010	0,160	-0,540	0,110	-0,060
$B_{13}C6$	0,070	-0,010	0,040	-0,060	0,110	-0,540	0,160
$B_{13}C7$	0,120	0,110	-0,070	0,210	-0,080	0,180	-0,570
LBNR	Atomik Yük						
Yapı	8.atom	9.atom	10.atom	11.atom	12.atom	13.atom	14.atom
B_{14}	0,010	0,020	0,020	0,000	-0,020	-0,010	0,010
$B_{13}C1$	0,010	0,010	0,010	-0,010	-0,010	-0,040	-0,060
$B_{13}C2$	0,020	0,020	0,020	-0,020	-0,030	-0,040	0,200
$B_{13}C3$	0,020	0,020	0,020	-0,040	-0,030	-0,020	0,200
$B_{13}C4$	0,010	0,020	0,020	-0,010	-0,020	-0,050	0,130
$B_{13}C5$	0,020	0,040	-0,010	-0,060	0,070	0,160	0,020
$B_{13}C6$	0,020	-0,010	0,040	0,160	0,070	-0,060	0,020
$B_{13}C7$	0,010	0,020	0,020	-0,050	-0,020	-0,010	0,130

Çizelge 5.4. Doğrusal kenarlı B₁₄ ve B₁₃N_n (n=1,2,3,4,5,6,7) nanoşeritleri için atomik yük verileri

LBNR	Atomik Yük						
Yapı	1.atom	2.atom	3.atom	4.atom	5.atom	6.atom	7.atom
B ₁₄	-0,020	0,020	0,020	0,000	-0,010	-0,010	-0,010
B ₁₃ N1	-0,690	0,270	0,270	0,290	0,010	0,010	0,290
B ₁₃ N2	-0,060	-0,650	0,250	-0,130	0,110	0,060	0,220
B ₁₃ N3	-0,060	0,250	-0,650	0,220	0,060	0,110	-0,130
B ₁₃ N4	0,070	-0,150	0,120	-0,670	0,300	-0,100	0,410
B ₁₃ N5	-0,040	0,060	-0,040	0,270	-0,600	0,110	-0,020
B ₁₃ N6	-0,040	-0,040	0,060	-0,010	0,010	-0,600	0,270
B ₁₃ N7	0,070	0,120	-0,150	0,410	-0,100	0,300	-0,670
LBNR	Atomik Yük						
Yapı	8.atom	9.atom	10.atom	11.atom	12.atom	13.atom	14.atom
B ₁₄	0,010	0,020	0,020	0,000	-0,020	-0,010	0,010
B ₁₃ N1	-0,010	0,010	0,010	-0,040	-0,040	-0,040	-0,340
B ₁₃ N2	0,220	0,000	0,040	-0,050	-0,030	-0,070	0,320
B ₁₃ N3	0,020	0,040	0,000	-0,070	-0,030	-0,050	0,320
B ₁₃ N4	0,030	0,010	0,020	-0,020	-0,030	-0,080	0,090
B ₁₃ N5	0,010	0,060	-0,040	-0,010	-0,040	0,270	0,010
B ₁₃ N6	0,010	-0,040	0,060	0,270	-0,040	-0,020	0,010
B ₁₃ N7	0,030	0,020	0,010	-0,080	-0,030	-0,020	0,090



Şekil 5.9. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için atomik yük dağılımı



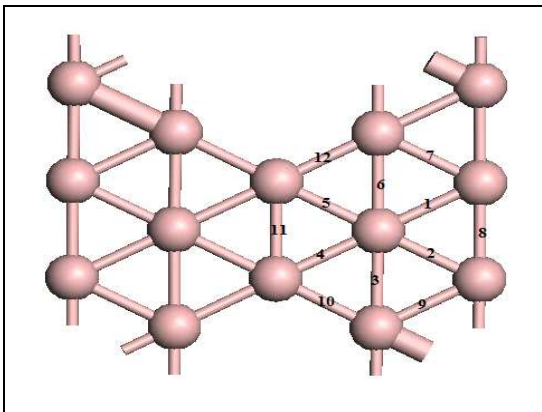
Şekil 5.10. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ nanoşeritleri için atomik yük dağılımı

Şekil 5.9'da saf bor ve karbonlu yapıların atom konumlarına göre atomik yük dağılımı verildi. Atomik yük grafiklerinin kesikli-çizgi ile verilmesi okuyucuya kolaylık sağlaması içindir. Şekil 5.9'daki grafik incelendiğinde; saf bor (B_{14}) yapıya sahip nanoşeritlerin hemen hemen nötr durumda olduğu görüldü. Saf yapının 1. konumuna ($B_{13}C1$), 2. konumuna ($B_{13}C2$), 3. konumuna ($B_{13}C3$), 4. konumuna ($B_{13}C4$), 5. konumuna ($B_{13}C5$), 6. konumuna ($B_{13}C6$) ve 7. konumuna ($B_{13}C7$) karbon atomu koyulduğunda; karbonun bulunduğu konumlardaki atomların elektron alarak negatif yüke sahip olduğu görüldü.

Şekil 5.10'da doğrusal kenarlı saf bor ve azotlu yapıların atom konumlarına göre atomik yük dağılımı verildi. Şekil 5.10'daki grafik incelendiğinde; saf bor (B_{14}) yapıya sahip nanoşeritlerin hemen hemen nötr durumda olduğu görüldü. Saf yapının 1. konumuna ($B_{13}N1$), 2. konumuna ($B_{13}N2$), 3. konumuna ($B_{13}N3$), 4. konumuna ($B_{13}N4$), 5. konumuna ($B_{13}N5$), 6. konumuna ($B_{13}N6$) ve 7. konumuna ($B_{13}N7$) azot atomu koyulduğunda; karbonlu yapılarla benzer şekilde, azotun bulunduğu konumlardaki atomların elektron alarak negatif yüke sahip olduğu görüldü. Buradan hareketle, karbon ve azot atomlarının bor atomlarıyla elektron alış-verişi yaptığı söylenebilir.

Bağ Uzunluğu:

Şekil 5.11'de doğrusal kenarlı bor nanoşeritler için bağ konumları verildi.



Şekil 5.11. Doğrusal kenarlı bor nanoşeritler için bağ konumları

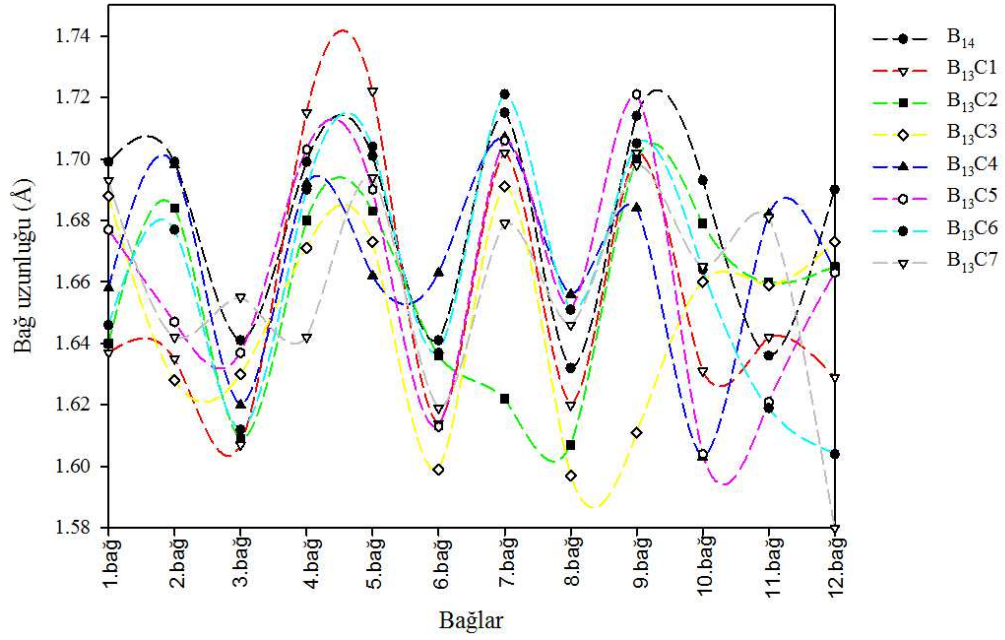
Çizelge 5.5’te doğrusal kenarlı saf bor ve karbonlu yapılar için, Çizelge 5.6’da ise saf bor ve azotlu yapıların bağ uzunlukları verildi.

Çizelge 5.5. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ uzunlukları

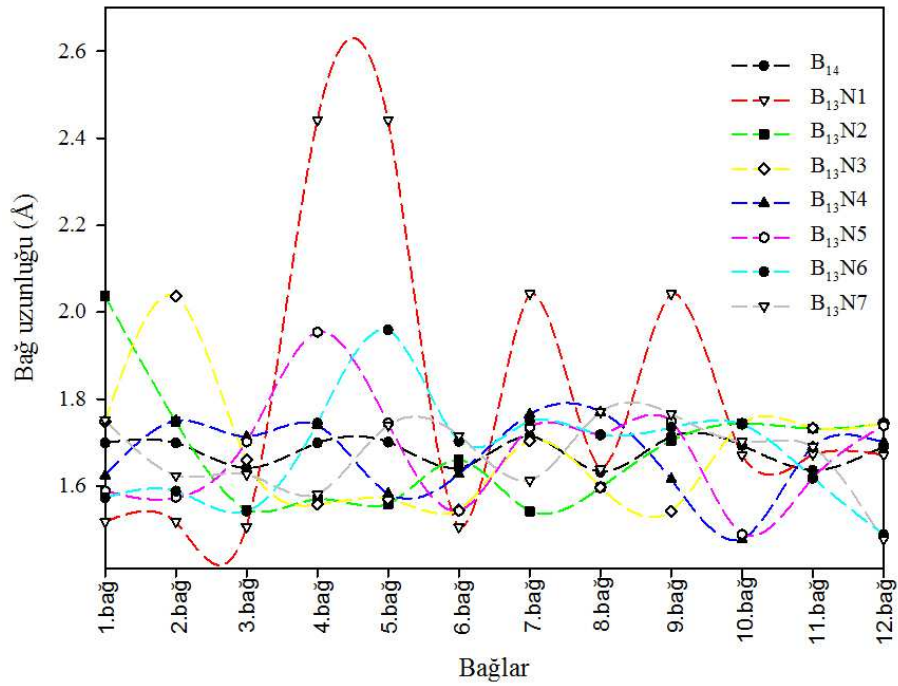
LBNR	Bağ Uzunluğu(Å)					
Yapı	1.Bağ	2.Bağ	3.Bağ	4.Bağ	5.Bağ	6.Bağ
B_{14}	1,699	1,699	1,641	1,699	1,701	1,641
$B_{13}C1$	1,637	1,635	1,607	1,715	1,722	1,614
$B_{13}C2$	1,640	1,684	1,609	1,680	1,683	1,636
$B_{13}C3$	1,688	1,628	1,630	1,671	1,673	1,599
$B_{13}C4$	1,658	1,698	1,620	1,692	1,662	1,663
$B_{13}C5$	1,677	1,647	1,637	1,703	1,690	1,613
$B_{13}C6$	1,646	1,677	1,612	1,690	1,704	1,637
$B_{13}C7$	1,693	1,642	1,655	1,642	1,694	1,619
LBNR	Bağ Uzunluğu(Å)					
Yapı	7.Bağ	8.Bağ	9.Bağ	10.Bağ	11.Bağ	12.Bağ
B_{14}	1,715	1,632	1,714	1,693	1,636	1,690
$B_{13}C1$	1,702	1,620	1,702	1,631	1,642	1,629
$B_{13}C2$	1,622	1,607	1,700	1,679	1,660	1,665
$B_{13}C3$	1,691	1,597	1,611	1,660	1,659	1,673
$B_{13}C4$	1,707	1,656	1,684	1,603	1,682	1,664
$B_{13}C5$	1,706	1,651	1,721	1,604	1,621	1,663
$B_{13}C6$	1,721	1,651	1,705	1,664	1,619	1,604
$B_{13}C7$	1,679	1,646	1,698	1,665	1,681	1,580

Çizelge 5.6. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ uzunlukları

LBNR	Bağ Uzunluğu(Å)					
Yapı	1.Bağ	2.Bağ	3.Bağ	4.Bağ	5.Bağ	6.Bağ
B_{14}	1,699	1,699	1,641	1,699	1,701	1,641
$B_{13}N1$	1,518	1,518	1,506	2,442	2,442	1,506
$B_{13}N2$	2,037	1,748	1,545	1,570	1,558	1,660
$B_{13}N3$	1,748	2,037	1,660	1,558	1,570	1,545
$B_{13}N4$	1,624	1,751	1,713	1,740	1,582	1,628
$B_{13}N5$	1,589	1,574	1,702	1,954	1,745	1,543
$B_{13}N6$	1,573	1,588	1,542	1,744	1,959	1,703
$B_{13}N7$	1,752	1,624	1,627	1,581	1,740	1,716
LBNR	Bağ Uzunluğu(Å)					
Yapı	7.Bağ	8.Bağ	9.Bağ	10.Bağ	11.Bağ	12.Bağ
B_{14}	1,715	1,632	1,714	1,693	1,636	1,690
$B_{13}N1$	2,043	1,639	2,043	1,671	1,673	1,671
$B_{13}N2$	1,542	1,597	1,704	1,744	1,732	1,743
$B_{13}N3$	1,704	1,597	1,542	1,743	1,733	1,744
$B_{13}N4$	1,765	1,770	1,616	1,477	1,690	1,701
$B_{13}N5$	1,735	1,718	1,749	1,489	1,618	1,739
$B_{13}N6$	1,750	1,718	1,735	1,742	1,619	1,488
$B_{13}N7$	1,613	1,771	1,766	1,702	1,690	1,477



Şekil 5.12. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için bağ uzunluğu grafiği



Şekil 5.13. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ nanoşeritleri için bağ uzunluğu grafiği

Şekil 5.12’de doğrusal kenarlı saf bor ve karbonlu yapıların bağ uzunlukları değişimi verildi. Bağ uzunlukları grafiklerinin kesikli-çizgi ile verilmesi okuyucuya kolaylık sağlamak içindir. Şekil 5.12’deki grafik incelendiğinde; B_{14} nanoşeritinin en uzun bağının yedinci bağ (1,715Å), en kısa bağının ise sekizinci bağ (1,632Å) olduğu görüldü. Karbonlu yapılarda ise; $B_{13}C1$ nanoşeritinin en uzun bağının beşinci bağ (1,722Å) en kısa bağının üçüncü bağ (1,607Å); $B_{13}C2$ nanoşeritinin ise en uzun bağının dokuzuncu bağ (1,700Å) en kısa bağının üçüncü bağ (1,609Å) olduğu görüldü. $B_{13}C3$ nanoşeritinin en uzun bağının birinci bağ (1,688Å) en kısa bağının ise sekizinci bağ (1,597Å); $B_{13}C4$ nanoşeritinin en uzun bağının yedinci bağ (1,707Å) en kısa bağının ise onuncu bağ (1,603Å) olduğu görülür. $B_{13}C5$ nanoşeritinin en uzun bağının dokuzuncu bağ (1,721Å) en kısa bağının ise onuncu bağ (1,604Å); $B_{13}C6$ nanoşeritinin en uzun bağının yedinci bağ (1,721Å) en kısa bağının ise on ikinci bağ (1,604Å) olduğu görüldü. $B_{13}C7$ nanoşeritin ise en uzun bağının dokuzuncu bağ (1,698Å) en kısa bağının on ikinci bağ (1,580Å) olduğu görüldü.

