

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FARKLI SİMETRİK YAPILARDAKİ KARBON
NANOTÜPLERİN DURUM YOĞUNLUKLARININ
SİMÜLASYONU**

NECATİ VARDAR

**FBE Fizik Anabilim Dalı Fizik Programında
Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Gülay DERELİ

İSTANBUL, 2006

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	ii
KISALTMA LİSTESİ	iii
ŞEKİL LİSTESİ	iv
ÇİZELGE LİSTESİ	vi
ÖNSÖZ.....	vii
1. GİRİŞ.....	10
2. TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER.....	14
2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Yapısı	14
2.2 Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması	14
2.3 Chiral Vektörü ($\vec{C}_h$)	15
2.4 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$)	18
2.5 Simetri Vektörü ($\vec{R}$).....	20
2.6 Birim Hücre ve Brillouin Bölgesi.....	24
3. KARBON MALZEMELERDE SIKI – BAĞ YÖNTEMİ HESAPLAMALARI .	27
4. KARBON NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPISI	32
4.1 Durum Yoğunluğu ve Enerji Bant Aralığı	34
5. SONUÇLAR.....	38
6. YORUM	71
KAYNAKLAR.....	75
EK I	77
Δt BELİRLENMESİ.....	77
ÖZGEÇMİŞ.....	78

SİMGE LİSTESİ

α	Alt sistem indisi
n	sistemdeki atom sayısı
P^i	i. Elektronun izdüşümü
ε_n	n. durum enerji öz değeri
NN	Etkileşim mesafesi içindeki buffer bölgesindeki atomların sayısı
$O^i \equiv f((\varepsilon_i - \mu) / k_b T)$	i. Elektronun yerleşimi (işgal katsayısı)
$\vec{F}_\alpha$	Atomlar arası kuvvetler
E_{bs}	Bant yapısı enerjisi
$\phi(\vec{k}, \vec{r})$	Block Fonksiyonu
$\vec{C}_h$	Chiral Vektörü
H_{top}	Elektron ve iyonlardan oluşan sistemin toplam hamiltonyeni
U_{rep}	İtici potansiyel
$\vec{T}$	Öteleme Vektörü
$ \Psi_n\rangle$	sistemin n. durum öz fonksiyonu
$\vec{R}$	Uzay Simetri Vektörü
h	tek parçacık homiltonyeni
N_{cell}	Alt sistem sayısı

KISALTMA LİSTESİ

GSP	Goodwin-Skiner-Pettifor
KNT	Karbon Nanotüp
LCAO	Lineer Combination of Atomic Orbitals
MD	Moleküler Dinamik
$O(N)$	Order N
$O(N^3)$	Order N^3
PBC	Periodic Boundry Conditions
PVM	Parallel Virtuel Machine
SBMD	Sıkı Bağ Moleküler Dinamik
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1 a) Armchair KNT, b) Zig-Zag KNT, c) Chiral KNT	15
Şekil 2.2 $\vec{C}_h$ (OA) vektörü , $\hat{a}_1$ ve $\hat{a}_2$ birim baz vektörleri, T; (OB) öteleme vektörü [3]	16
Şekil.2.3 Uzay gurup simetri operasyonu $R=(\Psi, \tau)$ Ψ , nanotüp eksenini etrafındaki dönmenin açısı. τ , T vektörü doğrultusundaki geçiş (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	20
Şekil.2.4 $\vec{C}_h = (4,2)$ Chiral KNT için Simetri Vektörü (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	22
Şekil 2.5 KNT lerin Brillouin bölgesi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998) .	25
Şekil 4.1 Metalik enerji bandı şartı: $Y\vec{K}$ vektörünün boyunun, $\vec{K}_1$ boyuna oranı tam sayı ise, metalik enerji bandı elde edilmiş olur (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	32
Şekil 4.2 Fermi enerjisi civarında elektronik durumların k dalga vektörüne göre değişimi ...	34
Şekil 4.3 $\vec{C}_h = (9,6)$ Achiral karbon nanotüp için enerji bandının değişimi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	35
Şekil 4.4 $\vec{C}_h = (7,4)$ Achiral karbon nanotüp için enerji bandının değişimi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	36
Şekil 4.5 (10,0) ve (9,0) KNT lerin durum yoğunluğu (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998).....	37
Şekil 4.6 Zig-Zag KNT lerin ‘Buffer Skin Size’ parametresine bağlı olarak $O(N3)$ - $O(N)$ Toplam Enerji Fark grafikleri	39
Şekil 4.7 Armchair KNT lerin ‘Buffer Skin Size’ Parametresine bağlı olarak $O(N3)$ - $O(N)$ Toplam Enerji Fark grafikleri	40
Şekil 4.8 Armchair KNT ’lerin Sıcaklığa Bağlı Fermi Enerji Değişimi	47
Şekil 4.9 Zig-Zag KNT ’lerin Sıcaklığa Bağlı Fermi Enerji Değişimi	47
Şekil 4.10 Zig-Zag KNT lerin 0,1 K de yarıçapına bağlı olarak Egap değişimi	51
Şekil 4.11 Zig-Zag KNT lerin 300 K de yarıçapına bağlı olarak Egap değişimi	51
Şekil 4.12 Yarıiletken Zig-Zag KNT lerin enerji bant aralıklarına sıcaklık etkisi.....	53
Şekil 4.13 Metalik Zig-Zag KNT lerin enerji bant aralıklarına sıcaklık etkisi.....	53
Şekil 4.14 5x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	55
Şekil 4.15 7x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.9 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	56
Şekil 4.16 10x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.3 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	57
Şekil 4.17 11x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	58

Şekil 4.18 9x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	59
Şekil 4.19 12x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	60
Şekil 4.20 2x2 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.3 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	61
Şekil 4.21 4x4 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.9 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	62
Şekil 4.22 6x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	64
Şekil 4.23 9x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	65
Şekil 4.24 12x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	66
Şekil 4.25 15x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	67
Şekil 4.26 4x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	68
Şekil 4.27 5x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	69
Şekil 4.28 11x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri.....	70

ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge 2.1: KNT lerin Sınıflandırılması (R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, 1998)	17
Çizelge 2.2 n ve m katsayılarına bağlı olarak değişik KNT ler için bütün yapı parametrelerinin değerleri (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)	23
Çizelge 2.3 KNT ler için Parametreler (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998) .	26
Çizelge 4.1 Armchair KNT ler için Buffer Skin Size (A^0) Değerleri	41
Çizelge 4.2 Zig-Zag KNT ler için Buffer Skin Size(A^0) Değerleri.....	42
Çizelge 4.3 Armchair KNT lerin 0.1 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri	43
Çizelge 4.4 Zig-Zag KNT lerin 0.1 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri.....	44
Çizelge 4.5 Armchair KNT lerin 300 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri	45
Çizelge 4.6 Zig-Zag KNT lerin 300 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri.....	46
Çizelge 4.7 Zig-Zag KNT ler için 0.1 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri	49
Çizelge 4.8 Zig-Zag KNT ler için 300 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri	50
Çizelge 4.9 KNT lerin bant aralıkları (E_g (eV)) ve literatür sonuçları karşılaştırması	74

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesinde yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır. Öncelikle bu tezi hazırlamamda bana rehber ve yardımcı olan Karbon Nanotüp Simülasyon laboratuvarının kurucusu tez danışman hocam Prof. Dr. Gülay DERELİ'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Bana çalışma imkânı ve çalışma ortamı sağlayan Yıldız Teknik Üniversitesi Rektörü Prof. Dr. Durul ÖREN, Fen Edebiyat Fakültesi Dekanı Prof. Dr. Metin SUBAŞI, Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Kubilay KUTLU ve eski Fizik Bölüm Başkanı Prof. Dr. Emel ÇINGİ hocamıza ayrıca teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca yardımlarını benden esirgemeyen başta Arş. Gör. Banu SÜNGÜ olmak üzere Arş. Gör. Önder EYECİOĞLU hocama teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Benden her türlü maddi ve manevi desteklerini ve sevgilerini hiç esirgemeyen babam Atilla VARDAR ve annem Sebahat VARDAR'a teşekkürler.

ÖZET

Tek duvarlı karbon nanotüplerin (TDKNT) yapısı chiral vektörüyle tanımlanır. TDKNT lerin elektronik yapısı tüpün çapına ve chiralitesine bağlıdır. KNT ler yapısal parametrelerine bağlı olarak hem metalik hem de yarıiletken olabilirler.

TDKNT lerin yapısal, dinamik ve elektronik özelliklerini incelemede sıkı-bağ moleküler dinamik yöntemi başarılıdır. Klasik sıkı-bağ yöntemi schrödinger denklemini direkt matris köşegenleştirmesi ile çözer ve atom sayısının küpü ile orantılı simülasyon zamanı kullanır. O(N) metodu bant enerjisini gerçek uzayda çözer ve bağlanmaya yalnız yerel çevrenin katkısı olduğu yaklaşımını yapar. O(N) yöntemi atom sayısı ile lineer orantılı simülasyon zamanı kullanır. Bu da simülasyonlarda hesaplama zamanını kısaltır.