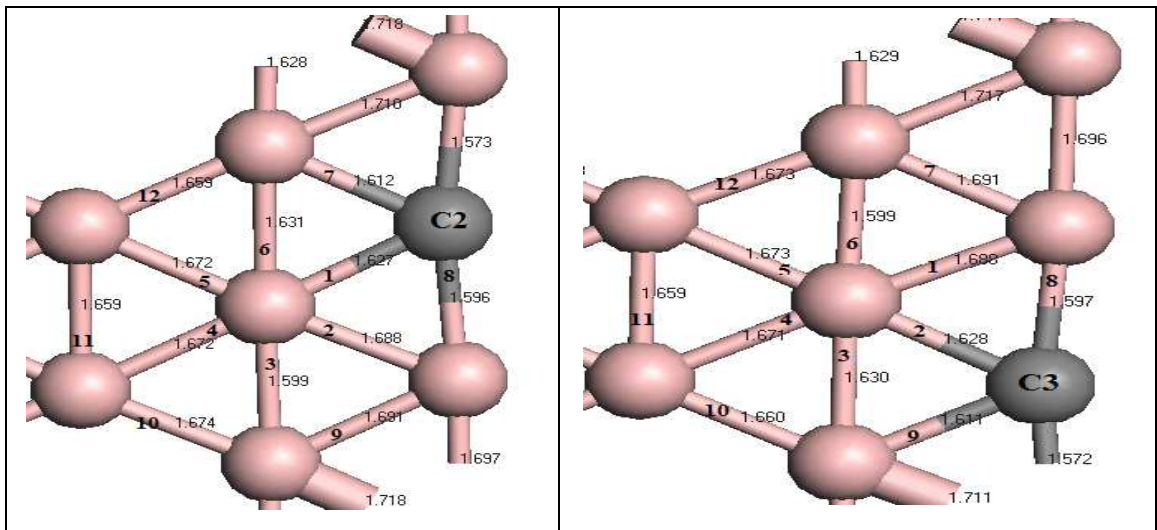
Şekil 5.13’te doğrusal kenarlı saf bor ve azotlu yapılar için bağ uzunlukları değişimi verildi. Şekil 5.13’teki grafik incelendiğinde; B_{14} nanoşeritinin en uzun bağının yedinci bağ (1,715Å), en kısa bağının sekizinci bağ (1,632Å) olduğu görüldü. Azotlu yapılarda ise; $B_{13}N1$ nanoşeritinin en uzun bağlarının dördüncü ve beşinci bağlar (2,442Å) en kısa bağlarının üçüncü ve altıncı bağlar (1,506Å); $B_{13}N2$ nanoşeritinin ise en uzun bağının birinci bağ (2,037Å) en kısa bağının ise yedinci bağ (1,542Å) olduğu görüldü. $B_{13}N3$ nanoşeritinin en uzun bağının ikinci bağ (2,037Å) en kısa bağının dokuzuncu bağ (1,542Å); $B_{13}N4$ nanoşeritinin en uzun bağının yedinci bağ (1,765Å) en kısa bağının onuncu bağ (1,477Å) olduğu görüldü. $B_{13}N5$ nanoşeritinin en uzun bağının dördüncü bağ (1,954Å) en kısa bağının altıncı bağ (1,543Å); $B_{13}N6$ nanoşeritinin ise en uzun bağının beşinci bağ (1,959Å) en kısa bağının on ikinci bağ (1,488Å) olduğu görüldü. Benzer şekilde, $B_{13}N7$ nanoşeritin en uzun bağının dokuzuncu bağ (1,766Å) en kısa bağının ise on ikinci bağ (1,477Å) olduğu görüldü.

Bağ uzunluğunun kısa olduğu yerlerdeki bağlar diğerlerine göre daha kuvvetlidir. O halde yapılardaki en kuvvetli bağların; saf bor yapıda (1,632Å) sekizinci bağ, $B_{13}C1$

yapısında (1,607Å) üçüncü bağ, B₁₃C2 yapısında (1,609Å) üçüncü bağ olduğu söylenebilir. Benzer şekilde, B₁₃C3 yapısında (1,597Å) sekizinci bağ, B₁₃C4 yapısında (1,603Å) onuncu bağ, B₁₃C5 yapısında (1,604Å) onuncu bağ olduğu sonucuna varılabilir. B₁₃C6 yapısında (1,604Å) on ikinci bağ, B₁₃C7 yapısında (1,580Å) on ikinci bağ olduğunu söyleyebiliriz. Karbonlu yapılara benzer şekilde, azotlu yapılarda en kuvvetli bağların; B₁₃N1 yapısında (1,506Å) üçüncü ve altıncı bağlar, B₁₃N2 yapısında (1,542Å) yedinci bağ olduğu görülür. B₁₃N3 yapısında (1,542Å) dokuzuncu bağ, B₁₃N4 yapısında (1,477Å) onuncu bağ, B₁₃N5 yapısında (1,543Å) altıncı bağ olduğu görülür. B₁₃N6 yapısında (1,488Å) on ikinci bağ, B₁₃N7 yapısında ise (1,477Å) on ikinci bağın en kuvvetli bağlar olduğunu söyleyebiliriz.

Genel olarak, azotlu yapıların bağ uzunluklarının karbonlu yapılara göre azaldığı görüldü. Böylece azotlu yapıların karbonlu yapılara göre daha kısa bağlarla oluşan daha küçük yapılar olduğunu söyleyebiliriz.

Daha önce de belirtildiği gibi karbonlu yapılarda karbon atomunun konumuna göre bazı yapıların (B₁₃C2=B₁₃C3, B₁₃C4=B₁₃C7, B₁₃C5=B₁₃C6) özdeş karakterde olduğu görüldü. Bu durumun daha iyi görülebilmesi açısından C2 ve C3 atomlarının bulunduğu hegzagondaki bağ uzunlukları Şekil 5.14'te verildi.



Şekil 5.14. C2 ve C3 atomlarının bulundukları hegzagondaki bağ uzunlukları

Şekil 5.14 incelendiğinde; $B_{13}C_2$ yapısının 1. bağının $B_{13}C_3$ yapısında 2. bağa, 7. bağının 9. bağa, 8. bağının 8. bağa karşılık geldiği görüldü. Benzer şekilde azotlu yapılar için de aynı yorumu yapabiliriz. O halde azotlu yapılarda ($B_{13}N_2=B_{13}N_3$, $B_{13}N_4=B_{13}N_7$, $B_{13}N_5=B_{13}N_6$) yapıları aynı karakterdeki yapılardır.

Bağ Mulliken Popülasyonu:

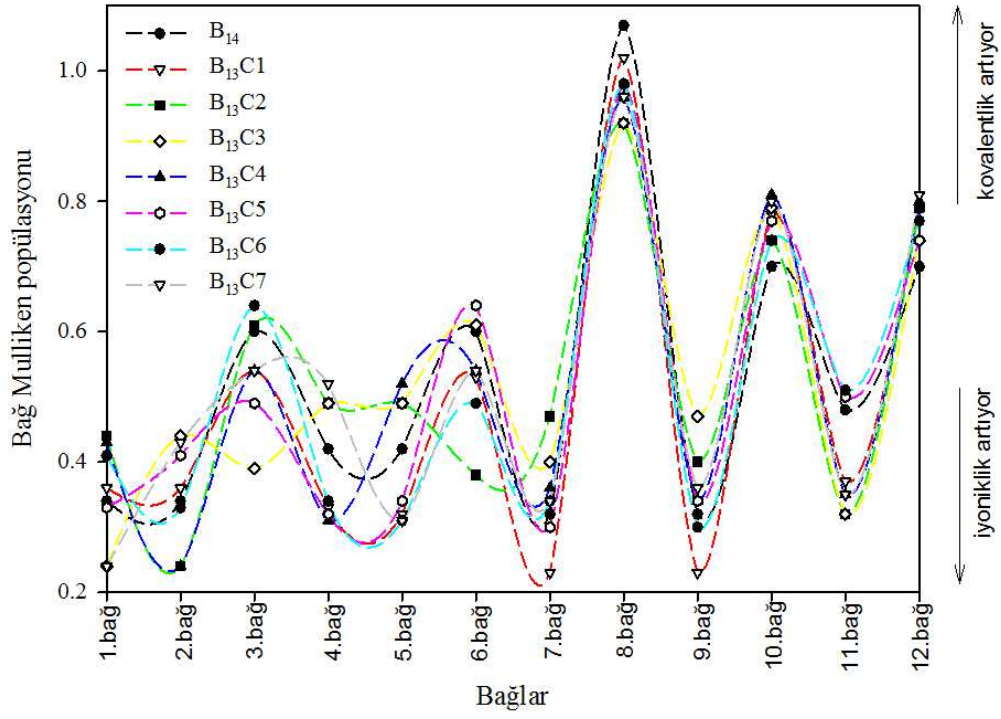
Çizelge 5.7. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ popülasyonu verileri

LBNR	Bağ Popülasyonu					
Yapı	1.Bağ	2.Bağ	3.Bağ	4.Bağ	5.Bağ	6.Bağ
B_{14}	0,340	0,340	0,600	0,420	0,420	0,600
$B_{13}C_1$	0,360	0,360	0,540	0,330	0,320	0,530
$B_{13}C_2$	0,440	0,240	0,610	0,490	0,490	0,380
$B_{13}C_3$	0,240	0,440	0,390	0,490	0,490	0,610
$B_{13}C_4$	0,430	0,240	0,540	0,310	0,520	0,540
$B_{13}C_5$	0,330	0,410	0,490	0,320	0,340	0,640
$B_{13}C_6$	0,410	0,330	0,640	0,340	0,310	0,490
$B_{13}C_7$	0,240	0,430	0,540	0,520	0,310	0,540
LBNR	Bağ Popülasyonu					
Yapı	7.Bağ	8.Bağ	9.Bağ	10.Bağ	11.Bağ	12.Bağ
B_{14}	0,320	1,070	0,320	0,700	0,480	0,700
$B_{13}C_1$	0,230	1,020	0,230	0,780	0,370	0,790
$B_{13}C_2$	0,470	0,920	0,400	0,740	0,320	0,790
$B_{13}C_3$	0,400	0,920	0,470	0,790	0,320	0,740
$B_{13}C_4$	0,360	0,960	0,340	0,810	0,350	0,800
$B_{13}C_5$	0,300	0,980	0,340	0,770	0,500	0,740
$B_{13}C_6$	0,340	0,980	0,300	0,740	0,510	0,770
$B_{13}C_7$	0,340	0,960	0,360	0,800	0,350	0,810

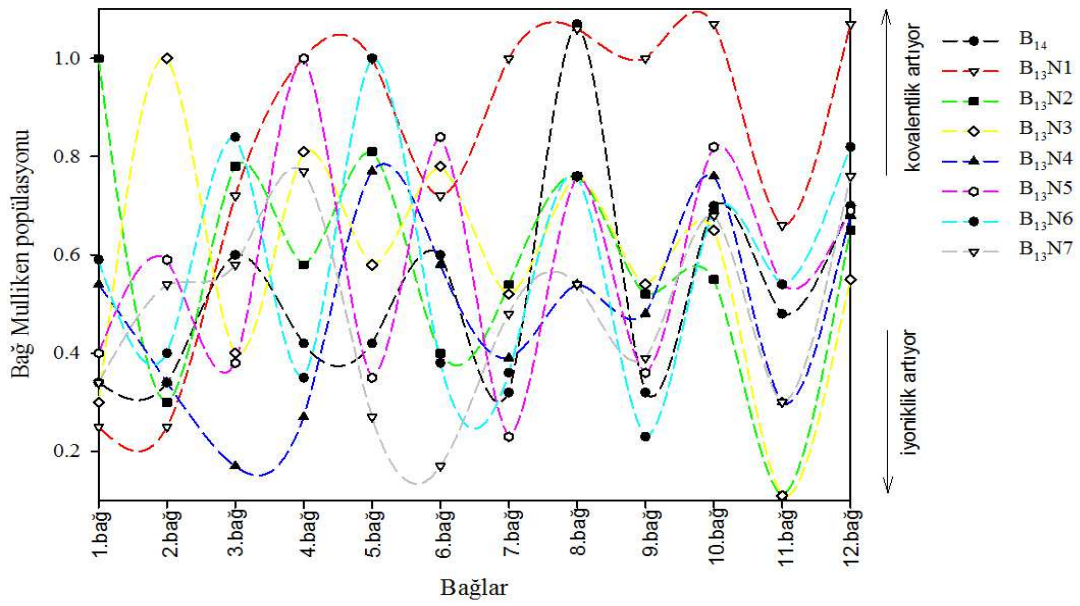
Çizelge 5.8. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ ($n=1,2,3,4,5,6,7$) nanoşeritlerinin bağ popülasyonu verileri

LBNR	Bağ Popülasyonu					
Yapı	1.Bağ	2.Bağ	3.Bağ	4.Bağ	5.Bağ	6.Bağ
B_{14}	0,340	0,340	0,600	0,420	0,420	0,600
$B_{13}N_1$	0,250	0,250	0,720	1,000	1,000	0,720
$B_{13}N_2$	1,000	0,300	0,780	0,580	0,810	0,400
$B_{13}N_3$	0,300	1,000	0,400	0,810	0,580	0,780
$B_{13}N_4$	0,540	0,340	0,170	0,270	0,770	0,580
$B_{13}N_5$	0,400	0,590	0,380	1,000	0,350	0,840
$B_{13}N_6$	0,590	0,400	0,840	0,350	1,000	0,380
$B_{13}N_7$	0,340	0,540	0,580	0,770	0,270	0,170
LBNR	Bağ Popülasyonu					
Yapı	7.Bağ	8.Bağ	9.Bağ	10.Bağ	11.Bağ	12.Bağ
B_{14}	0,320	1,070	0,320	0,700	0,480	0,700
$B_{13}N_1$	1,000	1,060	1,000	1,070	0,660	1,070
$B_{13}N_2$	0,540	0,760	0,520	0,550	0,110	0,650
$B_{13}N_3$	0,520	0,760	0,540	0,650	0,110	0,550
$B_{13}N_4$	0,390	0,540	0,480	0,760	0,300	0,680
$B_{13}N_5$	0,230	0,760	0,360	0,820	0,540	0,690
$B_{13}N_6$	0,360	0,760	0,230	0,690	0,540	0,820
$B_{13}N_7$	0,480	0,540	0,390	0,680	0,300	0,760

Çizelge 5.7 ‘de doğrusal kenarlı saf bor ve karbonlu yapıların, Çizelge 5.8’de ise saf bor ve azotlu yapıların bağ Mulliken popülasyon değerleri verildi.



Şekil 5.15. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}C_n$ nanoşeritleri için bağ Mulliken popülasyonu grafiği



Şekil 5.16. Doğrusal kenarlı B_{14} ve $B_{13}N_n$ nanoşeritlerinin bağ Mulliken popülasyonu grafiği

Şekil 5.15'te doğrusal kenarlı saf bor ve karbonlu yapıların Şekil 5.16'da ise doğrusal kenarlı saf bor ve azotlu yapıların bağ Mulliken popülasyon grafikleri verildi. Bir kristal sistemde bağ Mulliken popülasyonu arttıkça kovalentlik artar, bağ Mulliken popülasyonu azaldıkça iyoniklik artar.

Buna göre; Şekil 5.15 ve Şekil 5.16'daki grafikler incelendiğinde; B_{14} nanoşeritinin sekizinci bağının en kovalent bağ (1,070), birinci ve ikinci bağlarının da en iyonik bağ (0,340) olduğu görüldü. Benzer şekilde, $B_{13}C1$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (1,020), en iyonik bağının ise yedinci ve dokuzuncu bağlar (0,230) olduğu görüldü. $B_{13}C2$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (0,920), en iyonik bağının ise ikinci bağ (0,240); $B_{13}C3$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (0,920), en iyonik bağının ise birinci bağ (0,240) olduğu görüldü. $B_{13}C4$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (0,960), en iyonik bağının ise ikinci bağ (0,240); $B_{13}C5$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (0,980), en iyonik bağının ise yedinci bağ (0,300) olduğu görüldü. $B_{13}C6$ nanoşeritinin en kovalent bağının sekizinci bağ (0,980), en iyonik bağının ise beşinci bağ (0,310); $B_{13}C7$ nanoşeritinin ise en kovalent bağının sekizinci bağ (0,960), en iyonik bağının birinci bağ (0,240) olduğunu söyleyebiliriz.

Bundan sonraki kesimde saf bor nanoşeritleri ile özdeş yapısal özellikteki $B_{13}C2=B_{13}C3$, $B_{13}C4=B_{13}C7$ ve $B_{13}C5=B_{13}C6$ ve benzer şekilde azotlu yapıların elektronik özellikleri incelenecektir. $B_{13}C1$, $B_{13}C2$, $B_{13}C4$ ve $B_{13}C5$ yapıları ile $B_{13}N1$, $B_{13}N2$, $B_{13}N4$ ve $B_{13}N5$ yapılarının elektronik bandları ve enerji durum yoğunlukları verilmiştir.

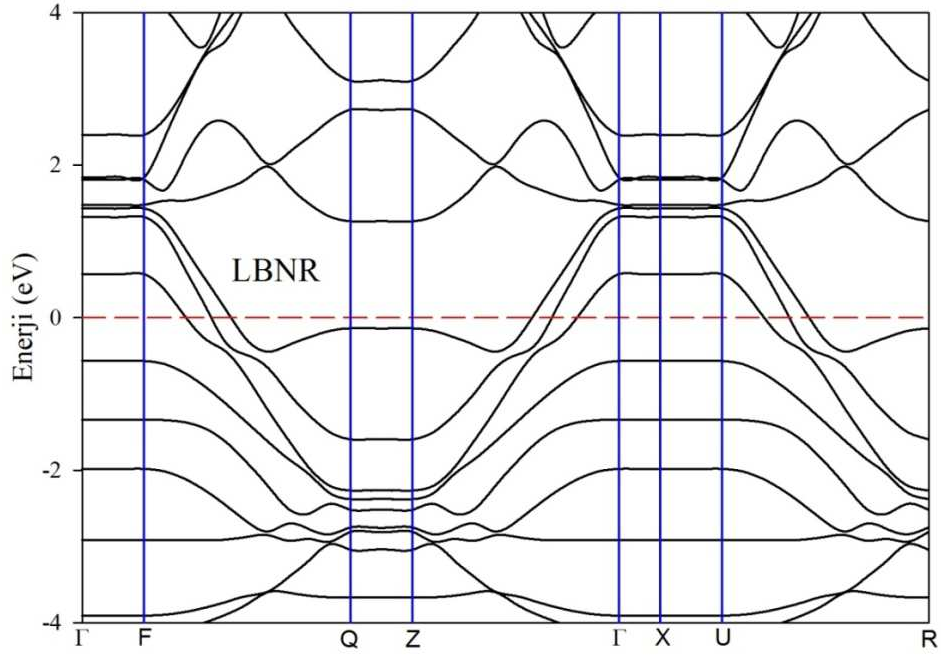
5.1.1. Doğrusal kenarlı B₁₄ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Doğrusal kenarlı, triklinik, saf B₁₄ nanoşeritinin geometri optimizasyonu yapıldı. Optimizasyon sonunda, serbest bırakılan c örgü parametresinin 4,912Å (GGA), 4,879Å (LDA) olduğu görüldü.

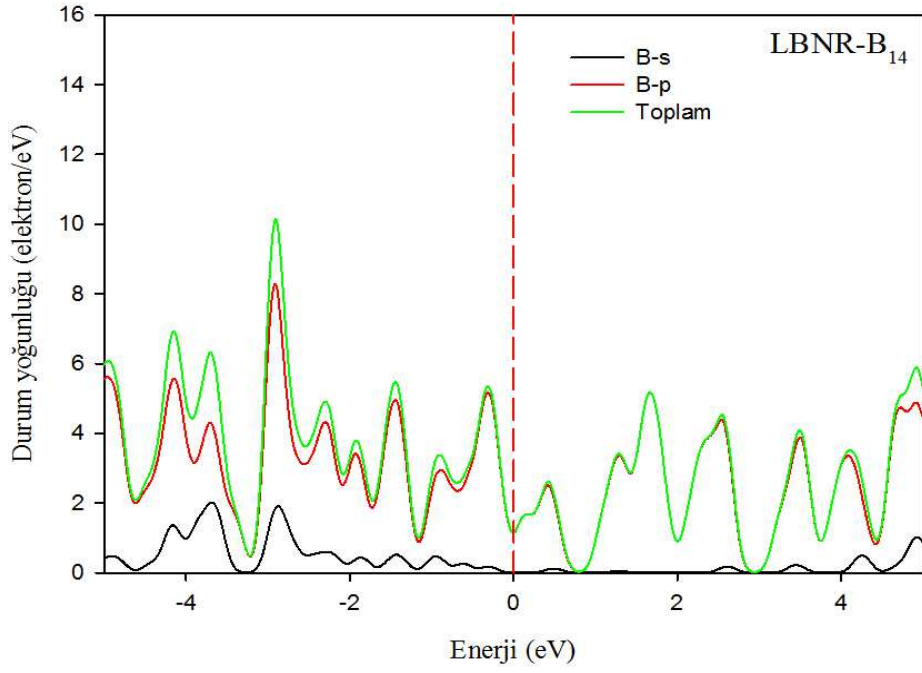
Band Yapısı:

Kristallerdeki elektronlar, elektron yörüngelerinin bulunamadığı enerji bölgeleriyle ayrılmış enerji bandları içinde yer alırlar. Bu yasak bölgeler *enerji aralıkları* veya *band aralıkları* olarak adlandırılır. En düşük boş banda iletkenlik bandı ve elektron seviyeleriyle doldurulmuş en yüksek banda *valans bandı* denir. Valans bandı, kristaldeki her bir atom tarafından verilen valans elektronlarının sayısı ve band içinde mevcut olan elektron seviyeleri arasındaki orana bağlı olarak, tamamıyla veya kısmen dolu olabilir. Valans bandın doldurulması ve valans bandı ile iletkenlik bandı arasındaki enerji aralığının büyüklüğü, bir kristalin iletkenlik, yarıiletkenlik veya yalıtkanlık karakterini tanımlar [44]. Valans bandının maksimumu ile iletim bandının minimumu arasındaki enerji farkı yarıiletken ve yalıtkan malzemelerin *yasak enerji* aralığını verir. Yarıiletken ve yalıtkanlarda yasak enerji aralığı Fermi seviyesidir. Metallerde ise valans bandı ve iletim bandı çakışmıştır. Yani yasak enerji aralığı yoktur [45].

Doğrusal kenarlı B₁₄ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.17’de verildi. Şekil 5.17’deki grafik incelendiğinde; yukarıdaki açıklamalar doğrultusunda, B₁₄ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi.

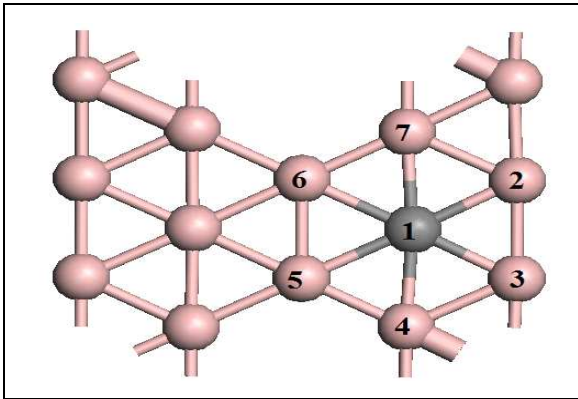


Şekil 5.17. B₁₄ nanoşeritinin band yapısı



Şekil 5.18. B₁₄ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

Şekil 5.18’de B_{14} nanoşeritinin karbon ve bor atomlarının s,p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.18’deki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının (enerji band grafiğinde olduğu gibi), metal karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ding ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada [42] da doğrusal kenarlı saf bor nanoşeritlerinin metalik karakterde olduğu görülmektedir. Dolayısıyla sonuçlarımız literatürle uyum içerisindedir. Ayrıca bor atomlarının s orbitallerinin katkısının çok zayıf olduğu p orbitallerinin ise neredeyse toplam durum yoğunluğuna eşit olduğu görüldü. Dolayısıyla bor atomlarının bağ yapmak için son yörüngesindeki yani p orbitalindeki elektronları kullandığı söylenebilir. Şekil 5.19’da doğrusal kenarlı bor nanoşeritler için bor ve karbon atomlarının konumları verildi.



Şekil 5.19. Doğrusal kenarlı bor nanoşeritleri için bor ve karbon atomlarının konumları

Saf yapıda seçilen bir hekzagonun 1. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C1$, 2. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C2$, 3. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C3$ olarak adlandırıldı. Benzer şekilde; 4. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C4$, 5. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C5$, 6. konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C6$ ve 7.

konumundaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturulan nanoşerit $B_{13}C_7$ formülasyonu ile adlandırıldı.

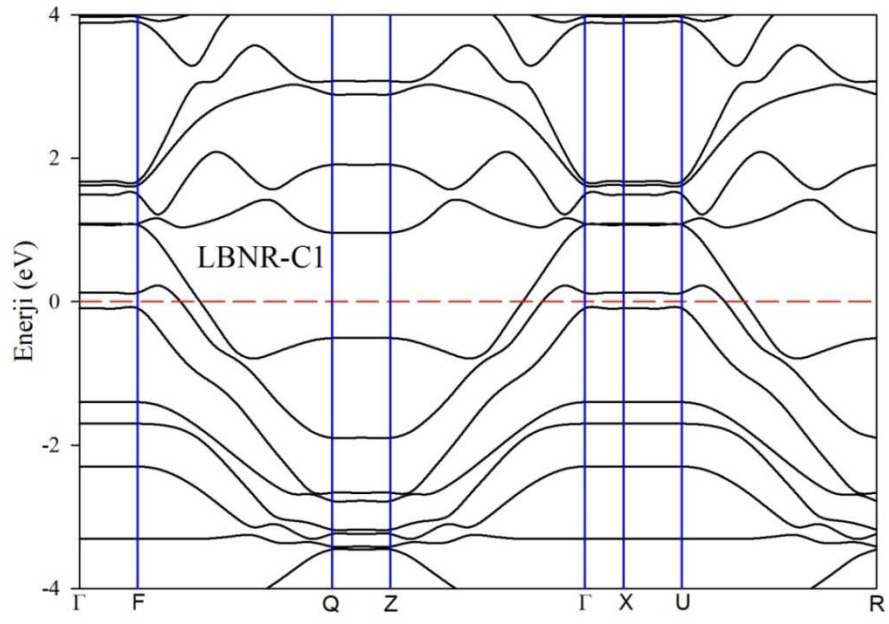
5.1.2. Doğrusal kenarlı $B_{13}C_1$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Doğrusal kenarlı $B_{13}C_1$ nanoşeriti; saf yapının, seçilen bir hekzagonunda 1 nolu bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle elde edilerek, yapının geometri optimizasyonu yapıldı.

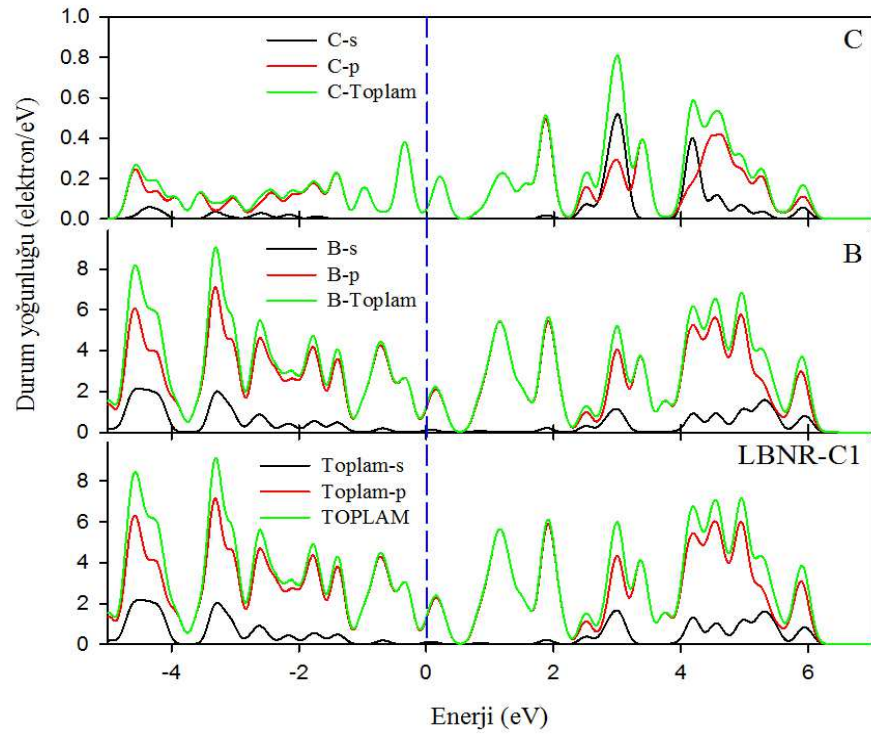
Optimizasyon sonucunda kristalin serbest bırakılan c parametresinin saf yapıya ($4,912\text{\AA}$) göre azalarak $4,885\text{\AA}$ olduğu görüldü. Buradan hareketle bu yapının saf yapıya göre daha sıkı paketlenmiş olduğunu söyleyebiliriz. $B_{13}C_1$ yapısının toplam enerjisinin ($-1150,602\text{ eV}$) saf yapınınkinden ($-1074,945\text{ eV}$) daha küçük olduğu görüldü.

Şekil 5.20’de doğrusal kenarlı $B_{13}C_1$ nanoşeritinin band yapısı, Şekil 5.21’de karbon ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Şekil 5.20’deki grafik incelendiğinde; $B_{13}C_1$ yapısının, saf yapıyla benzer şekilde yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini (0 eV) kestiği, yapının seçilen Fermi düzeyinde bulunmadığı görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca saf yapıyla benzer şekilde Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) ve altındaki (valans bandındaki) enerji bandlarının saf yapıda Fermi seviyesinden uzak iken $B_{13}C_1$ yapısında bu bandların Fermi seviyesine yaklaştığı görüldü.

Şekil 5.21’deki grafik incelendiğinde; s ve p orbitallerinin katkıları incelendiğinde; hem karbon hem de bor atomlarının p orbitallerinin katkılarının toplam durum yoğunluğuna çok yakın olduğu görüldü. Dolayısıyla bor atomunun son yörüngesindeki çiftlenmemiş ($1s^2 2s^2 2p^1$) elektronun karbon atomunun son yörüngesindeki ($1s^2 2s^2 2p^2$) elektronlarla bağ yaptığı sonucuna varılabilir.



Şekil 5.20. B₁₃C₁ nanoşeritinin band yapısı



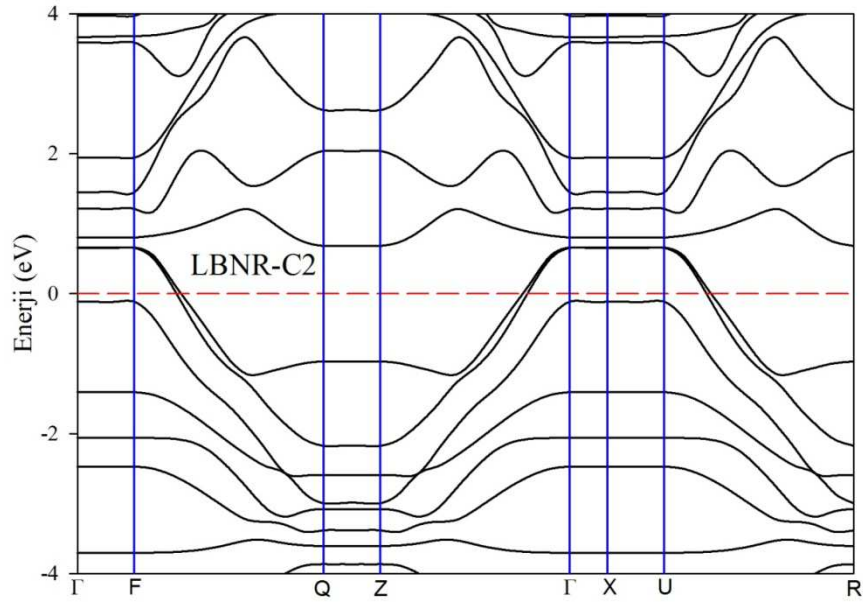
Şekil 5.21. B₁₃C₁ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

5.1.3. Doğrusal kenarlı B₁₃C₂ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

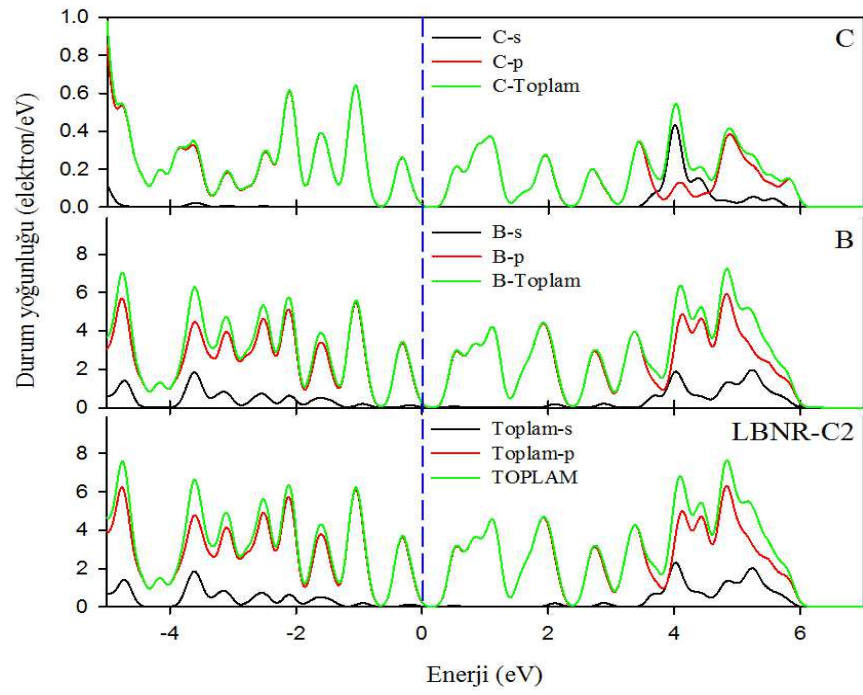
Doğrusal kenarlı B₁₃C₂ (=B₁₃C₃) nanoşeriti; saf yapının, seçilen bir hekzagonunda 2. konumdaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle elde edilerek, geometri optimizasyonu yapıldı. Optimizasyon sonucunda kristalin serbest bırakılan c parametresinin saf yapıya (4,912Å) göre azalarak, B₁₃C₁ yapısına (4,885Å) göre artarak 4,888Å olduğu görüldü. Buradan hareketle bu yapının saf yapıya göre daha küçük hacimli, B₁₃C₁ yapısına göre daha büyük hacimli olduğunu söyleyebiliriz.

Doğrusal kenarlı B₁₃C₂ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.22’de verildi. Şekil 5.22’deki grafik incelendiğinde; B₁₃C₂ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında B₁₃C₁ yapısına benzer şekilde, yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) enerji bandının saf yapıdaki ile hemen hemen aynı konumda iken, Fermi seviyesinin hemen altındaki (valans bandındaki) bandın Fermi seviyesine yaklaştığı görüldü. B₁₃C₁ yapısı ile karşılaştırıldığında ise, Fermi seviyesinin hemen üstünde bulunan bandın Fermi seviyesinden uzaklaşarak saf yapınıninkine benzediği, Fermi seviyesinin hemen altındaki bandın ise B₁₃C₁ yapısıyla aynı konuma geldiği görüldü.