Bu çalışmada (2,2) den (30,0) a kadar değişen farklı yapılarıdaki TDKNT lerin elektronik yapılarını incelemek için O(N) sıkı-bağ moleküler dinamik metodu paralel bilgisayar ortamında kullanılmıştır. Bu tez çalışması Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü “Karbon Nanotüp Bilgisayar Simülasyon” laboratuvarında yapılmıştır. Her bir karbon nanotüp için elektronik durum yoğunlukları, fermi enerji seviyeleri ve bant yapısı enerjileri hesaplanmıştır. Elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafikleri kullanılarak TDKNT lerin metalik veya yarıiletken olmasını belirleyen genel kurallar belirlenmiştir. Chiral parametrelerine bağlı olarak TDKNT nin $n=m$ olması durumunda (armchair) metalik, $n-m=3i$ olması durumunda (zig-zag) küçük bant aralıklı yarıiletken ve diğer durumlarda gerçek yarıiletken olduğu gösterilmiştir. Bir yarıiletken KNT nin bant aralığı enerjisinin tüpün yarıçapı ile ters orantılıdır. Yarıiletken TDKNT lerin bant aralığı enerjileri hesaplanmıştır ve literatürde mevcut teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Sıcaklığın elektronik yapı üzerindeki etkisi yukarıdaki elektronik durum yoğunlukları, bant enerji seviyeleri ve fermi seviyeleri çalışmaları iki farklı sıcaklıkta (0.1 K - 300 K de) elde edilerek gösterilmiştir.

Anahtar kelimeler: Karbon nanotüp, karbon nanotüpün elektronik özellikleri, moleküler dinamik, sıkı-bağ yöntemi, O(N) tekniği, paralel ortam, durum yoğunluğu, bant aralığı enerjisi, fermi seviyesi

ABSTRACT

The structure of a Single Wall Carbon Nanotube (SWCNT) is specified by a chiral vector ($Ch=(n,m)$). The electronic properties of SWCNTs strongly depend upon the tube diameter and chirality (given by the chiral indices m and n). SWCNT's are either metallic or semiconducting depending on their structural parameters.

Tight-Binding Molecular Dynamics is successful in studying the structural, dynamical, and electronic properties of SWCNTs. The traditional TB solves the Schrödinger equation by direct matrix diagonalization and uses the simulation time in cubic scaling with the respect to the number of atoms ($O(N^3)$). The Order N ($O(N)$) methods solve for the band energy in real space and make the approximation that only the local environment contributes to the bonding, and hence the band energy of each atom. In this case, the run time would be linearly scaled with respect to the number of atoms.

In this study we use $O(N)$ TBMD method in parallel computation to investigate electronic properties of SWCNT's with varying chiralities from (2,2) to (30,0). This thesis has been made at Yıldız Technical University Carbon Nanotube Simulation Laboratory. We calculated the electronic density of state (eDOS), fermi energy level and band structure energy of each tube. Using eDOS graphs, we defined the general rules for determining whether SWCNT is metallic or semiconducting. We showed that based on the chiral indices (n,m): the tube is metallic when $n=m$; tube is a small-gap semiconductor when $n-m=3i$, where i is a nonzero integer. All other combinations of (n,m) give true semiconductors. The band gap of a semiconducting SWCNT is approximately inversely proportional to the tube diameter. We estimated the band gaps of semiconducting SWCNTs and compared them with the available theoretical results. Temperature effect on electronic properties is shown using energy band gaps, electronic density of states and fermi levels at two different temperature.

Keywords: Carbon Nanotubes, Electronic properties of CNT, Density of states, Band gap energy, Molecular Dynamics, Tight-Binding method, Parallel Environments, Order N , Fermi Level

1. GİRİŞ

Günümüzde nano, teknik bir ölçü birimi olarak kullanılır ve herhangi bir birimin milyarda biri anlamı taşır. Genellikle metre ile birlikte kullanılır. Nanometre, bir metrenin milyarda biri ölçüsünde bir uzunluğu temsil eder (yaklaşık olarak ard arda dizilmiş 5 ila 10 atom).

Nano-teknoloji, çok genel tanımıyla istisnai şekilde küçük (yaklaşık atom boyutlarında) yapıların ticari bir amaca hizmet edebilecek şekilde düzenlenmesidir. Maddeler üzerinde 100 nanometre ölçeğinden küçük boyutlarda gerçekleştirilen işleme, ölçüm, modelleme ve düzenleme gibi çalışmalar nano-teknoloji çalışmaları olarak nitelendirilir.

Nano-teknoloji hızlı bir şekilde 21.yüzyılın endüstriyel devrimi olarak biçimlendirilmektedir. Nano-teknoloji yediğimiz gıda ürünlerinden, giydiğimiz kıyafetlere, kullandığımız ilaçlardan, bilgisayarlarımızın gücüne, sürdürdüğümüz otomobillerden, yaşadığımız evlere kadar hayatımızın her noktasını etkileyecektir.

Nano-teknolojinin önemi, atomlar ve moleküller seviyesinde (1 ila 100 nanometre (nm) skalasında) çalışarak gelişmiş ve/veya tamamen yeni fiziksel, kimyasal, biyolojik özelliklere sahip yapılar elde edilmesine imkan sağlamasından kaynaklanmaktadır. Teknik açıdan açıklamak gerekirse malzeme özellikleri ve cihazların çalışma prensipleri, genel olarak 100 nm'den büyük boyutları temel alarak yapılan varsayımların sonucunda ortaya çıkarılmış geleneksel modelleme ve teorilere dayanmaktadır. Kritik uzunluklar 100 nm'nin altına indiğinde ise geleneksel teori ve modeller ortaya çıkan özellikleri açıklamakta çoğu zaman yetersiz kalmaktadır. Nano-teknoloji işte burada resme girmektedir. Daha sağlam, daha kaliteli, daha uzun ömürlü ve daha ucuz cihazlar geliştirme isteği birçok iş kolunda gözlenen eğilimlerdir. Minyatürizasyon olarak tanımlanabilecek bu eğilim birçok mühendislik çalışmasının temelini oluşturmaktadır. Minyatürizasyonun sadece kullanılan parçaların daha az yer kaplamasından çok daha önemli getirileri vardır. Minyatürizasyon üretimde daha az malzeme, daha az enerji, daha ucuz ve kolay nakliye, daha çok fonksiyon ve kullanımda kolaylık olarak uygulamada kendini göstermektedir.

Gelecekteki Uygulama Alanları:

- Malzeme ve İmalat Sektörü
- Nano Elektronik ve Bilgisayar Teknolojileri
- Tıp ve Sağlık Sektörü
- Havacılık ve Uzay Araştırmaları
- Çevre ve Enerji
- Bioteknoloji ve Tarım
- Savunma Sektörü

Nanometre boyutlarındaki ilk karbon lifleri, Fransada'daki Orleans Üniversitesi'nde PhD çalışmaları sırasında, 1970 li yıllarda Morinobu Endo tarafından bulunmuştur. Endo, buharla büyütme tekniğini kullanarak yaklaşık 7 nm çapındaki karbon liflerini büyütmeyi başardı, ancak bu liflerin nanotüp olabileceğinin farkına varılmadı ve uzun bir süre üzerinde çalışılmadı.

Karbon nanotüpler ilk defa 1991 yılında, Tsukuba'daki NEC laboratuvarlarında Sumio Iijima grubu tarafından fulleren elde edilmeye çalışılırken iç içe çok duvarlı karbon nanotüpler (ÇDKNT) olarak yüksek çözünürlüklü elektron tarama mikroskopuyla gözlemlenmiştir.

Karbon nanotüpler, geometrilerine bağlı olarak metal ve yarıiletken bir davranış gösterirler. Elektriksel iletkenlikleri bakırdan daha iyidir. Grafit ve karbon fiberlerine benzer olarak KNT ler sağlam ve yüksek elastikiyet modülüne sahiptirler. TDKNT ler tıpkı uzay teknolojisi uygulamalarında kullanılan karbon fiberler gibi çok sağlam ve esneme altında kırılmama dayanıklılığına sahiptir. Karbon nanotüpler termal özellikleri bakımından bakırdan daha iyi ısıyı iletirler. Katkılamaya gerek olmadan sadece KNT nin geometrik parametrelerinin değiştirilmesi yoluyla elektronik özelliklerinin değiştirilebilir olması, KNT lere elektronik uygulamalarda önemli bir yer verir.

Karbon nanotüpler elektronik malzeme olarak:

- Magnetik ve Optik nano aygıt yapımında
- Hafıza elemanı
- Kapasitör
- Transistör
- Diyot
- Mantık Devresi
- Elektronik anahtar

yapımında kullanım alanları bulunuyor [1].

Bu tez çalışmasında Dong-Hwa Oh vd., (2000) çalıştıkları (10,10), (5,5), (4,4), (3,3), (10,0), (9,0), (8,0), (6,0) KNT ler, N. Hamada vd., (1992) çalıştıkları (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0), (11,0), (12,0), (13,0), (14,0), (15,0) KNT ler, O. Gülseren vd., (2002) çalıştıkları (4,0), (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0), (11,0), (12,0), (13,0), (14,0), (15,0) KNT ler, R. Saito vd., (1992) çalıştıkları (9,0), (10,0) KNT ler, Y. I. Prylutsky vd., (2000) çalıştıkları (10,0), (5,5), (17,0) KNT ler, H. Yorikawa vd., (1995) çalıştıkları (7,0), (8,0), (10,0), (11,0) KNT ler ile X. Blase vd., (1994) çalıştıkları (6,0), (7,0), (8,0), (9,0) KNT ler için çalışılan elektronik durum yoğunluğu (eDOS) ve enerji bant aralığı değerleri sonuçlarımla karşılaştırmak için referans olarak verilmiştir.

Bu tez çalışmasında G.Dereli, C.Özdoğan (2003)(a), G.Dereli, C.Özdoğan (2003)(b), C.Özdoğan, G.Dereli, T.Çağın (2002) tarafından geliştirilen O(N) sıkı-bağ moleküler dinamik simülasyon programı kullanılmıştır.

Bu tez 24-01-01-04 nolu YTÜ–BAPK projesi ile kurulan YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ KARBON NANOTÜP SİMÜLASYON LABORATUVAR ında yapılmıştır [2].

Tez çalışmamda farklı simetrik yapılardaki (2,2), (3,3), (4,4), (5,5), (6,6), (7,7), (8,8), (9,9), (10,10), (11,11), (12,12), (13,13), (14,14), (15,15), (16,16), (17,17), (18,18), (19,19), (20,20) metalik KNT ler ve (3,0), (4,0), (5,0), (6,0), (7,0), (8,0), (9,0), (10,0), (11,0), (12,0), (13,0), (14,0), (15,0), (16,0), (17,0), (18,0), (19,0), (20,0), (21,0), (22,0), (23,0), (24,0), (25,0), (26,0),

(27,0), (28,0), (29,0), (30,0) yarıiletken ve metalik yarıiletken KNT ler iki farklı sıcaklık değeri için (0,1 K ve 300 K) fermi enerji seviyeleri, elektronik durum yoğunlukları (eDOS) ve bant enerji aralıkları çalışmaları incelenmiştir. Çalışmalarında sıcaklığın fermi seviyesi ve bant enerji aralığına etkisine bakılmış ve literatürde bulunan sonuçlarla karşılaştırması yapılarak literatür ile uygunluğu gösterilmiştir.

Bu tezde, bölüm 2 de karbon nanotüplerin yapısal özellikleri, sınıflandırılması ve bunlara ait terminoloji anlatılmıştır. Bölüm 3 de, karbon malzemelerde sıkı bağ hesaplamalarına genel bir giriş yapılmış, Bölüm 4 de ise karbon nanotüplerin elektronik yapısı anlatılmıştır. Bölüm 5 de çalışma sonuçları verilmiş olup Bölüm 6 da bu sonuçlarla ilgili yorumlar ve literatür karşılaştırmaları yapılmıştır. Ek-1 MD simülasyon adımı zamanının hesabını içermektedir.

2. TEK DUVARLI KARBON NANOTÜPLER

2.1 Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Yapısı

Tek duvarlı karbon nanotüpler, çapı 1 nm (10^{-9} m) boyu birkaç mikrometre (10^{-6} m) olabilen içi boş silindir şeklindeki yapılardır. Bu yapı, grafitin tek bir katmanının yani grafin levhasının bir silindir çevresinde sarılmış hali olarak düşünülebilir. Grafin levhası, 6 tane karbon atomundan oluşan balpeteği yapılardan meydana gelmiştir. Karbon atomları arasında sp^2 hibritleşmesi ile oluşan kuvvetli σ bağları bulunmaktadır.

Karbon nanotüplerin keşfi, 1991 yılında Japonya'nın NEC Labrotuarlarında S.Iijima ve grubu tarafından fulleren (C_{60}) elde edilmeye çalışılırken iç içe çok duvarlı karbon nanotüplerin elektron mikroskopuyla gözlemlenmesiyle gerçekleşmiştir. Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler ise S.Iijima ve T.Ichihashi tarafından ilk kez 1993 yılında sentezlenerek elde edilmiştir.

2.2 Karbon Nanotüplerin Sınıflandırılması

Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler (TDKNT), çapı yaklaşık 0.7-10.0 nm'ye sahip içi boş silindir yapılardır. Ancak gözlenebilen çoğunun çapı < 2 nm dir. Eğer bir karbon nanotüpün iki ucunu yokmuş gibi farzeder ve silindiri sonsuzmuş gibi düşünürsek (boy/çap oranı 10^4 - 10^5 kadar) karbon nanotüpleri 1-boyutlu olarak göz önüne alabiliriz.

Grafin levhayı oluşturan 6 karbonlu balpeteği örgüsünün, tüp eksenine etrafındaki oryantasyonu, TDKNT nin yapısını ve fiziksel özelliklerini belirlemektedir. Bu oryantasyona göre TDKNT ler iki sınıfa ayrılırlar.(Şekil 2.1)

1-Achiral yapı : Simetrik yapıya sahiptir. Ayna görüntüsünün yapısı orijinal yapı ile aynıdır.

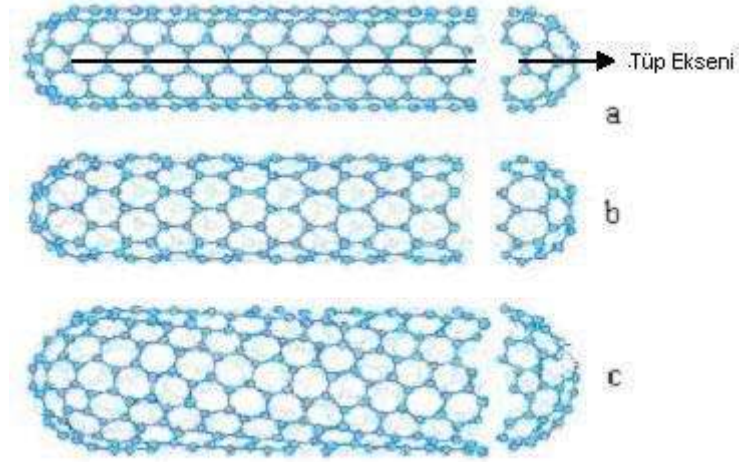
Altıgen örgünün TDKNT eksenine doğrultusundaki görüntüsüne göre

a) Armchair

b) Zig-Zag

yapı olarak ikiye ayrılır.

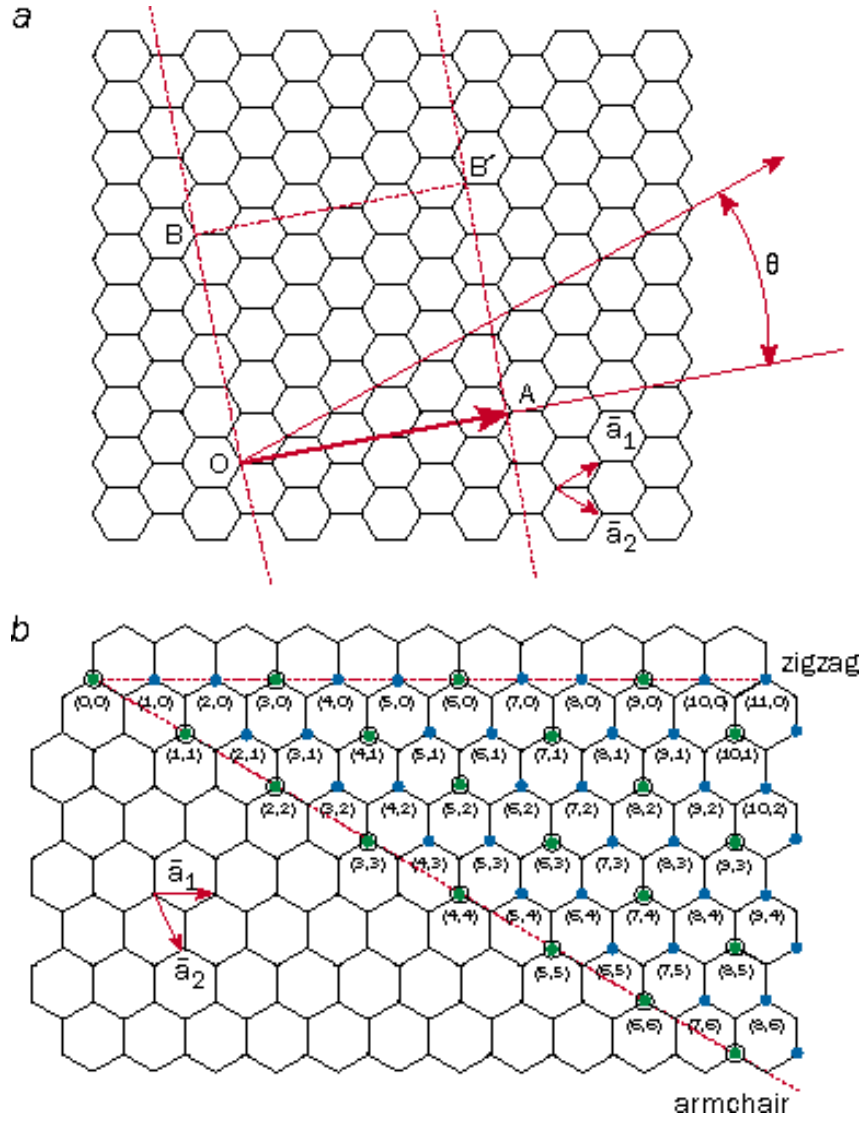
2-Chiral Yapı: Spiral simetriye sahiptir. Ayna görüntüsünün yapısı orijinal yapıyla anti-simetriktir.