Şekil 5.23’te B₁₃C₂ nanoşeritinin karbon ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. B₁₃C₁ yapısına benzer şekilde, Fermi seviyesi yine 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.23’teki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece B₁₃C₂ yapısının da metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı.



Şekil 5.22. B₁₃C₂ nanoşeritinin band yapısı



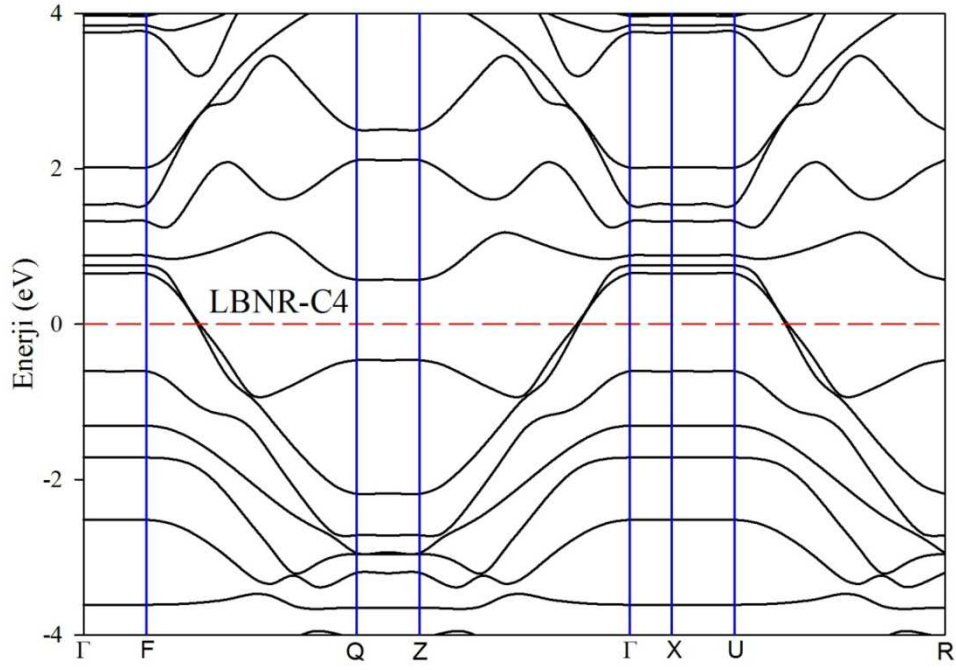
Şekil 5.23. B₁₃C₂ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

5.1.4. Doğrusal kenarlı $B_{13}C_4$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

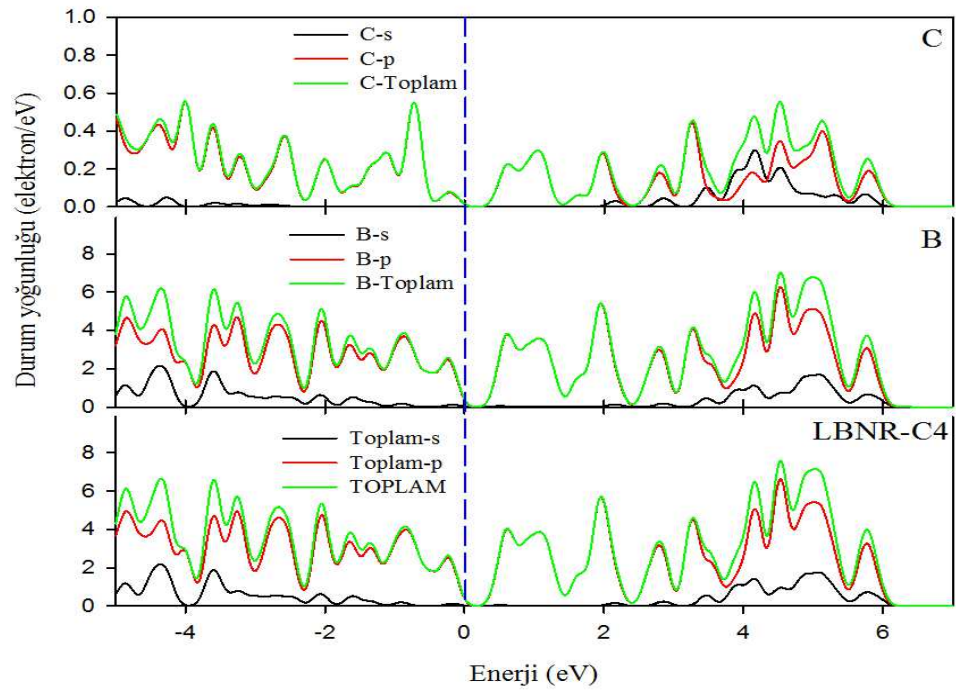
Doğrusal kenarlı $B_{13}C_4$ ($=B_{13}C_7$) nanoşeriti saf bor yapının seçilen bir hegzagonunda 4. konumdaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi.

Doğrusal kenarlı $B_{13}C_4$ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.24'te verildi. Şekil 5.24'teki grafik incelendiğinde; $B_{13}C_4$ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca saf yapı ve bir karbonlu yapılarla benzer şekilde Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) ve altındaki (valans bandındaki) enerji bandlarının saf yapıdaki ile hemen hemen aynı konumda olduğu görüldü.

Şekil 5.25'te $B_{13}C_4$ nanoşeritinin karbon ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Tüm yapılarda olduğu gibi, Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.25'teki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının (enerji band grafiğinde olduğu gibi), metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı.



Şekil 5.24. B₁₃C₄ nanoşeritinin band yapısı



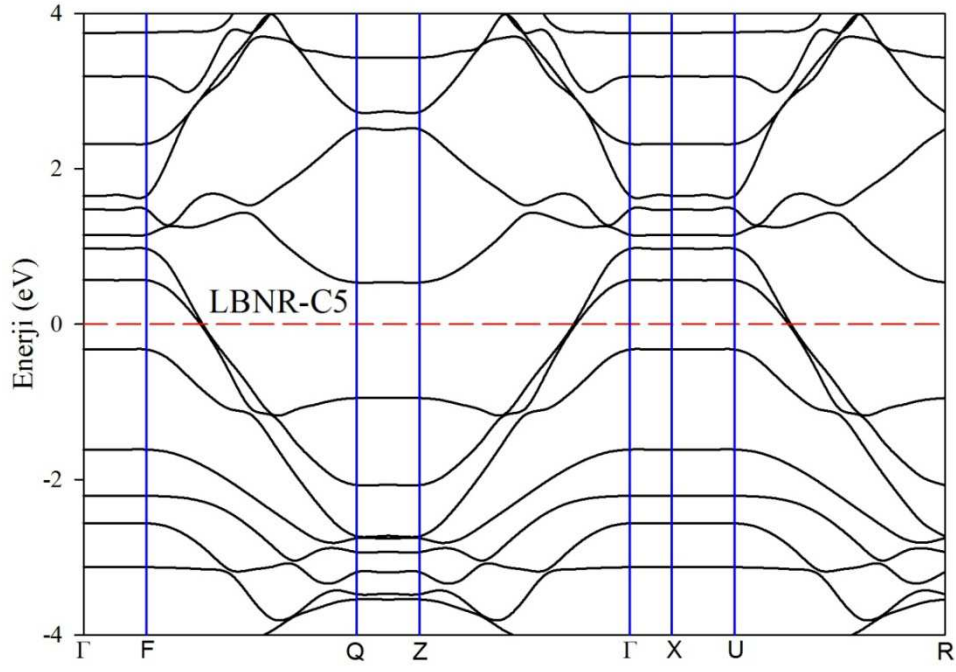
Şekil 5.25. B₁₃C₄ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

5.1.5. Doğrusal kenarlı $B_{13}C_5$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

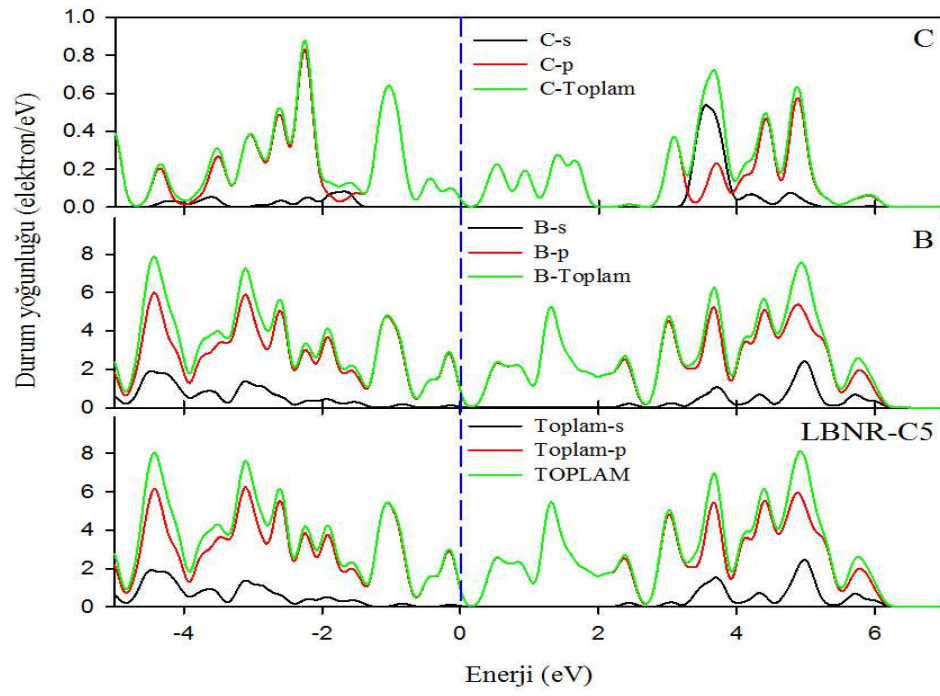
Doğrusal kenarlı $B_{13}C_5$ ($=B_{13}C_6$) nanoşeriti saf bor yapının seçilen bir hegzagonunda 5. konumdaki bor atomunun karbon atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi.

Doğrusal kenarlı $B_{13}C_5$ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.26'da verildi. Şekil 5.26'daki grafik incelendiğinde; $B_{13}C_5$ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca $B_{13}C_4$ yapısıyla benzer şekilde; Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) enerji bandının saf yapıdaki ile hemen hemen aynı konumda olduğu halde, Fermi seviyesinin hemen altındaki (valans bandındaki) enerji bandının saf yapıda Fermi seviyesinden biraz uzakta iken, $B_{13}C_5$ yapısında Fermi seviyesine yaklaştığı görüldü.

Şekil 5.27'de $B_{13}C_5$ nanoşeritinin karbon ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.27'deki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece bu yapının da metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı.



Şekil 5.26. B₁₃C₅ nanoşeritinin band yapısı



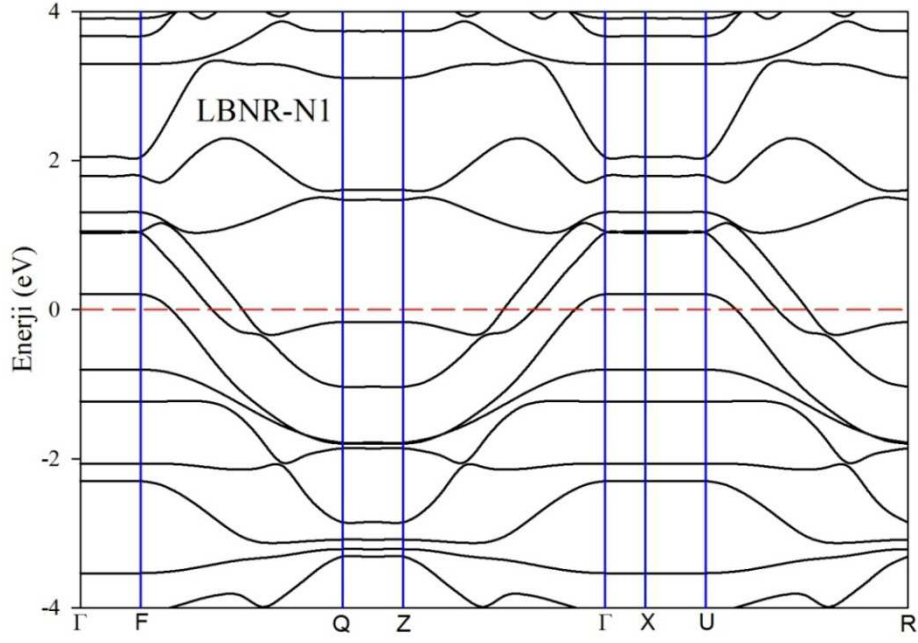
Şekil 5.27. B₁₃C₅ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

5.1.6. Doğrusal kenarlı B₁₃N1 nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

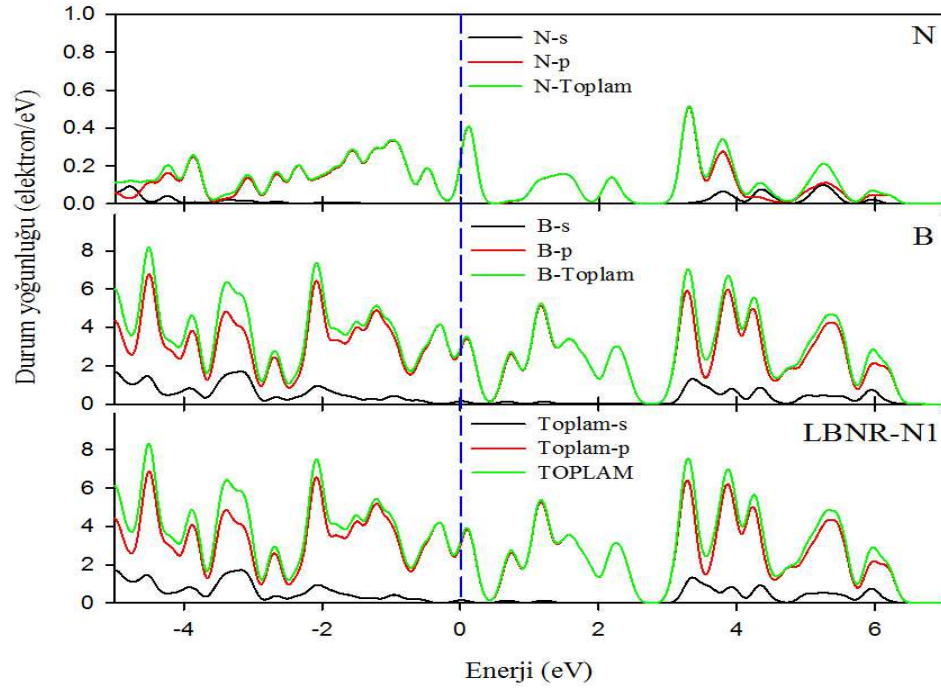
Doğrusal kenarlı B₁₃N1 nanoşeriti karbonlu yapılarla benzer şekilde; saf bor yapının seçilen bir hegzagonunda 1. konumundaki bor atomunun azot atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi.

Doğrusal kenarlı B₁₃N1 nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.28’de verildi. Şekil 5.28’deki grafik incelendiğinde; karbonlu yapıda (B₁₃C1) olduğu gibi B₁₃N1 yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) enerji bandının saf yapıda Fermi seviyesinden biraz uzakta iken B₁₃N1 yapısında bu bandın Fermi seviyesine yaklaştığı, Fermi seviyesinin hemen altındaki (valans bandındaki) enerji bandının ise saf yapıdaki band ile hemen hemen aynı konumda olduğu görüldü. B₁₃C1 yapısı ile karşılaştırıldığında ise, Fermi seviyesinin üstündeki bandın B₁₃C1 yapısında Fermi seviyesine çok yakinken B₁₃N1 yapısında Fermi seviyesinden biraz uzaklaştığı; Fermi seviyesinin altındaki bandın ise B₁₃C1 yapısında Fermi seviyesine çok yakinken B₁₃N1 yapısında bu bandın valans bandına doğru kaydığı görüldü.

Şekil 5.29’da doğrusal kenarlı B₁₃N1 nanoşeritinin azot ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Fermi seviyesi burada da 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.29’daki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece bu yapının (enerji band grafiğinde olduğu gibi), metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca durum yoğunluğu grafiğinde bor atomlarının Fermi seviyesi civarındaki piklerinin toplam durum yoğunluğu pikleriyle birebir örtüştüğü görüldü. Bu da bor atomlarının bu yapıda çok iyi bağlandıklarını gösterir.