Şekil 2.1 a) Armchair KNT, b) Zig-Zag KNT, c) Chiral KNT

2.3 Chiral Vektörü ($\vec{C}_h$)

TDKNT nin yapısı, nanotüp eksenine dik doğrultudaki Chiral Vektörü ($\vec{C}_h$) tarafından belirlenir (Şekil 2.2)(a). Chiral vektörün büyüklüğü karbon nanotübün çevre uzunluğunu verir. Kristalografik olarak karşılıklı aynı yerler olan O, A ve B, B' noktaları balpeteği tabakamızı ekvator düzleminde katlayıp silindir haline getirdiğimizde O ve A noktaları dolayısıyla B ve B' noktaları çakışırlar. Bu şekilde karbon nanotübün kağıt bir modeli yapılabilir.



Şekil 2.2 $\vec{C}_h$ (OA) vektörü, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ birim baz vektörleri, T; (OB) öteleme vektörü [3]

Şekil 2.2'deki $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ vektörleri aralarında 60 derece açı bulunan, ortogonal olmayan altıgen gerçek uzay baz vektörleridir.

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} \equiv \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{1}{2}a\right)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} \equiv \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{1}{2}a\right) \quad (a = \sqrt{3}a_{c-c} = 2.49 \text{ Å}) \quad (2.1)$$

Buradan yola çıkarak aralarındaki bağıntı $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2 = a^2$ ve $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = a^2/2$ olarak tanımlanır. $\vec{C}_h$ vektör, altıgen örgünün gerçek uzaydaki $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleriyle

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m) \quad (n, m: \text{tam sayılar } 0 \leq |m| \leq n) \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlanır. Burada “n” ve “m” katsayıları sırasıyla $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörleri doğrultusundaki tam sayılardır. Hegzagonal simetriden dolayı $0 \leq |m| \leq n$ olur. $\vec{C}_h$ vektörü, n ve m sayılarına bağlı olarak altıgen karbon örgülerinin tüp eksenini doğrultusundaki oryantasyonunu belirler.

n = m durumunda $\vec{C}_h = (n, n)$ vektörü Armchair KNT (örnek: $\vec{C}_h = (5, 5), (10, 10) \dots$) ;

m = 0 durumunda $\vec{C}_h = (n, 0)$ vektörü Zig-zag KNT (örnek: $\vec{C}_h = (5, 0), (10, 0) \dots$) ;

$0 < |m| < n$ durumunda $\vec{C}_h = (n, m)$ vektörü Chiral KNT yapıyı ifade eder.

Çizelge 2.1: KNT lerin Sınıflandırılması (R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, 1998)

Yapı	θ	$\vec{C}_h$	Kesit şekli
Armchair	30°	(n,n)	cis
Zig-zag	0°	(n,0)	trans
Chiral	$0^\circ < \theta < 30^\circ$	(n,m)	cis ve trans karışımı

TDKNT nin çapı (d_t), “L” tüpün çevre uzunluğu olmak üzere ;

$$d_t = \frac{L}{\pi} \quad (2.3)$$

$$L = |\vec{C}_h| = (\vec{C}_h \cdot \vec{C}_h)^{1/2} = a \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.4)$$

$$d_t = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (2.5)$$

olarak tanımlanır. KNT yapıda karbon atomları arasındaki bağ uzunluğu $1,44 \text{ Å}$ olmak üzere örgü sabiti $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \sqrt{3} \cdot 1,44 = 2,49 \text{ Å}$ olarak bulunur.

Chiral açısı (θ), $\vec{C}_h$ ile $\vec{a}_1$ vektörleri arasındaki açı olarak tanımlanır. θ , balpeteği örgünün hegzagonal simetrisinden dolayı $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$ arasında değerler alır. Chiral açısı θ , nanotüp eksenin doğrultusuna göre altıgenlerin eğim açısını ve spiral simetriyi belirler. Kosinüs teoreminden θ açısı;

$$\cos \theta = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{\left(\|\vec{C}_h\| \|\vec{a}_1\| \right)} = \frac{(2n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (2.6)$$

olarak tanımlanır.

$\theta = 0^\circ$ ise zigzag KNT, $\theta = 30^\circ$ ise armchair KNT, $0^\circ < \theta < 30^\circ$ ise chiral KNT olur.

$\vec{C}_h$ ve θ , KNT nin yapısal özelliklerini belirlerler. Örneğin elektrik iletkenliklerine göre armchair KNT ler iletken, zig-zag KNT ler yarıiletken özelliktedirler.

2.4 Öteleme Vektörü ($\vec{T}$)

Öteleme vektörü $\vec{T}$, 1-boyutlu KNT nin birim vektörü olarak tanımlanmıştır. $\vec{T}$ vektörü nanotüp eksenine paralel ve Şekil 2.2'deki sarılmamış balpeteği tabakasındaki chiral vektörüne ($\vec{C}_h$) diktir. Şekil 2.2'de $\vec{OB}$ olarak gösterilen öteleme vektörü $\vec{T}$, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörlerinin lineer kombinasyonu olarak

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (t_1 \text{ ve } t_2 \text{ tam sayılar}) \quad (2.7)$$

tanımlanır. Öteleme vektörü $\vec{T}$, $\vec{OB}$ vektöründen yani $\vec{C}_h$ vektörünün normalinden geçen 2-boyutlu grafin tabakanın birinci örgü noktasına karşılık gelir (Şekil 2.2). Bundan dolayı t_1 ve t_2 'nin "1" den başka ortak böleni yoktur. $\vec{T} \cdot \vec{C}_h = 0$ diklik bağıntısı kullanarak; t_1 ve t_2 'nin m ve n cinsinden ifadesi,

$$t_1 = \frac{(2m+n)}{d_r}, \quad t_2 = -\frac{(2n+m)}{d_r} \quad (2.8)$$

olarak bulunur. Burada d_r , $(2m+n)$ ve $(2n+m)$ nin en büyük ortak bölenidir (EBOB).

Ayrıca d, n ve m tamsayılarının en büyük ortak böleni (EBOB) olarak tanımlanırsa d_r ile d arasındaki ilişki aşağıdaki gibi olur.

eğer (n-m) 3d 'nin katı ise $d_r = 3d$;

eğer (n-m) 3d 'nin katı değil ise $d_r = d$

Örnek; $\vec{C}_h = (17,0)$ olan bir KNT için $d = \text{EBOB}(17,0)=17$ ve $n-m=17-0=17$. Buna göre $d_r=d=17$ alınır. Öteleme vektörünün büyüklüğü;

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

bağıntısı ile verilir.

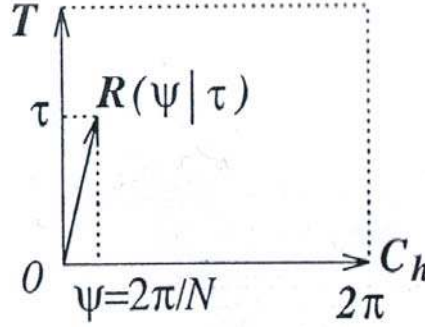
Bir boyutlu karbon nanotübün birim hücresi $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ vektörlerinin vektörel çarpımı $(|\vec{C}_h \times \vec{T}|)$ yani $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ vektörlerine göre belirlenen $OAB'B$ dikdörtgeninin alanıdır (Şekil 2.2). Tek bir hegzağın alanı ise $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörlerinin vektörel çarpımı $(|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|)$ ile belirlenir. Böylece KNT birim hücresi içersindeki bulunan hegzağın sayısı (N);

$$N = \frac{|\vec{C}_h \times \vec{T}|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|} = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r} = \frac{2L^2}{a^2 d_r} \quad (2.10)$$

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

2.5 Simetri Vektörü ($\vec{R}$)

1-boyutlu nanotübün birim hücresi içerisindeki karbon atomu konum vektörlerini, uzay grup simetri vektörünün ($\vec{R}$) “i” kez çarpımı yani “i $\vec{R}$ ” ile belirleriz.



Şekil.2.3 Uzay grup simetri operasyonu $R=(\Psi, \tau)$ Ψ , nanotüp eksenini etrafındaki dönmenin açısı. τ , T vektörü doğrultusundaki geçiş (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

$\vec{R}$ vektörü KNT içindeki karbon atomlarının koordinatlarını belirlemek için kullanılır. i $\vec{R}$ birim hücre dışına çıktığı zaman periyodik sınır koşullarını kullanarak, $\vec{T}$ yada $\vec{C}_h$ integral sayıları ile tanımlanmış geçiş yönünde, birim hücre içerisinde kalacak şekilde ayarlanır. $\vec{R}$ vektörünü KNT nin birim hücresinin $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ ortogonal vektörleri üzerindeki izdüşümüne göre açıklamak uygundur. Simetri vektörü $\vec{R}$ konum vektörüdür ve $\vec{C}_h$ yönündeki en küçük bileşene sahiptir. $\vec{R}$, $\vec{a}_1$ ve $\vec{a}_2$ baz vektörlerine bağlı olarak yazabiliriz;

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

p ve q tam sayılarının “1” den başka ortak böleni yoktur. $\vec{R}$ vektörünün, $\vec{C}_h$ bileşeni yani $\vec{C}_h \cdot \vec{R}$ çarpımı $|\vec{T} \times \vec{R}|$ ile ya da $\vec{T} \cdot \vec{R}$ çarpımı $|\vec{C}_h \times \vec{R}|$ ile orantılıdır.

$$\frac{\vec{C}_h \cdot \vec{R}}{L} = \frac{|\vec{R} \times \vec{T}|}{T} \text{ ya da } \frac{\vec{T} \cdot \vec{R}}{T} = \frac{|\vec{C}_h \times \vec{R}|}{L} \quad (2.12)$$

$$\vec{T} \times \vec{R} = (t_1 q - t_2 p)(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \quad (2.13)$$

$\vec{R}$ vektörünü en küçük konum vektörü yapmak için;

$$t_1 q - t_2 p = 1 \quad (2.14)$$

alınır. $\vec{R}$ vektörünün 1- boyutlu KNT birim hücresi içinde olmasından dolayı

$$0 < mp - nq \leq N \quad (2.15)$$

olmalıdır.

$$0 < \frac{\vec{R} \cdot \vec{T}}{T^2} = \frac{|\vec{C}_h \cdot \vec{R}|}{LT} = \frac{mp - nq}{N} < 1 \quad (2.16)$$

$$0 < \frac{\vec{R} \cdot \vec{C}_h}{L^2} = \frac{|\vec{R} \cdot \vec{T}|}{LT} = \frac{t_1 q - t_2 p}{N} \leq 1 \quad (2.17)$$

Denklem (2.17) den;

$$0 < t_1 q - t_2 p \leq N \quad (2.18)$$

KNT birim hücresinin bütün N konum vektörleri $i \vec{R}$ yi ($i=1 \dots N$) belirlemek için her “i” için

$$i(t_1 q - t_2 p) = i \quad (2.19)$$

açıklaması kullanılır ve $i(t_1 q - t_2 p)$ ifadesinin maksimum değeri N olur. $N \vec{R}$ nin $\vec{C}_h$ bileşeni her zaman $|\vec{C}_h| = L$ ye eşittir ve $i \vec{R}$ vektörleri KNT birim hücresi içersinde N eşdeğerli olmayan yerleşimi belirler.

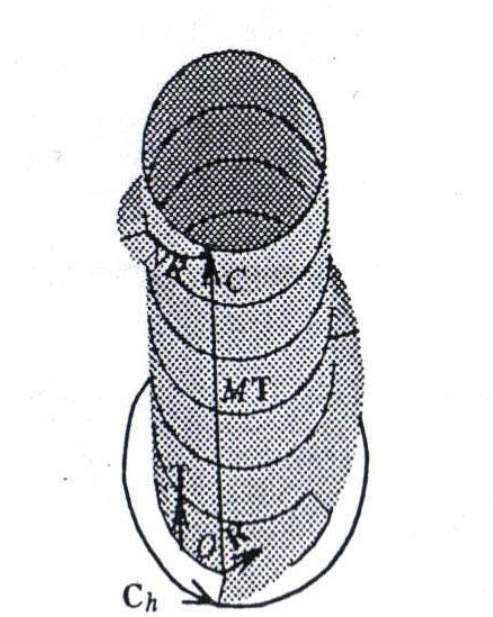
Sonuçta $\vec{C}_h$ doğrultusu boyunca olan izdüşümleri için farklı değerler olacaktır. Bundan dolayı $i \vec{R}$, ($i = \dots N$), KNT birim hücresi içinde N farklı atom konumu üretir.

Fiziksel açıdan, $\vec{R}$ vektörünü nanotüp eksenini etrafında, $\vec{T}$ nin doğrultusundaki bir öteleme τ ile birleşmiş ψ açısının rotasyonundan meydana gelmiştir ve bir chiral nanotübün $\vec{R} = (\psi | \tau)$ ile gösterilen temel uzay grup simetrisini yansıtır. $\vec{C}_h$ vektörü üzerindeki $\vec{R}$ nin izdüşümü $\frac{L}{d_t}$ ile ölçeklendirilmiş ψ açısını verir. Bununla birlikte $\vec{R}$ nin $\vec{T}$ üzerindeki izdüşümünde KNT 1-boyutlu uzay grubunun temel simetri etkisi τ ötelemesini verir.

$$\tau = \frac{|\vec{R} \cdot \vec{C}_h|}{L} = \frac{(mp - nq) |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2|}{L} = \frac{(mp - nq) T}{N} \quad (2.20)$$

$$\psi = \frac{|\vec{T} \times \vec{R}|}{T} \frac{2\pi}{L} = \frac{d_R(t_1 q - t_2 p)}{\sqrt{3}L} \frac{\sqrt{3}a^2}{2} = \frac{2\pi}{N} \quad (2.21)$$

ψ açısı, KNT eksenini etrafındaki dönmedir. τ , $\vec{T}$ vektörü doğrultusundaki ötelemedir. Grup simetri operatörü $\vec{R} = (\psi | \tau)^N$ olarak belirlenir. p ve q sayıları, (0,0) konumundaki atoma simetri operatörü $\vec{R} = (\psi | \tau)^N$ etkideği zaman atomun geleceği koordinatları belirler. Yani simetri operatörü, O örgü noktasını, C örgü noktasına taşır.



Şekil.2.4 $\vec{C}_h = (4,2)$ Chiral KNT için Simetri Vektörü (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

$$N\vec{R} = \vec{C}_h + M\vec{T} \quad \text{ve} \quad (2.22)$$

$$M = mp - nq \quad (2.23)$$

Burada M, O noktasından $N\vec{R}$ noktasına ulaşmak için uygulanması gereken $\vec{T}$ vektörü sayısını gösteren bir tamsayıdır.

Çizelge 2.2 n ve m katsayılarına bağlı olarak değişik KNT ler için bütün yapı parametrelerinin değerleri (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

$\tilde{C}_h$	d	d_r	$d_t(A)$	$\frac{ L }{a}$	$\vec{T}$	$\frac{ T }{a}$	N	$\vec{R}$	M
(4,2)	2	2	4.15	$\sqrt{28}$	(4,-5)	$\sqrt{21}$	28	(1,-1)	6
(5,5)	5	15	6.78	$\sqrt{75}$	(1,-1)	1	10	(1,0)	5
(9,0)	9	9	7.05	9	(1,-2)	$\sqrt{3}$	18	(1,-1)	9
(6,5)	1	1	7.47	$\sqrt{91}$	(16,-17)	$\sqrt{273}$	182	(1,-1)	11
(7,4)	1	3	7.55	$\sqrt{93}$	(5,-6)	$\sqrt{31}$	62	(1,-1)	11
(8,3)	1	1	7.72	$\sqrt{97}$	(14,-19)	$\sqrt{291}$	194	(3,-4)	41
(10,10)	10	30	13.56	$\sqrt{300}$	(1,-1)	1	20	(1,0)	10
(n,n)	n	$3n$	$\sqrt{3}na/\pi$	$\sqrt{3}n$	(1,-1)	1	$2n$	(1,0)	n
$(n,0)$	n	n	na/π	n	(1,-2)	$\sqrt{3}$	$2n$	(1,-1)	n

2.6 Birim Hücre ve Brillouin Bölgesi

Gerçek uzaydaki bir KNT için birim hücre Şekil 2.2'deki $\vec{C}_h$ ve $\vec{T}$ vektörlerinden oluşturmuş $OAB'B$ dikdörtgenidir. Eğer bu birim hücre içersinde $2N$ tane karbon atomu varsa, N tane π bağı ve π^* elektronik enerji bandı bulunur. Benzer şekilde, fonon dispersiyon bağıntısı, birim hücre içersindeki her bir atomun vektörel yerleşiminin sonucu olarak $6N$ dallanma içerir.