Şekil 5.28. B₁₃N₁ nanoşeritinin band yapısı



Şekil 5.29. B₁₃N₁ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

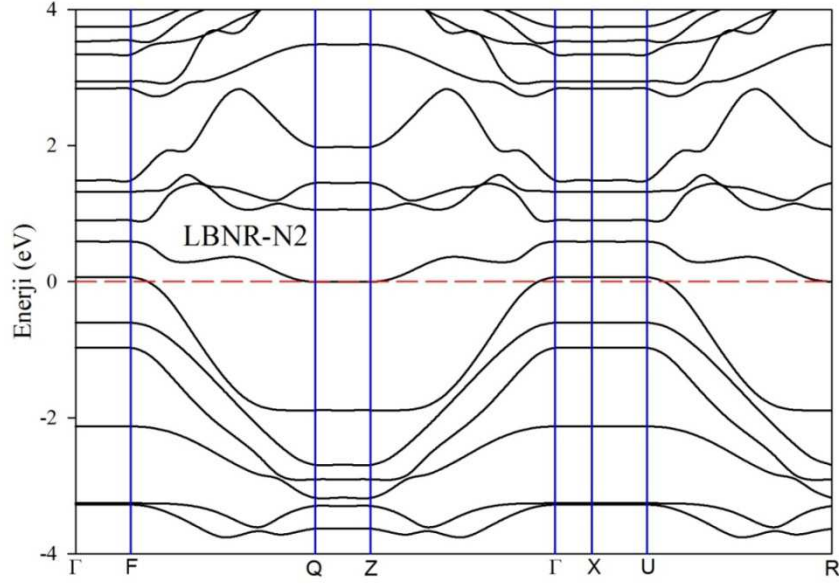
5.1.7. Doğrusal kenarlı $B_{13}N_2$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Doğrusal kenarlı $B_{13}N_2(=B_{13}N_3)$ nanoşeriti, saf bor yapının seçilen bir hekzagonunda 2. konumdaki bor atomunun azot atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Karbonlu yapılarda olduğu gibi azotlu yapılarda da $B_{13}N_2$ ile $B_{13}N_3$ 'ün aynı yapılar olması ile durum yoğunluğu ve enerji band grafikleri sadece $B_{13}N_2$ yapısı için incelenecektir.

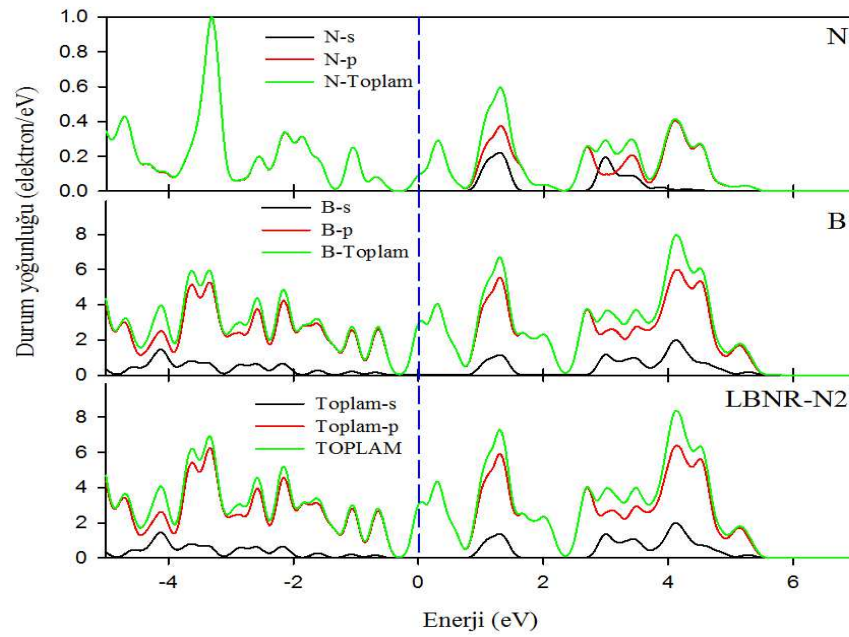
Doğrusal kenarlı $B_{13}N_2$ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.30'da verildi. Şekil 5.30'daki grafik incelendiğinde; $B_{13}N_2$ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca $B_{13}N_1$ yapısında olduğu gibi bu yapıda da Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) enerji bandının saf yapıda Fermi seviyesinden biraz uzakta iken $B_{13}N_2$ yapısında bu bandın Fermi seviyesine yaklaşarak neredeyse Fermi seviyesiyle çakıştığı, Fermi seviyesinin hemen altındaki (valans bandındaki) enerji bandının ise saf yapıdakine göre Fermi seviyesine biraz daha yaklaştığı görüldü. $B_{13}C_2$ yapısı ile karşılaştırıldığında ise, Fermi seviyesinin üstündeki bandın $B_{13}C_2$ yapısında Fermi seviyesinden biraz uzaktayken $B_{13}N_2$ yapısında bu bandın Fermi seviyesine iyice yaklaşarak neredeyse Fermi seviyesiyle çakıştığı; Fermi seviyesinin altındaki bandın ise $B_{13}C_2$ yapısında Fermi seviyesine yakinken $B_{13}N_2$ yapısında bu bandın Fermi seviyesinden uzaklaşarak valans bandına doğru kaydığı görüldü.

Şekil 5.31'de $B_{13}N_2$ nanoşeritinin azot ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Yine burada da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.31'deki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının (band grafiğinde olduğu gibi), metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca DOS grafiğinde, Fermi seviyesi civarında bor atomlarının piklerinin toplam durum yoğunluğu pikleriyle

birebir örtüştüğü görüldü. Buradan hareketle bor atomlarının kendi aralarında çok iyi bağlandıklarını söyleyebiliriz.



Şekil 5.30. $B_{13}N_2$ nanoşeritinin band yapısı



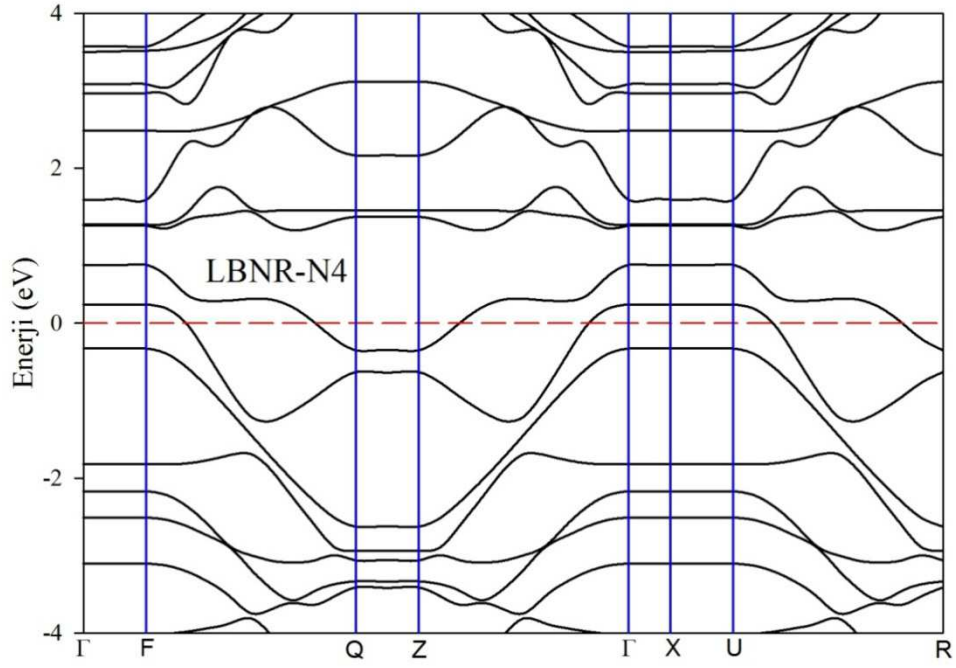
Şekil 5.31. $B_{13}N_2$ nanoşeriti için durum yoğunluğu (DOS)

5.1.8. Doğrusal kenarlı $B_{13}N_4$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

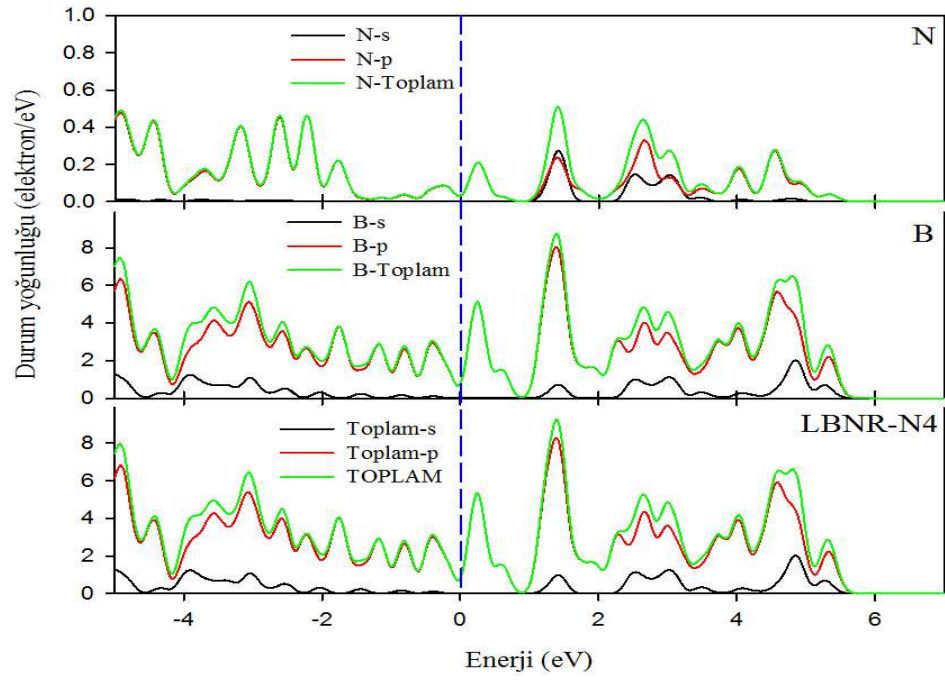
Doğrusal kenarlı $B_{13}N_4$ ($=B_{13}N_7$) nanoşeriti saf bor yapının seçilen bir hekzagonunda 4. konumdaki bor atomunun azot atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. $B_{13}N_4$ ile $B_{13}N_7$ 'nin aynı yapılar olması ile durum yoğunluğu ve enerji band grafikleri sadece $B_{13}N_4$ yapısı için incelenecektir.

Doğrusal kenarlı $B_{13}N_4$ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.32'de verildi. Şekil 5.32'deki grafik incelendiğinde; $B_{13}N_4$ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca $B_{13}N_2$ yapısında olduğu gibi bu yapıda da Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) ve altındaki (valans bandındaki) enerji bandlarının saf yapıya göre Fermi seviyesine yaklaştığı görüldü. $B_{13}C_4$ yapısı ile karşılaştırıldığında ise, Fermi seviyesinin üstündeki ve altındaki enerji banlarının $B_{13}C_4$ yapısındakine göre Fermi seviyesine yaklaştığı görüldü.

Şekil 5.33'de $B_{13}N_4$ nanoşeritinin azot ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Diğer yapılarda olduğu gibi bu yapıda da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.33'deki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının (enerji band grafiğinde olduğu gibi), metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca durum yoğunluğu incelendiğinde; bor atomlarının Fermi seviyesi civarındaki piklerinin toplam durum yoğunluğu pikleriyle birebir örtüştüğü, fakat azot atomlarının piklerinin zayıf kaldığı görüldü. Dolayısıyla bor atomlarının kendi aralarında çok iyi bağ yaptıklarını ancak azot atomlarıyla yapılan bağlanmanın zayıf olduğu söylenebilir.



Şekil 5.32. B₁₃N₄ nanoşeritinin band yapısı



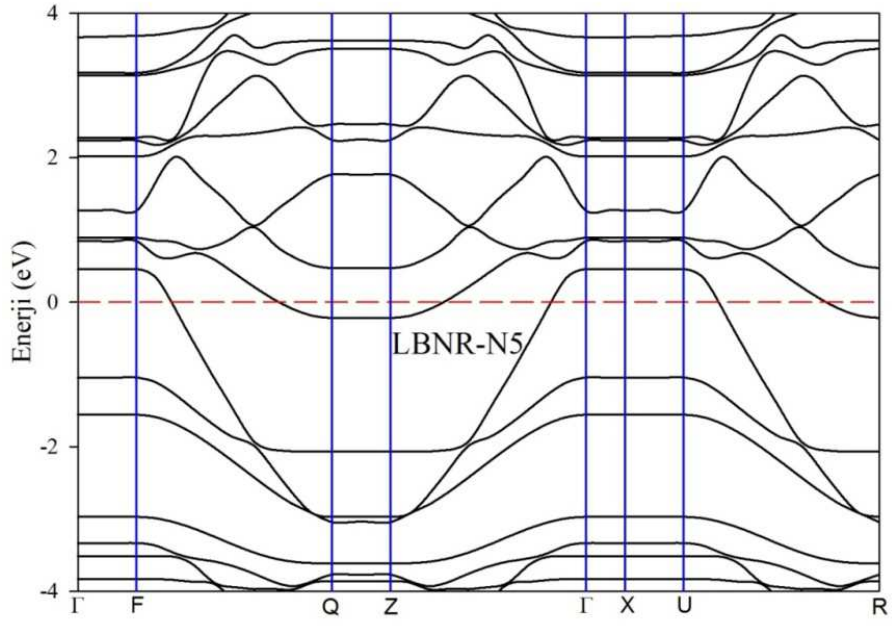
Şekil 5.33. B₁₃N₄ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

5.1.9. Doğrusal kenarlı $B_{13}N_5$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

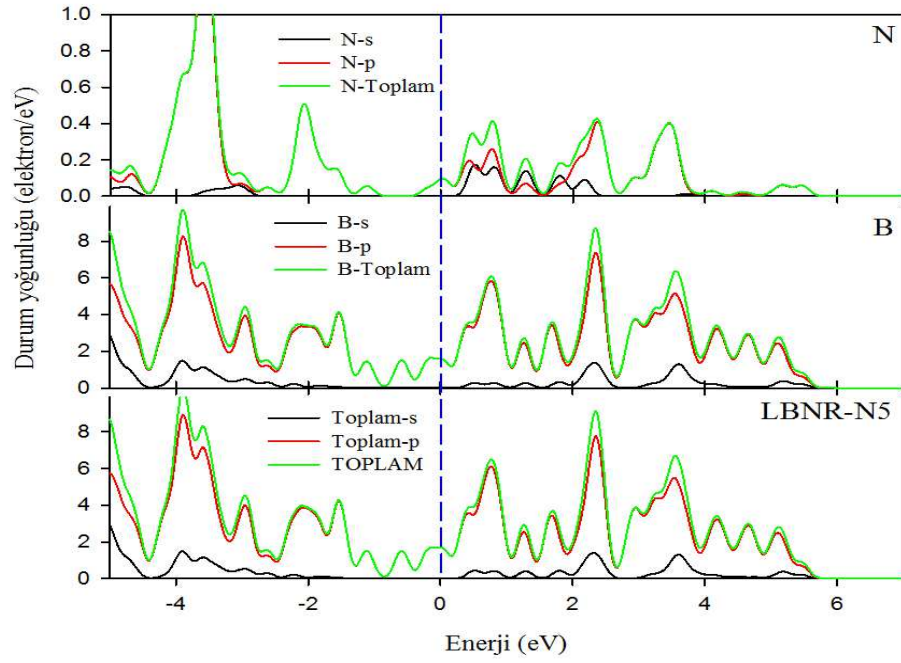
Doğrusal kenarlı $B_{13}N_5$ ($=B_{13}N_6$) nanoşeriti saf bor yapının seçilen bir hekzagonda 5. konumundaki bor atomunun azot atomuyla değiştirilmesiyle oluşturuldu Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. $B_{13}N_5$ ile $B_{13}N_6$ 'nın aynı yapılar olması ile durum yoğunluğu ve enerji band grafikleri sadece $B_{13}N_5$ yapısı için incelenecektir.

Doğrusal kenarlı $B_{13}N_5$ nanoşeritinin band yapısı Şekil 5.34'te verildi. Şekil 5.34'teki grafik incelendiğinde; $B_{13}N_5$ yapısının yasak enerji aralığına sahip olmadığı, bazı bandların Fermi seviyesini kestiği görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca $B_{13}N_4$ yapısıyla benzer şekilde bu yapıda da Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandlar gözlemlendi. Fermi seviyesinin hemen üstündeki (iletim bandındaki) enerji bandının saf yapıdakine göre Fermi seviyesine yaklaştığı, Fermi seviyesinin hemen altındaki (valans bandındaki) enerji bandının ise saf yapıdakine göre Fermi seviyesinden uzaklaşarak valans bandına doğru kaydığı görüldü. $B_{13}C_5$ yapısı ile karşılaştırıldığında ise, Fermi seviyesinin üstündeki bandın $B_{13}C_5$ yapısındakine göre Fermi seviyesine yaklaştığı; Fermi seviyesinin altındaki bandın ise $B_{13}C_5$ yapısındakine göre Fermi seviyesinden uzaklaşarak valans bandına doğru kaydığı görüldü.

Şekil 5.35'te $B_{13}N_5$ nanoşeritinin azot ve bor atomlarının s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Yine burada da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.35'teki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının (enerji band grafiğinde olduğu gibi), metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca durum yoğunluğu incelendiğinde; bor atomlarının Fermi seviyesi civarındaki piklerinin toplam durum yoğunluğu pikleriyle birebir örtüştüğü, fakat azot atomunun piklerinin biraz zayıf kaldığı görüldü. Buradan hareketle bor atomlarının kendi aralarında çok iyi bağlandıkları ancak azot atomlarıyla yapılan bağın zayıf olduğu söylenebilir.