KNT için $\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$ ters örgü vektörleri olmak üzere eksen doğrultusundaki $\vec{K}_2$ ve ekvator düzlemi doğrultusundaki $\vec{K}_1$ ters örgü vektörleri $\vec{R}_i \cdot \vec{K}_j = 2\pi\delta_{ij}$ bağıntısı ile bulunur. KNT ler 1-boyutlu bir yapı olduğundan dolayı sadece $\vec{K}_2$ ters örgü vektörünü içerir. $\vec{K}_1$, $\vec{C}_h$ doğrultusundaki farklı k dalga vektörü sayılarını verir.

$$\vec{C}_h \cdot \vec{K}_1 = 2\pi \quad \vec{T} \cdot \vec{K}_1 = 0 \quad (2.24)$$

$$\vec{C}_h \cdot \vec{K}_2 = 0 \quad \vec{T} \cdot \vec{K}_2 = 2\pi \quad (2.25)$$

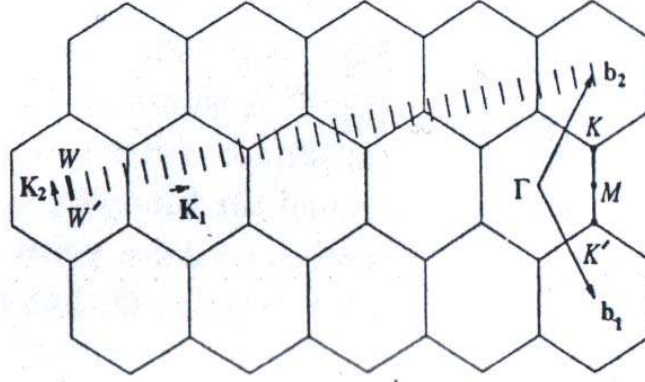
Bağıntılarını kullanarak $\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$ ters örgü vektörleri

$$\vec{K}_1 = \frac{1}{N}(-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2), \quad \vec{K}_2 = \frac{1}{N}(m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2) \quad (2.26)$$

olarak bulunur. Burada $\vec{b}_1$ ve $\vec{b}_2$ vektörleri iki boyutlu grafitin ters örgü baz vektörleridir.

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{i} + \frac{2\pi}{a}\hat{j} \equiv \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}\right),$$

$$\vec{b}_2 = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\hat{i} + \frac{2\pi}{a}\hat{j} \equiv \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}\right) \quad (a; \text{örgü sabiti}) \quad (2.27)$$



Şekil 2.5 KNT lerin Brillouin bölgesi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

Şekil 2.5’de $\vec{C}_h = (4,2)$ chiral karbon nanotüp için $\vec{K}_1$ ve $\vec{K}_2$ ters örgü vektörleri gösterilmiştir. $N\vec{K}_1 = (-t_2\vec{b}_1 + t_1\vec{b}_2)$ 2-boyutlu grafin için bir ters örgü vektörüne karşılık geldiğinden $N\vec{K}_1$ ile ayrılan iki dalga vektörü birbirinin aynısıdır. t_1 ve t_2 nin “1” den başka ortak böleni olmadığından, $N-1$ vektörün ($\mu\vec{K}_1$ ($\mu=1,2,3,\dots,N-1$)) hiçbirisi ters örgü vektörü değildir. Yani N dalga vektörü ($\mu\vec{K}_1$ ($\mu=0,1,2,3,\dots,N-1$)) N tane ayrık k dalga vektörü verir. Bu dalga vektörlerinin boyu, *birinci Brillouin bölgesinin* uzunluğu olan $\frac{2\pi}{T}$ dir. Bu N tane k dalga vektörü değeri, N tane bir boyutlu enerji bandı meydana getirir. $\vec{T}$ vektörünün geçiş simetrisinden dolayı sonsuz uzunluklu bir KNT için $\vec{K}_2$ vektörü yönünde bir sürekli dalga vektörü elde edilir. Fakat L_t uzunluklu KNT için dalga vektörleri arasındaki fark $\frac{2\pi}{L_t}$ dir. Bu fark deneysel olarak da gözlenmiştir.

Çizelge 2.3 KNT ler için Parametreler (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

Sembol	İsim	Formül	Değer
$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 $	baz vektör büyüklüğü	$a = \sqrt{3}a_{c-c} = 2,49A^0$	$a_{c-c} = 1,49A^0$
$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	gerçek uzay baz vektörü	$(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})a, (\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})a$	x,y koordinatı
$\vec{b}_1, \vec{b}_2$	ters örgü baz vektörü	$(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1)\frac{2\pi}{a}, (\frac{1}{\sqrt{3}}, -1)\frac{2\pi}{a}$	x,y koordinatı
$\vec{C}_h$	chiral vektör	$\vec{C}_h = n \vec{a}_1 + m \vec{a}_2 \equiv (n, m)$	$0 \leq m \leq n$
L	knt nin çevre uzunluğu	$L = \vec{C}_h = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$	
d_t	çap	$d_t = \frac{L}{\pi}$	
θ	chiral açısı	$\sin \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}$ $\cos \theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}$	$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{6}$ $\tan \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n + m}$
d	ebob(n,m)		
d_r	ebob(2m+n, 2n+m)	eğer (n-m) 3d 'nin katı ise $d_r = 3d$ eğer (n-m) 3d 'nin katı değil ise $d_r = d$	
$\vec{T}$	öteleme vektörü	$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \equiv (t_1, t_2)$	$\text{ebob}(t_1, t_2) = 1$
$ \vec{T} $	Öteleme vektörünün büyüklüğü	$T = \vec{T} = \frac{\sqrt{3}L}{d_r}$	
N	birim hücre içindeki hegzaon sayısı	$N = \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{d_r}$	
$\vec{R}$	simetri vektörü	$\vec{R} = p\vec{a}_1 + q\vec{a}_2 \equiv (p, q)$	$\text{ebob}(p, q) = 1$

3. KARBON MALZEMELERDE SIKI – BAĞ YÖNTEMİ HESAPLAMALARI

Birim hücrelerin $\vec{a}_i (i = 1, 2, 3)$ örgü vektörleri yönündeki öteleme simetrilerinden dolayı Ψ ile gösterilen herhangi bir örgü dalga fonksiyonu

$$T_{\vec{a}_i} \Psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_i} \Psi \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.1)$$

ifadesiyle verilen Bloch teoremini sağlar. Burada $T_{\vec{a}_i}$, $\vec{a}_i$ örgü vektörü boyunca öteleme işlemini, $\vec{k}$ bir dalga vektörünü göstermektedir. Bu bağıntıyı sağlayan birçok farklı Ψ dalga fonksiyonu vardır. En sık kullanılan Ψ fonksiyonu düzlem dalgaların lineer birleştirilmesi halinde yazılabilenlerdir. Düzlem dalgaların sıkça kullanılmasının nedenleri:

- Düzlem dalgalar üzerinde integrallerin kolayca ve analitik olarak alınabilmesi,
- Nümerik duyarlılığın sadece kullanılan düzlem dalga sayısına bağlı olmasıdır.

Ancak düzlem dalga yönteminin getirdiği bazı sınırlamalar da vardır. Bunlar:

- Hesaplamanın boyutları büyüktür,
- Düzlem dalga fonksiyonunu katılardaki atomik orbitallerle ilişkilendirmek zordur.

Bloch teoremini sağlayan ve birim hücre veya atomdaki j . atomik orbital ile ilişkili Sıkı-Bağ Bloch fonksiyonu

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}) \quad (j = 1, \dots, n) \quad (3.2)$$

ifadesi ile verilir. Burada N kristaldeki atom sayısı, $\vec{R}$ atomun pozisyonu, ϕ_j atomun j . durumundaki dalga fonksiyonu, n birim hücredeki dalga fonksiyonu sayısıdır. Katılarda her k değeri için n tane Bloch fonksiyonu vardır. $\phi_j(\vec{k}, \vec{r})$ fonksiyonu oluşturulurken $N \cong 10^{24}$ birim hücredeki ϕ_j ler $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})}$ faz vektörü ile çarpılıp kristali (katıyı) meydana getiren $\vec{R}$ örgü vektörleri üzerinden toplam alınmıştır. Bu şekilde Bloch fonksiyonunda atomik orbitallerin kullanılmasının avantajları:

- Birim hücredeki atomik dalga fonksiyonu sayısı n , düzlem dalga sayısından daha azdır.
- Birçok fiziksel özelliğin formülleri atomik orbitaller kullanılarak rahatlıkla çıkartılabilir.

Sıkı-Bağ metodunun dezavantajları:

- Atomik orbitalerin atomlar arası bölgeyi tanımlayamaması,
- Sayısal duyarlılığı geliştirmenin zorluğudur.

Denklem (3.2) de verilen Sıkı-Bağ fonksiyonu Bloch şartını sağlamaktadır. Fonksiyon a kadar ötelendiğinde,

$$\begin{aligned}\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R} - \vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{a})} \phi_j(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \phi_j(\vec{k}, \vec{r})\end{aligned}\quad (3.3)$$

ise Bloch şartını sağladığı görülmektedir. Her $\vec{a}_i$ örgü vektörü boyunca öteleme işleminde periyodik sınır şartları kullanıldığında ($M \equiv N^{\frac{1}{3}}$)

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + M\vec{a}_i) = \phi_j(\vec{k}, \vec{r}) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.4)$$

Burada $T_{M\vec{a}_i} = 1, e^{ikM\vec{a}_i} = 1$ şartını getirir. Buradan da k ile p arasındaki bağıntı

$$k = \frac{2p\pi}{Ma_i} \quad (p = 0, 1, \dots, M-1) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.5)$$

bulunur.

Üç boyutta $\vec{k}$ nın bileşenleri k_x, k_y, k_z ile gösterilir. Birinci Brillouin bölgesinde $M^3 = N$ tane dalga vektörü vardır. k_i ler sürekli değişkenler şeklinde algılanmaktadır.

Bir katının özfonksiyonları $\Psi_j(\vec{k}, \vec{r})$ ($j = 1, 2, \dots, n$), Bloch fonksiyonlarının $\phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r})$ lineer kombinasyonu şeklinde yazılır:

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\vec{k}) \phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3.6)$$

Burada $C_{jj'}(\vec{k})$ tanımlanması gereken katsayılarıdır.

Eğer H katının hamiltoniyeni ise bu dalga fonksiyonlarının j inci özdeğerleri k cinsinden

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\int \Psi_j^* H \Psi_j d^3 r}{\int \Psi_j^* \Psi_j d^3 r} \quad (3.7)$$

dalga fonksiyonu bağıntılarını yerine koyup, indeks değişikliğini yaptıktan sonra

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \phi_j | H | \phi_{j'} \rangle}{\sum_{j,j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \phi_j | \phi_{j'} \rangle} \equiv \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} \quad (3.8)$$

Burada $H_{jj'}(\vec{k}) = \langle \phi_j | H | \phi_{j'} \rangle$ transfer integral matrisi,

$S_{jj'}(\vec{k}) = \langle \phi_j | \phi_{j'} \rangle$ ($j, j' = 1, \dots, n$) overlap integral matrisidir. Verilen belli bir k değeri için $n \times n$ matrislerini belirlediğimizde özdeğerleri minimize eden C_{ij}^* katsayılarını bulabiliriz. C_{ij}^* katsayıları da k ya bağlıdır.

Lokal minimum değerini $\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = 0$ şartını kullanarak bulabiliriz.

C_{ij}^* 'e göre kısmi türev aldığımızda diğer katsayıları $C_{ij'}$, C_{ij}^* , C_{ij} yi sabit kabul edersek

$$\frac{\partial E_k(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = \frac{\sum_{j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} - \frac{\sum_{j,j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\left(\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'} \right)^2} \sum_{j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = 0 \quad (3.9)$$

denklemin her iki tarafını $\sum_{j,j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}$ ile çarpıp

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{jj'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} \quad \text{ifadesini kullanırsak denklem} \quad (3.10)$$

$$\sum_{j'=1}^N H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = E_i(\vec{k}) \sum_{j'=1}^N S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} \quad (3.11)$$

Sütun vektörünü

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ C_{i2} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

şeklinde tanımlarsak o zaman denklem

$$HC_i = E_i(\vec{k})SC_i \quad (3.13)$$

şeklinde yazabiliriz.

Eğer $[H - E_i(\vec{k})S]C_i = 0$ matrisinin tersi varsa her iki tarafı bu ters matris ile çarpalım. Böylece C_i matrisi sıfır olur. C_i matrisi sıfır olursa hiçbir dalga fonksiyonu elde edilemez. Onun için $\det[H - ES] = 0$ olmalıdır. Bu denklem her bir k değeri için n tane enerji özdeğerlerini $E_i(\vec{k})$ ($i = 1, \dots, n$) veren seküler denklemdir.

Sıkı-Bağ yönteminde enerji dispersiyon değerlerinin bulunmasında izlenecek yol:

Sıkı-Bağ yönteminde, seküler denklem

$$\det[H - ES] = 0 \quad (3.14)$$

çözülerek enerji özdeğerleri $E_i(\vec{k})$ bulunur. Bu özdeğerler ters örgü uzayının Birinci Brillouin bölgesindedir. Üç boyutlu bir katı için k nın her değeri için

- Birim hücre ve birim hücre vektörleri $\vec{a}_i$ tanımlanır. Birim hücredeki atomların koordinatları belirlenir. Hesaplarda kullanılacak olan n tane atomik orbitaller seçilir.
- Brillouin bölgesi ve ters örgü vektörleri $\vec{b}_i$ tanımlanır. Brillouin bölgesindeki simetri eksenleri ve k noktaları seçilir.
- Seçilen k noktalarında transfer ve overlap (H_{ij} ve S_{ij}) matrisleri oluşturulur.

Eğer overlap matrisi birim matris olarak alınıp sadece transfer matrisi oluşturulursa Slater-Koster extrapolasyonu uygulanmış olur. Sıkı-Bağ hesapları “self-consistent” değildir, yani hakiki sistemlere uygularken matris elemanları sistem parametreleri olarak seçilip, deneysel sonuç veya “first-principle” hesap sonuçlarına fit edilerek bulunur.

Daha sonra Slater- Koster veya $\vec{k} \cdot \vec{p}$ extrapolasyon metotları uygulanır. Sıkı-Bağ yöntemi kovalent yapılar için kullanılmaktadır. sp , sp^2 , sp^3 şeklinde hibritleşen sistemlere uygulanmaktadır.

oluşur.

$$E_{\mu}(k) = E_{g2D} \left(k \frac{\vec{K}_2}{|\vec{K}_2|} + \mu \vec{K}_1 \right), (\mu = 0, 1, \dots, N-1 \text{ ve } -\frac{\pi}{T} < k < \frac{\pi}{T}) \quad (4.2)$$

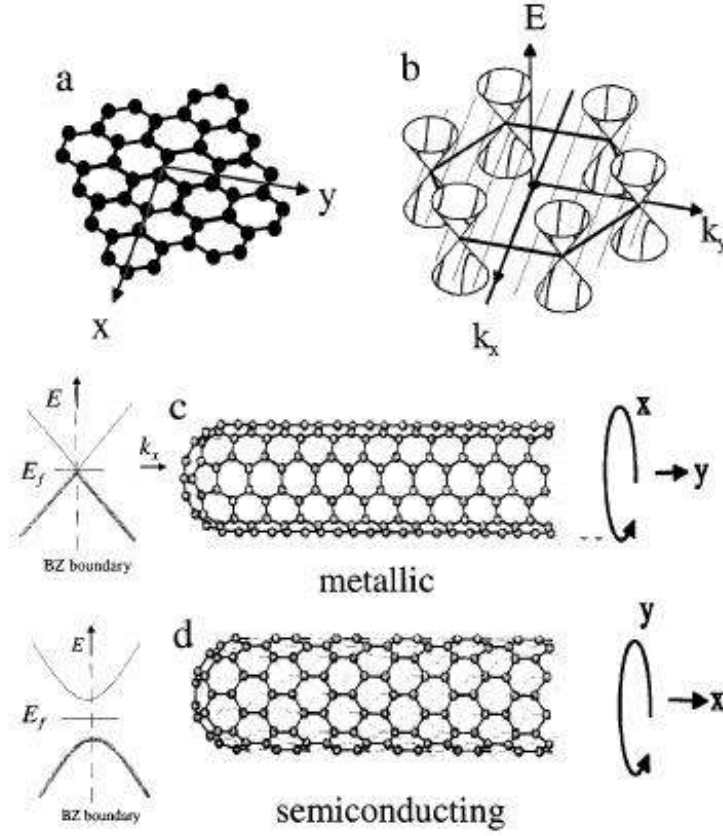
Kesikler, $(k\vec{K}_2/|\vec{K}_2|) + \mu\vec{K}_1$ çizgilerinde oluştuğunda, N parça enerji dispersiyon eğrileri, 2 boyutlu grafin için 2 boyutlu enerji dispersiyon alanı kesitine denk olur. Eğer belirli bir (n, m) nanotüp için, kesikli çizgiler, 2 boyutlu grafitin π ve π^* enerji bantlarının simetri tarafından yozlaştırıldığı yerde, 2 boyutlu Brillouin bölgesinin K noktasına doğru ilerlerse 1 boyutlu enerji bantları, sıfır enerji yarıklarına sahip olurlar. Bu KNT ler için Fermi düzeyi civarındaki durum yoğunluğu belirli bir değer alır ve böylece bu tüpler metaliktir. Eğer kesikli çizgiler K noktasına doğru ilerlemezlerse, KNT ler valans ve iletkenlik bantları arasında belirli enerji yarıklarına sahip olurlar ve böylece yarıiletken davranış gösterirler.

Şekil 4.1 deki $Y\vec{K}$ vektörünün boyunun, $\vec{K}_1$ boyuna oranı tam sayı ise metalik enerji bandı elde edilmiş olur. Burada $Y\vec{K}$ vektörü

$$Y\vec{K} = \frac{2n+m}{3} \vec{K}_1 \quad (4.3)$$

bağıntısı ile verilir. Metalik nanotüp şartı, $(2n+m)$ veya $(n-m)$ değerinin 3 sayısının katları olmasıdır. Özellikle (n, n) ile verilen armchair KNT ler her zaman metaliktir. $(n, 0)$ ile verilen zig-zag KNT ler yalnızca n değerinin 3 sayısının katı olduğu durumlarda metaliktir. Diğer durumlardaki zig-zag KNT ler yarıiletken davranış gösterirler.