Şekil 5.34. B₁₃N₅ nanoşeritinin band yapısı



Şekil 5.35. B₁₃N₅ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

Genel olarak; saf bor nanoşerit ve bir bor atomunun karbon veya azotla yer değiştirilmesi ile oluşturulan yeni yapılarda dikkat çeken en önemli özellik elektronik band yapıları ve durum yoğunlukları grafiklerinde görülmektedir. Özellikle bir örgünün yüksek simetri noktalarında Γ -F, Q-Z, Γ -X-U doğrultularında Fermi seviyesi yakınlarında yatay bandları dikkat çekicidir. Bu yatay bandların süper iletken yapı özelliği gösteren MgB_2 gibi bor tabakalı yapılardakilere benzemesi [46] yeni oluşturulan nanoşeritlerin süper iletken yapılar olabileceği ümidini beraberinde getirmektedir. Bundan sonraki kısımda zigzag kenarlı bor nanoşeritlerin yapısal ve elektronik özellikleri incelenecektir.

5.2. Zigzag Kenarlı Bor Nanoşeritlerinin (ZBNR) Yapısal ve Elektronik Özellikleri

Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] zigzag kenarlı saf bor nanoşeritler oluşturulmuş ve bunlar farklı sayılardaki hidrojen atomlarıyla pasifize edilmiştir. Çalışmamızda bu çalışmaya ek olarak saf bor yapının dış kenar bor atomlarına farklı konumlarda ve sayılarda hidrojen atomları eklenerek bunların yapısal ve elektronik özellikleri tartışıldı.

Zigzag kenarlı triklinik saf bor (B_{28}) nanoşeritler oluşturuldu. Bu saf yapıya farklı sayılarda ve konumlarda hidrojen atomları ilave edilerek yeni nanoşeritler oluşturuldu. Geometri optimizasyonları yapılarak tüm yapıların yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Optimizasyon sonucunda kristalin serbest bırakılan c parametresinin $8,723\text{\AA}$ olduğu görüldü.

Çizelge 5.9’da zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}H_n$ ($n=1,2,3$) nanoşeritlerinin toplam enerjileri, enerji farkları ve bağlanma enerjileri verildi.

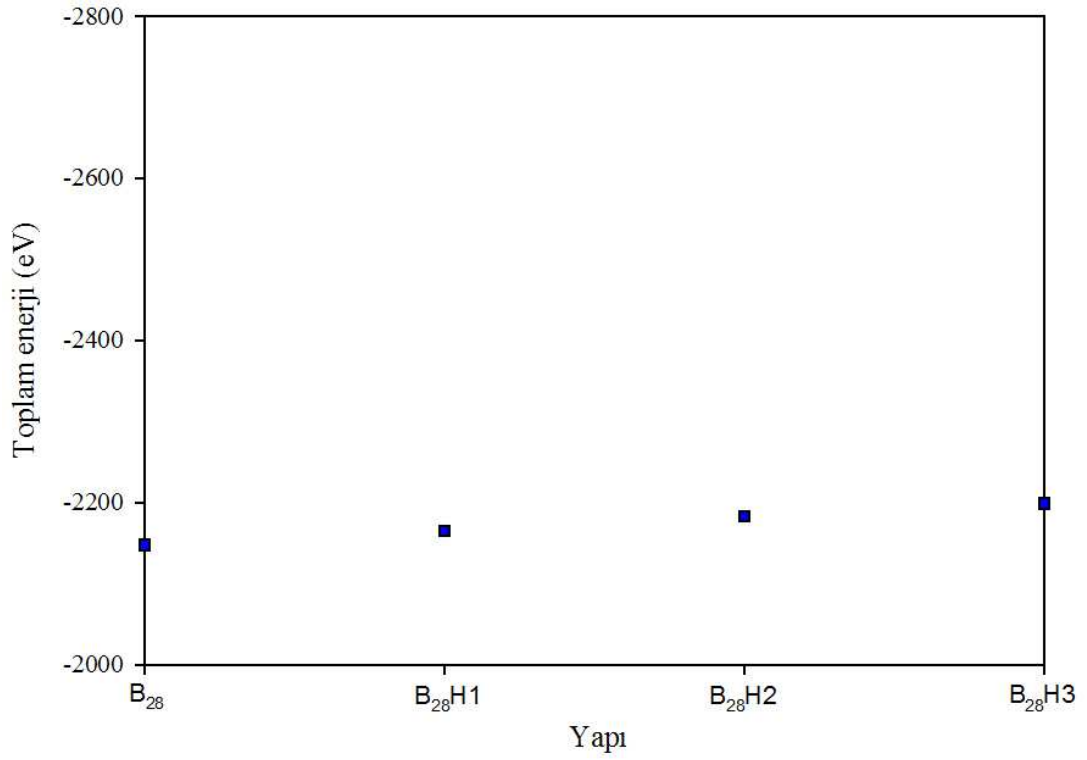
Çizelge 5.9. Zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}H_n$ ($n=1,2,3$) nanoşeritlerinin toplam enerjileri, bağlanma enerjileri ve enerji farkları

ZBNR	Toplam Enerji (eV)	Bağlanma Enerjisi (eV)	ΔE
B_{28}	-2147,829	-6,216	0,000
$B_{28}H_1$	-2165,220	-7,032	-17,391
$B_{28}H_2$	-2183,141	-7,810	-35,312
$B_{28}H_3$	-2198,544	-8,458	-50,715

Çizelge 5.9 incelendiğinde; saf yapıya hidrojen eklendiğinde, toplam enerjinin hidrojen sayısına bağlı olarak azaldığı, dolayısıyla yapıların daha kararlı hale geldiği söylenebilir. Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmalarında [42] da iki hidrojenli bor nanoşeritlerin bir hidrojenli bor nanoşeritlere göre daha kararlı olduğu görülmüştür. Dolayısıyla, sonuçlarımız literatürle uyum içerisindedir.

Toplam Enerji:

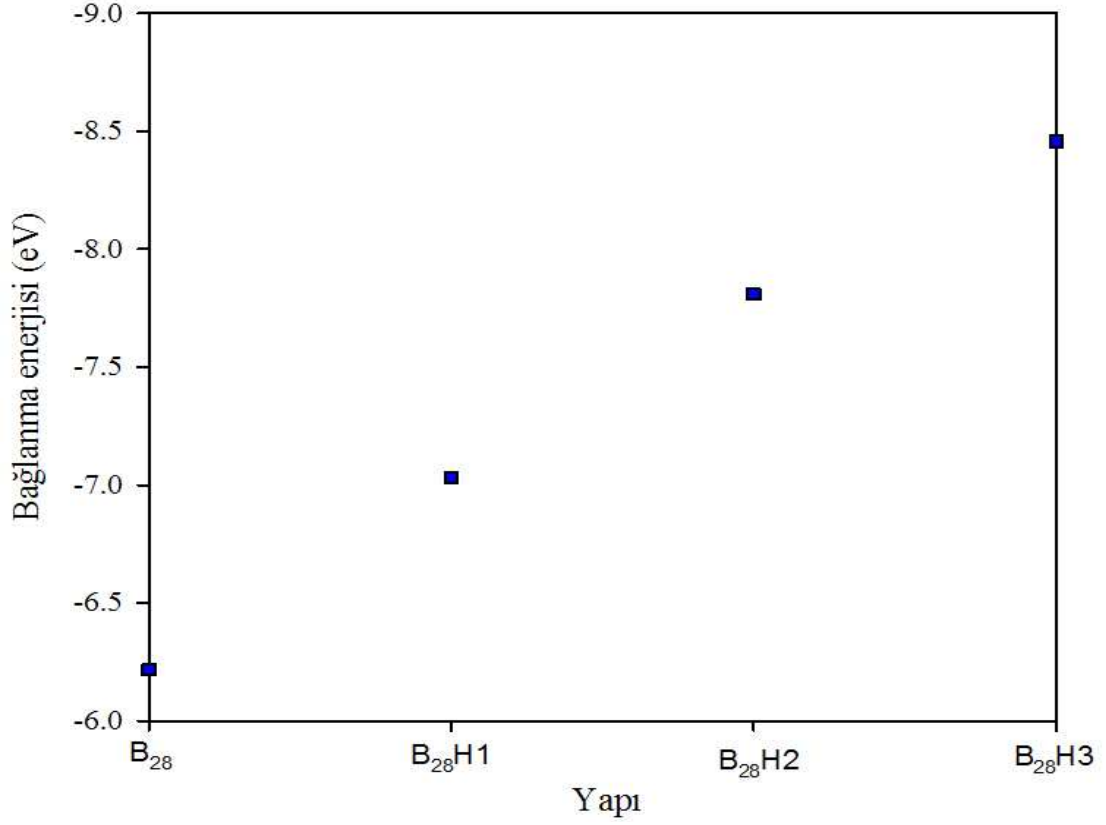
Zigzag kenarlı B_{28} ve $B_{28}H_n$ ($n=1,2,3$) nanoşeritinin toplam enerjisi Şekil 5.36'da verildi. Şekil 5.36'daki grafik incelendiğinde hidrojen sayısı arttıkça toplam enerjinin de buna bağlı olarak azaldığı görüldü. Dolayısıyla en kararsız yapının bir hidrojenli yapı, en kararlı yapının ise üç hidrojenli yapı olduğunu söyleyebiliriz.



Şekil 5.36. Zigzag kenarlı B₂₈ ve B₂₈H_n (n=1,2,3) nanoşeritinin toplam enerjisi

Bağlanma Enerjisi:

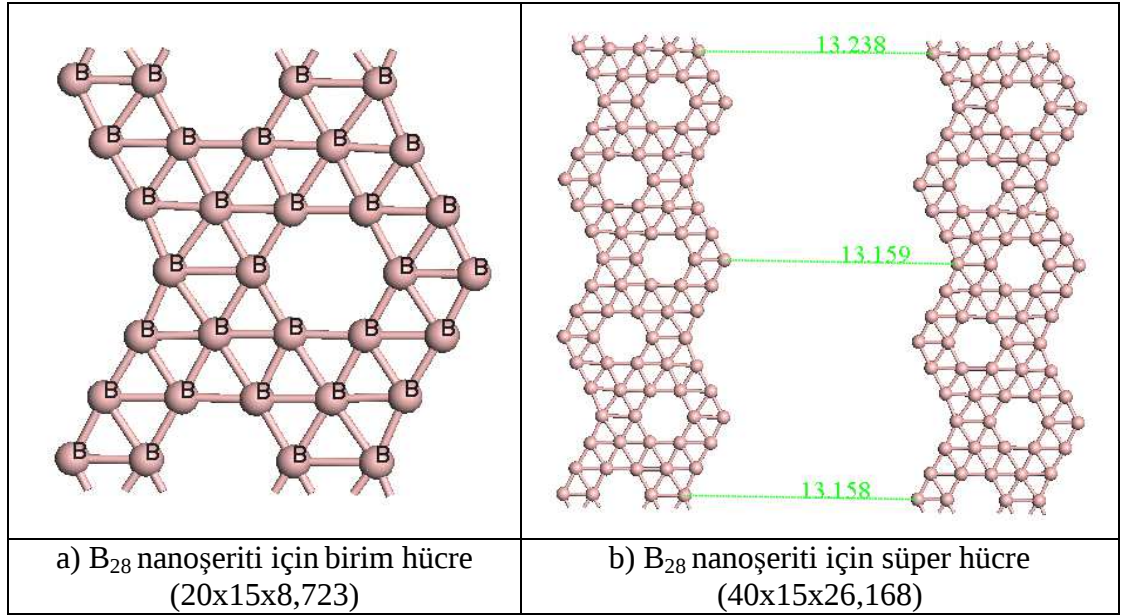
Zigzag kenarlı B₂₈ ve B₂₈H_n (n=1,2,3) nanoşeritinin bağlanma enerjisi Şekil 5.37’de verildi. Şekil 5.37’deki grafik incelendiğinde; bağlanma enerjisinin hidrojen sayısına bağlı olarak azalış gösterdiği görüldü. Bu bağlamda en kararsız yapının bir hidrojenli yapı, en kararlı yapının ise üç hidrojenli yapı olduğu sonucuna varıldı.



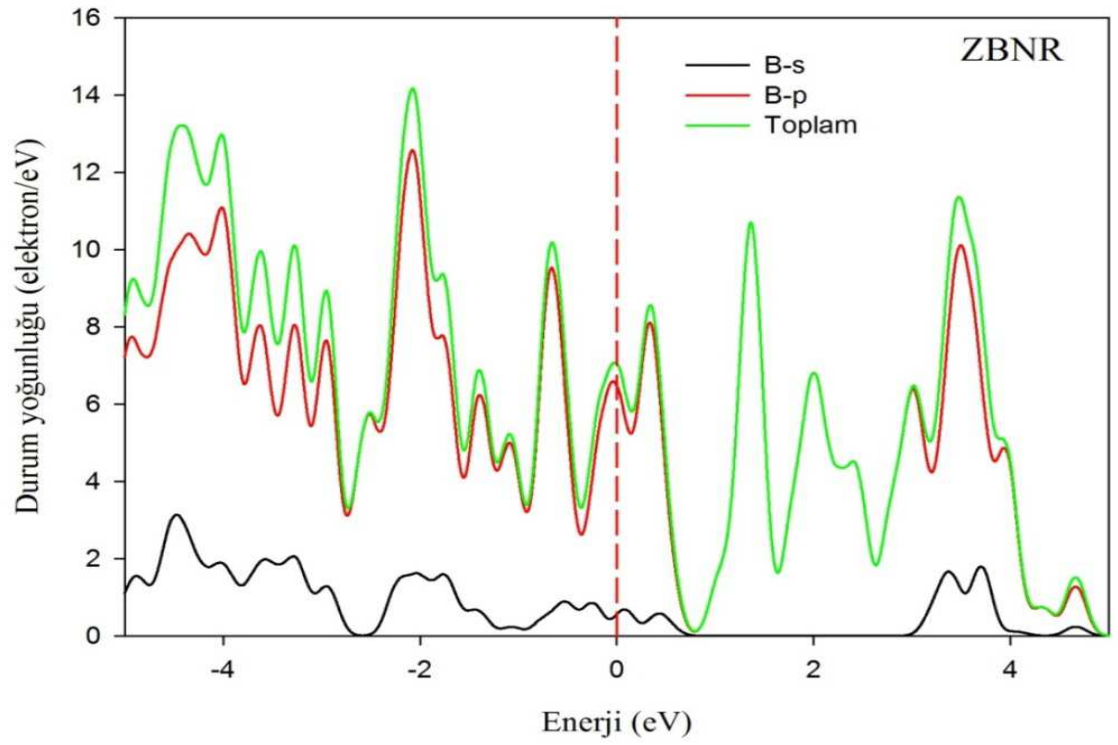
Şekil 5.37. Zigzag kenarlı B₂₈ ve B₂₈H_n (n=1,2,3) nanoşeritinin bağlanma enerjisi

5.2.1. Zigzag kenarlı B₂₈ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Zigzag kenarlı triklinik B₂₈ bor nanoşeritleri Şekil 5.38(a)'daki birim hücrenin bir eksen boyunca kendini periyodik olarak tekrar etmesiyle oluşturuldu. Geometri optimizasyonu yapılarak yapının yapısal ve elektronik özellikleri incelendi. Yapıyı daha iyi analiz etmek açısından süper hücre hali Şekil 5.38(b)'de verildi. Optimizasyon sonunda serbest bırakılan c örgü parametresinin 8,723Å olduğu görüldü.



Şekil 5.38. B₂₈ nanoşeriti için: a) birim hücre b) süper hücre



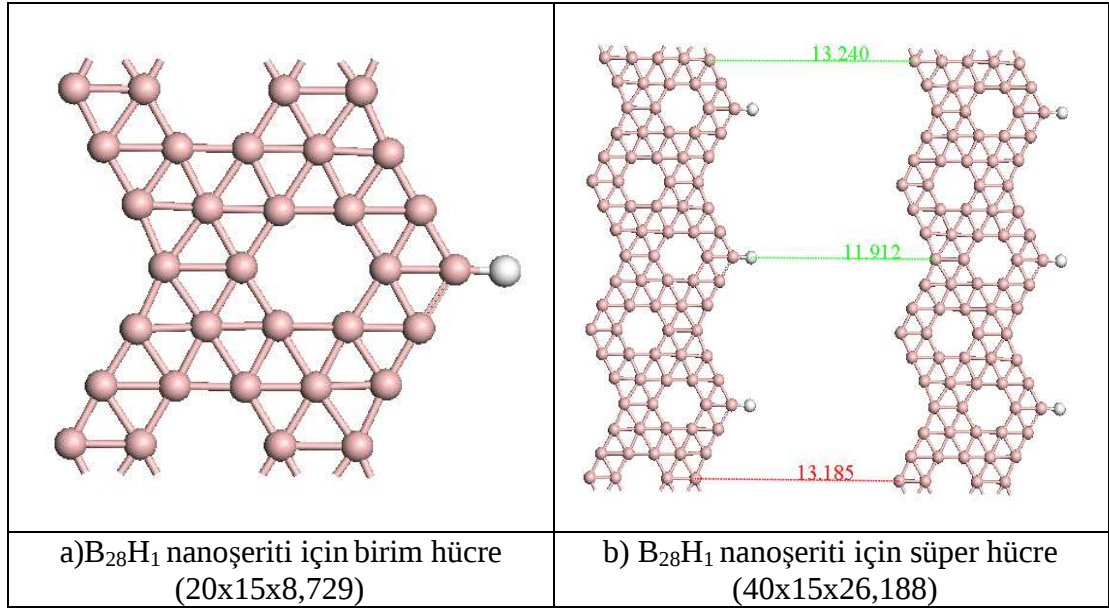
Şekil 5.39. B₂₈ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

Şekil 5.39’da B_{28} nanoşeritinin s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerde olduğu gibi burada da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.39’daki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ayrıca s orbitallerinin katkılarının çok zayıf olduğu, p orbitallerinin katkılarının baskın olduğu ve toplam durum yoğunluğuna çok yakın olduğu görüldü. Çalışmanın bundan sonraki aşamalarında bor nanoşeritlerin kenar atomlarına hidrojen eklenerek (pasifleştirerek) oluşturulan nanoşeritler incelendi.

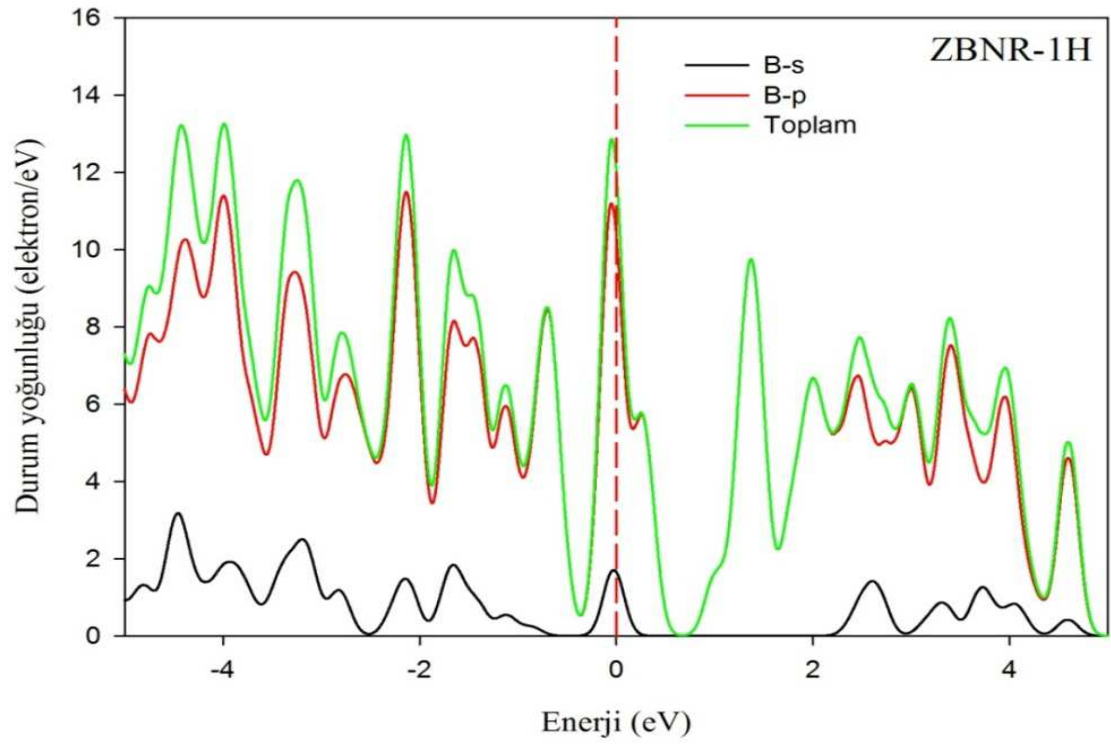
5.2.2. Zigzag kenarlı $B_{28}H_1$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] zigzag kenarlı saf bor nanoşeritin sivri ucundaki bor atomuna bir hidrojen atomu bağlanmış ve yapısal ve elektronik özellikleri tartışılmıştır. Çalışmamızda ise buna ek olarak sivri uçtaki bor atomun en yakın komşuluğuna bir hidrojen bağlanarak yapı optimize edildi. Optimizasyon sonunda sivri ucun en yakın komşuluğundaki hidrojen atomunun yerinden ayrılarak sivri uca yaklaştığı görüldü. Bu yüzden çalışmamızda sivri uca bir hidrojen atomu bağlandı ve sonuçlar tartışıldı.

Zigzag kenarlı triklinik B_{28} bor nanoşeritlerine bir hidrojen ilave edilerek $B_{28}H_1$ nanoşeriti oluşturuldu. Yapı optimize edilerek yapısal ve elektronik özellikler incelendi. Yapıyı daha iyi analiz etmek açısından süper hücre hali Şekil 5.40(b)’de verildi. Optimizasyon sonunda serbest bırakılan c örgü parametresinin saf yapıya göre artış göstererek 8,729Å olduğu görüldü. Buradan hareketle saf yapının $B_{28}H_1$ yapısına göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz.



Şekil 5.40. $B_{28}H_1$ nanoşeriti için: a) birim hücre b) süper hücre



Şekil 5.41. $B_{28}H_1$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

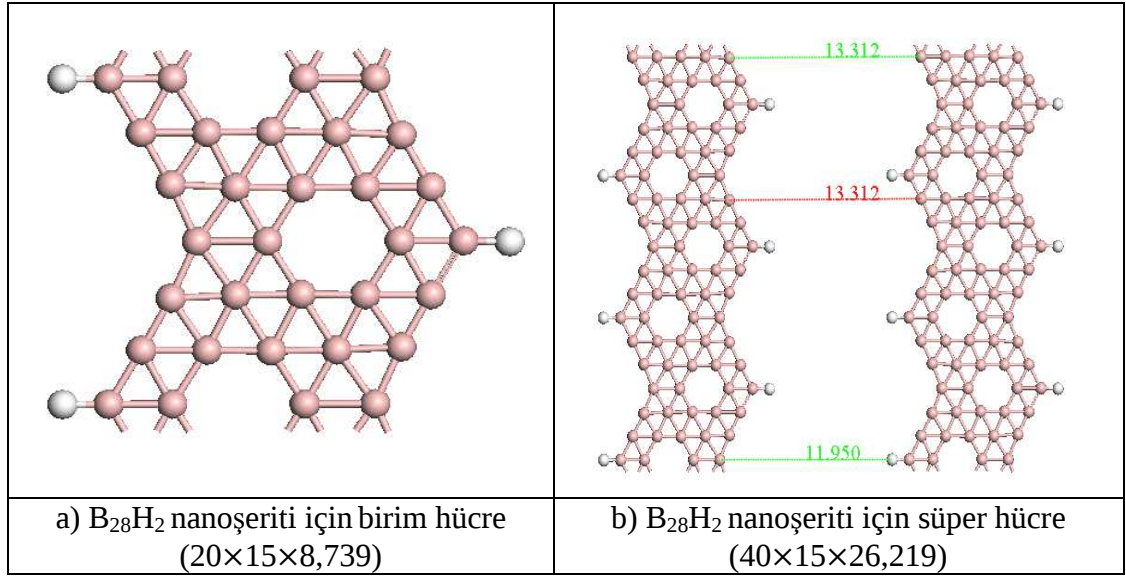
Şekil 5.41’de $B_{28}H_1$ nanoşeritinin s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Yine burada da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.41’deki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] da zigzag kenarlı saf bor nanoşeritlerin sivri ucuna hidrojen atomu bağlandığında yapının metal olduğu görülmüştür. Dolayısıyla sonuçlarımız literatürle uyum içersindedir.

Ayrıca s orbitallerinin katkılarının çok zayıf olduğu, p orbitallerinin katkılarının baskın olduğu ve toplam durum yoğunluğuna çok yakın olduğu görüldü. Bor atomlarının bağlanmada p orbitalindeki elektronu kullandığını söyleyebiliriz.

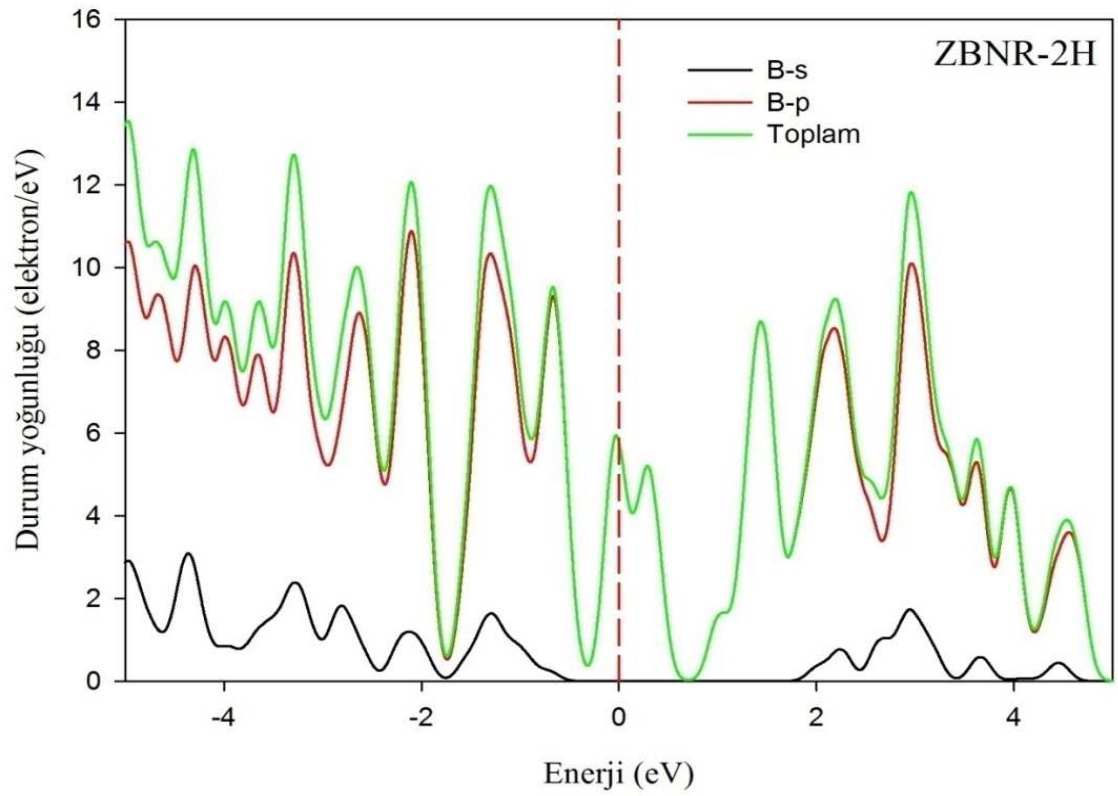
5.2.3. Zigzag kenarlı $B_{28}H_2$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] zigzag kenarlı saf bor nanoşeritlerin sivri ucuna iki hidrojen atomu bağlanmış ve sonuçlar tartışılmıştır. Çalışmamızda ise bu çalışmadan farklı olarak saf bor yapının Şekil 5.42’deki konumlarına iki hidrojen bağlandı ve sonuçlar tartışıldı.

Zigzag kenarlı triklinik B_{28} bor nanoşeritlerine iki hidrojen ilave edilerek $B_{28}H_2$ nanoşeriti oluşturuldu. Yapı optimize edilerek yapısal ve elektronik özellikler incelendi. Yapıyı daha iyi analiz etmek açısından süper hücre hali Şekil 5.42(b)’de verildi. Optimizasyon sonunda serbest bırakılan c örgü parametresinin saf yapıya ve bir hidrojenli yapıya göre artış göstererek $8,739\text{\AA}$ olduğu görüldü. Buradan hareketle; bir hidrojenli yapının iki hidrojenli yapıya göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz.



Şekil 5.42. $B_{28}H_2$ nanoşeriti için: a) birim hücre b) süper hücre



Şekil 5.43'te $B_{28}H_2$ nanoşeritinin s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.43'teki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece yapının metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] saf bor yapının sivri ucuna iki hidrojen eklendiğinde yapının yarıiletken karakterde olduğu görülmüştür. Ancak saf bor yapıya eşit sayıda fakat farklı konumlarda hidrojen eklediğinde yapının metalik karakterde olduğunu görüldü.

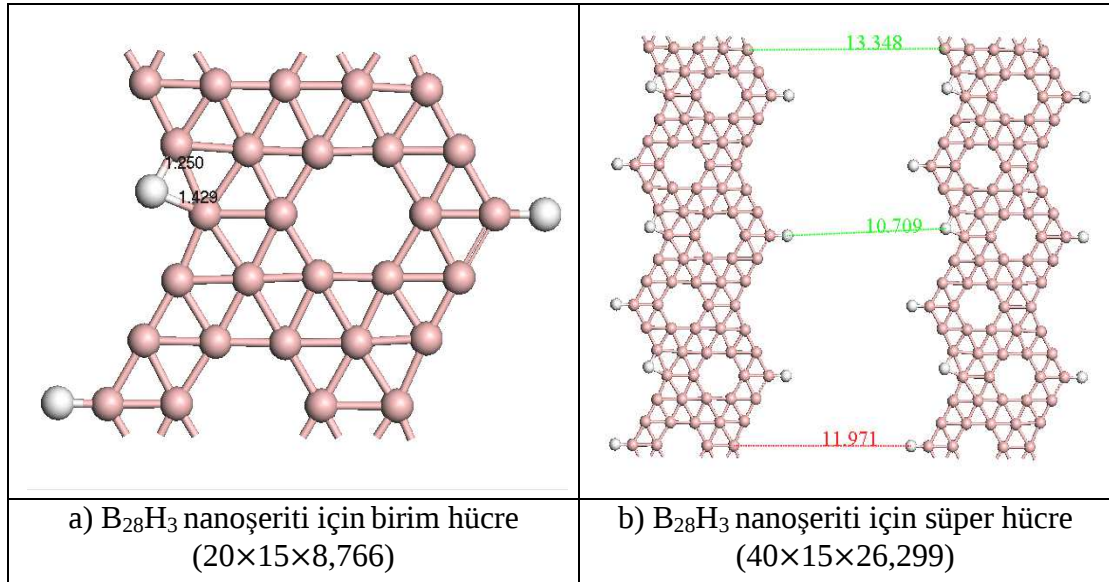
Ayrıca s orbitallerinin katkılarının çok zayıf olduğu, p orbitallerinin katkılarının baskın olduğu ve toplam durum yoğunluğuna çok yakın olduğu hatta Fermi seviyesi civarında toplam durum yoğunluğuna eşit olduğu görüldü. Bu da bor atomunun atomik bağlanmada son yörüngesindeki elektronunu kullandığını gösterir. Ayrıca bir hidrojenli yapıyla karşılaştırıldığında toplam durum yoğunluğunun azaldığı görüldü. Buradan hareketle iki hidrojenli yapının bir hidrojenli yapıya göre daha kararlı olduğunu söyleyebiliriz.

5.2.4. Zigzag kenarlı $B_{28}H_3$ nanoşeritinin yapısal ve elektronik özellikleri

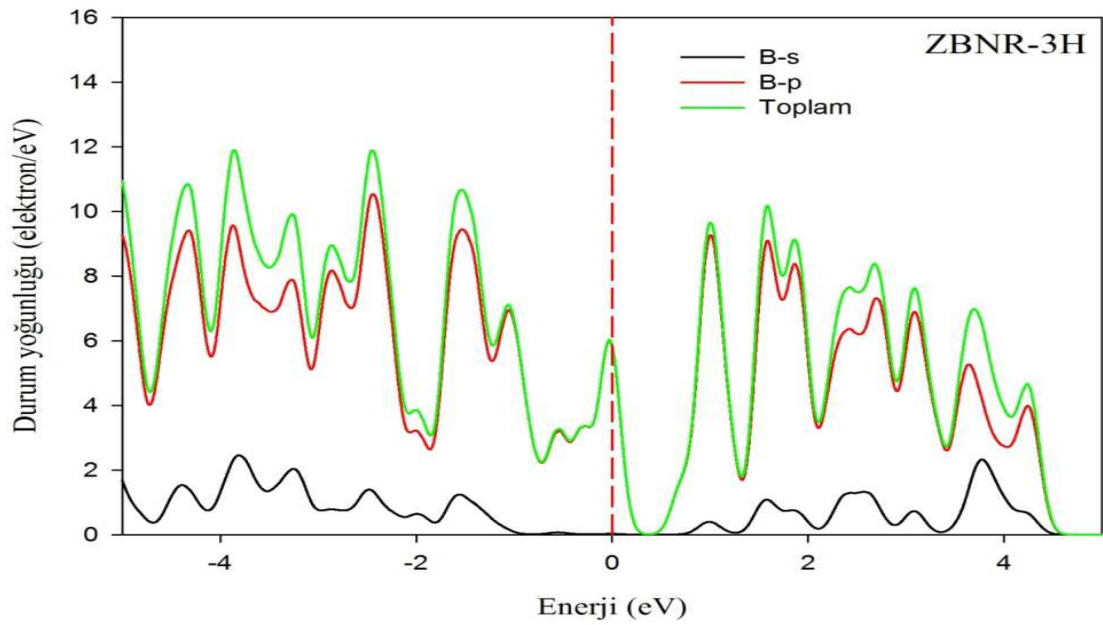
Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] saf bor yapının sivri ucundaki bor atomuna bir ve iki hidrojen eklenerek yapının yapısal ve elektronik özellikleri tartışılmıştı. Çalışmamızda bu çalışmaya ek olarak, yapının Şekil 5.44'teki konumlarına üç hidrojen eklenerek sonuçları tartışıldı.

Zigzag kenarlı triklinik B_{28} bor nanoşeritlerine üç hidrojen ilave edilerek $B_{28}H_3$ nanoşeriti oluşturuldu. Yapı optimize edilerek yapısal ve elektronik özellikler incelendi. Yapıyı daha iyi analiz etmek açısından süper hücre hali Şekil 5.44(b)'de verildi. Optimizasyon sonunda serbest bırakılan c örgü parametresinin saf yapı, bir hidrojenli yapı ve iki hidrojenli yapıya göre artış göstererek 8,766Å olduğu görüldü. Optimizasyon başlangıcında 3. hidrojen Şekil 5.44(a)'daki sol taraf çukurdaki hidrojen, çukurdaki bor atomuna en yakın komşu olacak şekilde $d_1=1,514\text{Å}$

başlatıldı. Optimizasyon sonunda diğer hidrojenlerin komşuluğu değişmezken 3. hidrojenin diğer bor atomuna yaklaştığı, $d_1=1,514\text{\AA}$ olurken $d_2=1,250\text{\AA}$ olduğu görüldü.



Şekil 5.44. $B_{28}H_3$ nanoşeriti için: a) birim hücre b) süper hücre



Şekil 5.45. $B_{28}H_3$ nanoşeritinin durum yoğunluğu (DOS)

Şekil 5.45'te $B_{28}H_3$ nanoşeritinin s, p orbitallerinin katkıları ve toplam durum yoğunluğu (DOS) verildi. $B_{28}H_2$ yapısına benzer şekilde bu yapıda da Fermi seviyesi 0 eV olarak seçildi. Şekil 5.45'teki grafik incelendiğinde; yapının seçilen Fermi düzeyinde (0 eV) bulunmadığı görüldü. Böylece bu yapının da tüm yapılarda olduğu gibi metalik karakterde olduğu sonucuna varıldı. Ding ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada [42] zigzag kenarlı saf bor nanoşeritlerin sivri ucundaki bor atomlarına bir ve iki hidrojen eklendiğinde, yapıların sırasıyla metal ve yarıiletken olduğu görülmüştü. Çalışmamızda bu çalışmadan farklı olarak, hidrojen sayısı üçe çıkarıldı ve yapılan analizler sonucunda yapının metalik karakterde olduğu görüldü. Ayrıca s orbitallerinin katkılarının çok zayıf olduğu, p orbitallerinin katkılarının baskın olduğu ve toplam durum yoğunluğuna çok yakın olduğu görüldü. Dolayısıyla bor atomlarının atomik bağlanma için son yörünge olan p orbitalindeki elektronlarını kullandığını söyleyebiliriz.

Genel olarak bakıldığında; zigzag kenarlı saf bor yapının 8,723Å olan c parametresinin, yapıya hidrojen eklendiğinde hidrojen sayısına bağlı olarak artış gösterdiği görüldü. Dolayısıyla saf bor yapının hidrojenli yapılara göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz. Hidrojenli yapılar içerisinde de en sıkı paketin bir hidrojenli yapı olduğu sonucuna varabiliriz.

6. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada doğrusal ve zigzag kenarlı olmak üzere iki farklı geometrilere sahip kristal bor birim hücreler oluşturuldu. Doğrusal kenarlı birim hücrelerin farklı konumlarındaki bor atomları karbon ve azot atomlarıyla değiştirilerek, zigzag kenarlı birim hücreye farklı sayılarda hidrojen atomları bağlanarak yeni nanoşeritler elde edildi. Birim hücreler yoğunluk fonksiyonu teorisi kapsamında optimize edildi. Optimizasyon sonucunda yapıların elektronik ve yapısal özellikleri tartışıldı.

Elde edilen hesaplamalarla farklı geometriye sahip bor nanoşeritlerin yapısal parametreleri, oluşum enerjileri, toplam enerjileri, bağlanma enerjileri tablolar halinde sunuldu. Durum yoğunluğu (DOS) ve enerji band grafikleri çizildi. Bütün yapıların metalik karakter gösterdikleri, durum yoğunluğu ve enerji band grafiklerinden söylenebilir.

Ayrıca bağ uzunluğu, bağ Mulliken popülasyonu ve atomik yük grafikleri çizilerek yapılar karşılaştırıldı. Atomlara göre atomik yük dağılımı incelendiğinde doğrusal kenarlı saf bor yapının hemen hemen nötr durumda olduğu, karbonlu yapılarda ise karbonun bulunduğu konumlardaki atomların elektron alarak negatif yüke sahip olduğu söylenebilir.

Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerde saf yapıda, seçilen hegzagon boyunca bor atomları azotla değiştirildiğinde, azotun yapıyı bozduğu görüldü. Aynı hekzagonda bor atomları karbon atomlarıyla değiştirildiğinde ise yapıda çok fazla bozulma olmadığı ancak azotlu yapıların karbonlu yapılara göre daha kararlı olduğu görüldü.

Doğrusal kenarlı bir karbonlu bor nanoşeritler içerisinde $B_{13}C_2$ ($=B_{13}C_3$) yapısının en kararlı yapı olduğu Çizelge 5.1'deki enerji farklarından söylenebilir. Azotlu yapılarda ise Çizelge 5.2'deki enerji farklarından en kararlı yapının karbonlu yapılarla benzer şekilde, $B_{13}N_2$ ($=B_{13}N_3$) yapısı olduğu söylenebilir.

Doğrusal kenarlı bor nanoşeritlerde, seçilen hegzagonun merkezindeki bor atomunun 1,699Å olan 1. bağının uzunluğu karbon atomuyla değiştirildiğinde ($B_{13}C1$) azalarak 1,637Å, azot atomuyla değiştirildiğinde ise ($B_{13}N1$) azalarak 1,518Å olduğu görüldü.

Zigzag kenarlı bor nanoşeritlerde, saf yapıya sivri uçtaki bor atomunun en yakın komşuluğuna bir hidrojen eklendiğinde hidrojenin eklendiği konumdan sivri uçtaki bor atomuna yaklaşarak sivri uçtaki hidrojenli haline dönüştüğü görüldü. Benzer şekilde daha fazla hidrojenli yapılar bu çalışmadan sonraki çalışmalarda incelenecektir.

Zigzag kenarlı bor nanoşerit yapılarının tümünün metal karakterde olduğu durum yoğunluğu grafiklerinden söylenebilir. Hidrojenli yapılar karşılaştırıldığında; $B_{28}H_1$ yapısının toplam enerjisinin (-2165,220 eV), $B_{28}H_2$ yapısının (-2183,141 eV), $B_{28}H_3$ yapısının ise (-2198,544 eV) olduğu görüldü. Saf yapıyla (B_{28}) karşılaştırıldığında (-2147,829 eV); yapıya hidrojen eklendiğinde toplam enerjinin azaldığı görüldü. Buradan hareketle; hidrojenin saf yapıya göre enerjisini daha düşük hale getirdiği ve yapıyı daha kararlı yaptığı sonucuna varıldı.

Ayrıca, farklı geometrilerdeki bor nanoşeritlerin geometrisine göre farklı yapısal ve elektronik özelliklere sahip olduğu kanıtlanmış oldu. Doğrusal kenarlı saf bor yapıya karbon ve azot eklendiğinde yapının daha kararlı olduğunu, saf yapının aynı konumlarına karbon ya da azot eklendiğinde yapıların kararlılık sıralamasının değişmediğini, karbonlu yapıların saf yapıya göre daha sıkı paketlenildiğini, azotlu yapıların da karbonlu yapılara göre daha sıkı paketlenildiğini söyleyebiliriz. Benzer şekilde, zigzag kenarlı saf bor yapıya hidrojenlerin eklendiğinde ise yapının eklenen hidrojen sayısına bağlı olarak kararlı hale gelebildiğini söyleyebiliriz.

Sonuç olarak, nanoşerit kenar atomlarına hidrojen eklenerek yapılar pasifleştirilmiş nanoşeritlerin kararlılıklarının eklenen hidrojenlerin sayısı ve eklendikleri atomlara bağlı olarak değiştiği gözlenmiştir. Nanoşeritlerin Fermi seviyesi yakınındaki elektronik band yapılarında gözlenen paralel bandlar, söz konusu şeritlerin süper iletken özellikleri olabileceği kanaatini oluşturmaktadır.

KAYNAKLAR

1. Ayhan, A., ‘‘Yeni bir teknolojik çağın kapısı aralanırken: Nanoteknoloji’’, **İpek Yolu Dergisi**, Konya Ticaret Odası, 194: 14-20 (2004).
2. Gencer, Y., ‘‘Nanoteknoloji ve karbon nanoyapılar’’, Bitirme Tezi, **Ankara Üniversitesi, Müh. Fak., Fizik Müh. Bölümü**, 1 (2006).
3. Zaim, M., ‘‘Nanoteknoloji Devrimi’’, **USİAD Dergisi**, (2007).
4. Arıkan, A., Altan, E., ‘‘Nano ölçekte talaş kaldırma, ’’**Mühendis ve Makine**, 46(550): 46-54(2005).
5. İnternet: Wikipedia, ‘‘Nanoteknoloji’’,
<http://tr.wikipedia.org> (2012).
6. İnternet: Cnntürk, ‘‘Grafen Nobel Fizik Ödülünü Getirdi’’,
[http:// www. cnnturk.com](http://www.cnnturk.com) (2010).
7. Kittel,C., çeviri: Karaoğlu, B., ‘‘Introduction to Solid State Physics’’, 6nd ed., **John Wiley & Sons**, 1-18 (1996).
8. İnternet: MEB , ‘‘Elementlerin Kristal Yapıları,
<http://okulweb.meb.gov.tr> (2012).
9. İnternet: Kimyasanal, ‘‘Kristal Yapılar’’,
<http://www.kimyasanal.net> (2005).
10. İnternet: Chemistry, ‘‘ Birim Hücre’’,
[http://chemistry.umeche.maine.edu/ crystal.html](http://chemistry.umeche.maine.edu/crystal.html) (2012).
11. İnternet: Realmagick, ‘‘Crystalline-Solid-Bravais-Lattice’’,
[http://www. real magick.com](http://www.real_magick.com) (2000-2012).
12. Buckingham, A. D., ‘‘Permanent and induced molecular moments and longrange intermolecular forces ‘’, **Adv. Chem. Phys.**, 12: 107-115 (1967).
13. Hinchliffe, A., Munn, R. W., ‘‘Molecular Electromagnetism’’, **Willey**, Chichester, 112-115 (1985).
14. Höltje, H. D., Sippl W., Rognan D., Folkers G., ‘‘Molecular Modelling’’, 2nd ed., **Wiley- VCH**, Rome, 18-78 (2003).
15. İnternet: Migmedya, ‘‘Bor’’,
<http://www.migmedya.com> (2012).

16. İnternet: Etibor A.Ş., ‘‘Bor’’,
<http://www.etiholding.gov.tr> (2009).
17. Aydın, S., Şimşek, M., ‘‘First-Principles study of hypohetical boron crystals: B_n ($n=13,14,15$)’’, ***Solid State Sciences***, 1-7 (2012).
18. İnternet: Ulusal Bor Araştırma Enstitüsü (BOREN) ‘‘Bor ve Özellikleri’’,
www.boren.gov.tr/borhk.htm (2007).
19. İnternet: Balıkesir Üni.,’’Bor’’,
<http://bor.balikesir.edu.tr/bor.html> (2010).
20. Aydın, S., Şimşek, M., ‘‘First-Principles calculations of elemental crystalline boron phases under high pressure: Orthorhombic B_{28} and tetragonal B_{48} ’’,
Journal of Alloys and Compounds, 509: 5219-5229 (2011).
21. İnternet: Belgeler, ‘‘Bor Mineralleri ve Önemi’’,
<http://www.belgeler.com/blg/9gv> (2010).
22. İnternet: Eti Maden İşletmeleri Genel Müdürlüğü, ‘‘Bor ve Bor Rezervleri, Kullanım Alanları’’,
<http://www.etimaden.gov.tr>(2012).
23. Zhao,Y., Ban C., Xu, Q., Wei, S. H., Dillon, C., ‘‘Charge-driven structural transformation and valance versatility of boron sheets in magnesium borides’’, ***Phys. Rev. B***, 83: 035406 (2011).
24. Stewart, J., ‘‘Quantum chemistry program exchange catalog’’, ***India University***, Blumington, 14: 455-488 (1983).
25. Jensen, F., ‘‘Introduction to Computational Chemistry’’, ***John Wiley & Sons Ltd.***, Amsterdam, 181-196 (1999).
26. Gill, P. M. W., ‘‘DFT, HF and self consistent field’’, Enc. of Comp. Chemistry, ***John Wiley & Sons Ltd.***, New York, 65-87 (1996).
27. Hohenberg, P., Kohn, W., ‘‘Inhomogeneous Electron Gas’’, ***Phys. Rev. Lett.***, 136: B8644-B871 (1964).
28. Jones, R. O., Gunnarsson, O., ‘‘The density functional formalism, its applications and prospects’’, ***Rev. Mod. Phys.***, 61(3): 689-746 (1989).
29. İnternet: Gazi Üni. Bil. Müh. Böl., ‘‘Optimizasyon Teknikleri’’,
<http://w3.gazi.edu.tr/~akcayol/files/ZOL1Giris.pdf>.

30. Bahat, M., "Kinazolin molekülünün kuvvet alanının DFT B3LYP/6-31G* tabanlı SQM metodu ile hesabı ve bazı Hoffman-tipi komplekslerin titreşimsel spektroskopisi ile incelenmesi" Doktora Tez; **Gazi Üniv. Fen Bil. Enst.**, Ankara, 45 (2000).
31. Csizmadia, G. L., "Computational Adv. In Organic Chem.: Molecular Str. And Reactivity", Ed. By Öğretir C., Csizmadia G. L., NATO ASI series, **Kluwer Academic Publishers.**, Canada, 562-565 (1992).
32. Pongor G., Fogorasi, G., Magdo, I., Boggs, J. E., Keresztury, G., Ignatyev, I. S., "Theoretical prediction of vibrational spectra. The a priori scaled quantum mechanical (SQM) force field and vibrational spectra of the pyrimidine", **Spectrochim. Acta**, 48 A, 1: 11-19 (1992).
33. "Castep 3.1 program kitapçığı", **Accelrys Inc.**, 6-7 (2001).
34. Ceperley, D. M. And Alder, B. J., "Ground State of Electron Gas by a Stochastic Method", **Phys. Rev. Lett.**, 45: 566 (1980).
35. Perdew, J. P., "Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas", **Phys. Rev. B**, 33: 8822 (1986).
36. Becke, A. D., "Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior", **Phys. Rev. A**, 38: 3098 (1988).
37. Perdew, J. P., Chevary, A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pedersen, M. R., Singh, D. J. And Fiolhais, C., "Atoms, molecules, solids, and surfaces: applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation", **Phys. Rev. B**, 46: 6671 (1992).
38. Perdew, J. P. And Wang, Y., "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy", **Phys. Rev. B**, 45: 13244 (1992).
39. Perdew, J. P., Burke, K. and Ernzerhof, M., "Generalized gradient approximation made simple", **Phys. Rev. Lett.**, 77: 3865 (1996).
40. İnternet: "CASTEP 5.5.",
<http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/documentation/WebHelp/CASTEP.html>. (2012).
41. Saxena, S., Tyson, T. A., "Insights on the atomic and electronic structure of boron nanoribbons", **Physical Review Letters**, 104: 2455 02 (2010).
42. Ding, Y., Yang, X., Ni, J., "Electronic structures of boron nanoribbons", **Applied Physics Letters**, 93: 043107 (2008).

43. Simsek, M., Aydın, S., ‘‘First Principles Calculations of Two Dimensional Boron Sheets’’, **17th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials**, İstanbul, 169-P:86 (2011).
44. Kittel, C., çeviri: Karaoğlu, B., ‘‘Introduction to Solid State Physics’’, 6nd ed., **John Wiley & Sons** (1996).
45. Aydın, G., ‘‘ MBE ile büyütülen Si delta-katkılı Ga-As’nin elektriksel ve yapısal özelliklerinin incelenmesi’’Yüksek Lisans Tezi, **Gazi Üniversitesi**, (2007).
46. Kolmogorov, A. N. And Curtarolo S., "Prediction of New Crystal Structure Phases in Metal Borides: A Lithium Monoboride Analog to MgB₂," **Phys. Rev. B**, 73: 180501(R) (2006).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : EROĞLU, Esra
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 26.01.1986, Ankara
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (506) 447 97 98
e-mail : esraeroglu_86@hotmail.com.

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2010
Lise	Alparslan Lisesi (YDA)	2004

Yabancı Dil

İngilizce