4.1 Durum Yoğunluğu ve Enerji Bant Aralığı



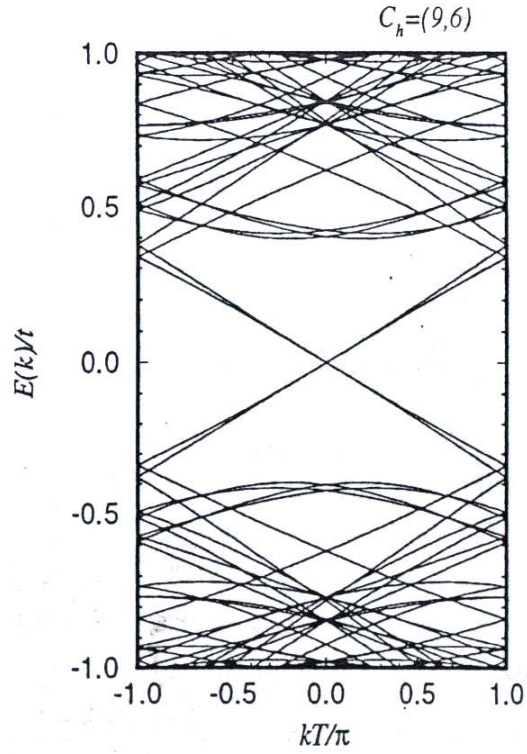
Şekil 4.2 Fermi enerjisi civarında elektronik durumların k dalga vektörüne göre değişimi

Bütün metalik KNT ler için durum yoğunluğu çap ve chirality den bağımsız olarak tüp eksenine boyunca birim uzunluk başına

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

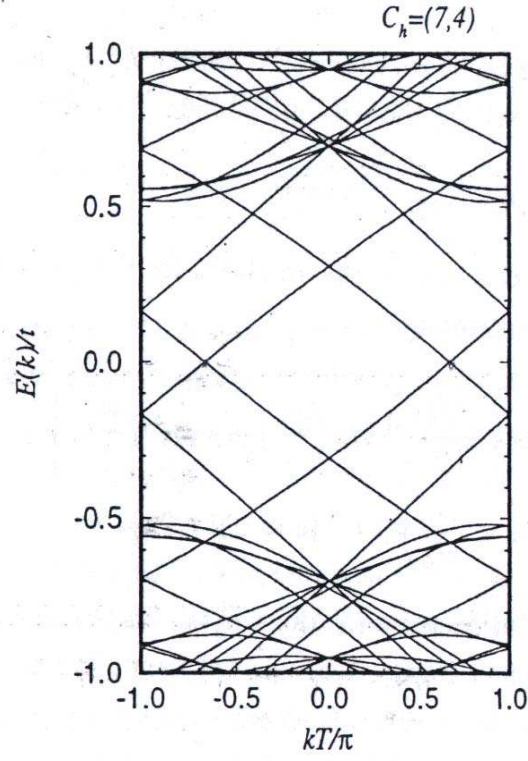
şeklinde verilir.

a grafin tabakanın örgü sabiti ve t komşu iki karbon bağı arasındaki sıkı bağ overlap enerjisidir.



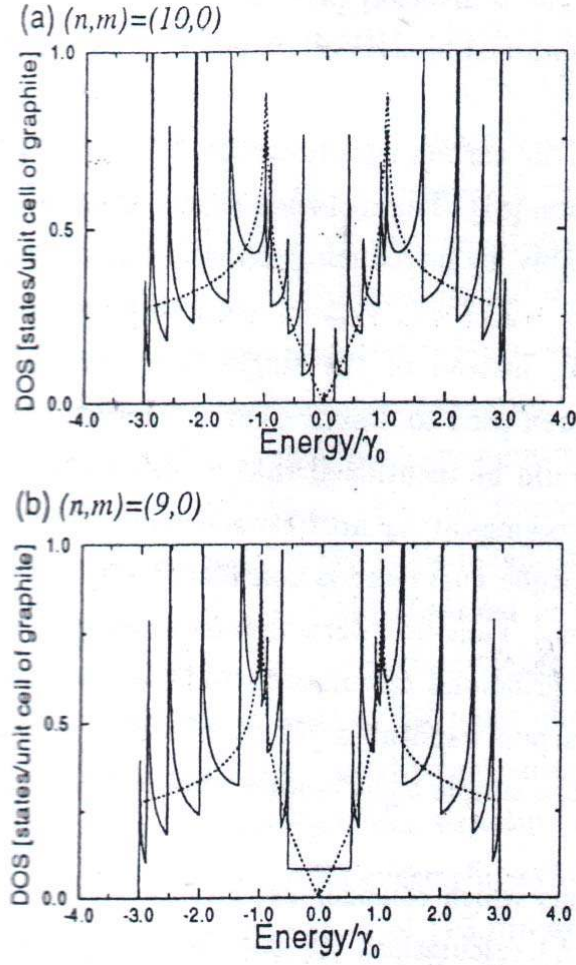
Şekil 4.3 $\vec{C}_h = (9,6)$ Achiral karbon nanotüp için enerji bandının değişimi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

1-boyutlu metalik nanotüp $(n,m) = (9,6)$ için $-t$ ve t enerji aralığında enerji bandının değişim grafiği gösterilmektedir. $E(k)/|t|$ birimsizdir. Fermi seviyesindeki enerji değeri $E=0$ dır. $(9,6)$ KNT nin en büyük ortak böleni (ebob) 3 tür. O halde $d=3$ ve $d_r=3$ olarak yazılır ve $k=0$ durumunda dört enerji bandı kesişmektedir. Buda bize fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu olduğunu göstermektedir ve $(9,6)$ KNT metalik davranış göstermektedir.



Şekil 4.4 $\vec{C}_h = (7,4)$ Achiral karbon nanotüp için enerji bandının değişimi (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

1-boyutlu metalik nanotüp $(n,m) = (7,4)$ için $-t$ ve t enerji aralığında enerji bandının değişim grafiği gösterilmektedir. $E(k)/|t|$ birimsizdir. Fermi seviyesindeki enerji değeri $E=0$ dır. $(7,4)$ KNT nin en büyük ortak böleni (ebob) 1 dir. O halde $d=1$ ve $d_r=3$ olarak yazılır ve $k = \pm(2/3)(\pi/T)$ durumunda iki enerji bandı kesişmektedir. Buda bize fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu olduğunu göstermektedir ve $(7,4)$ KNT metalik davranış göstermektedir.

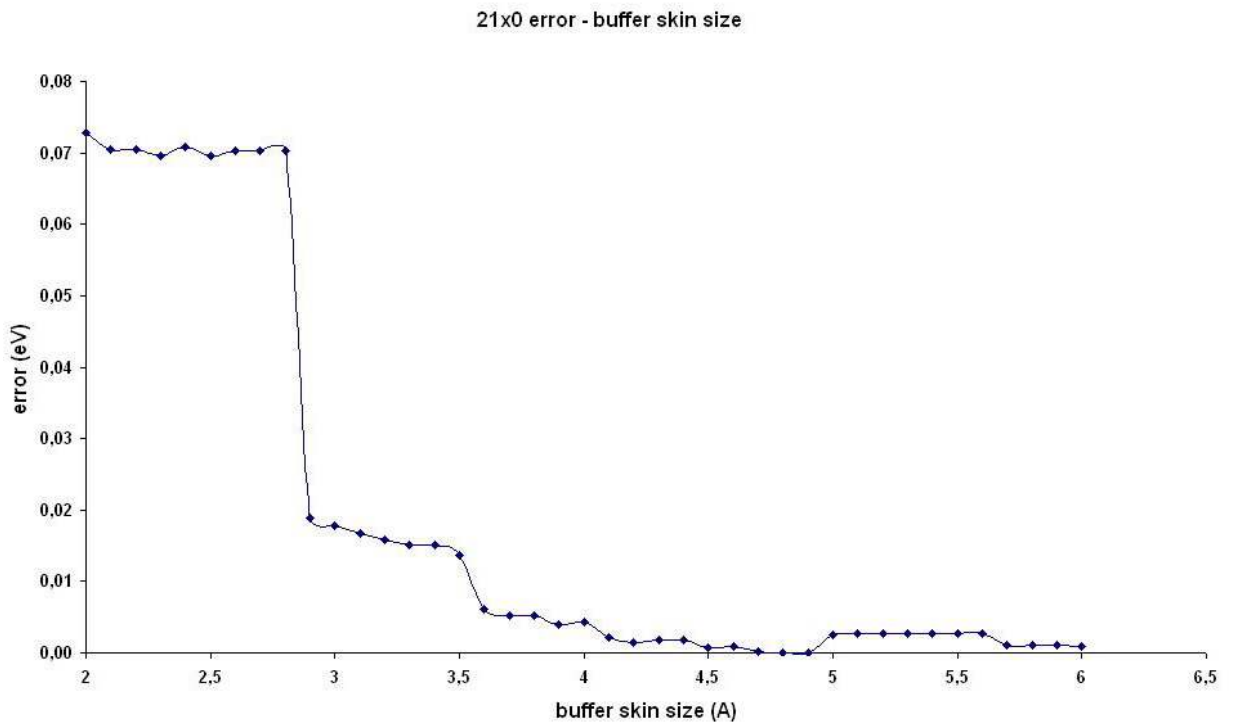
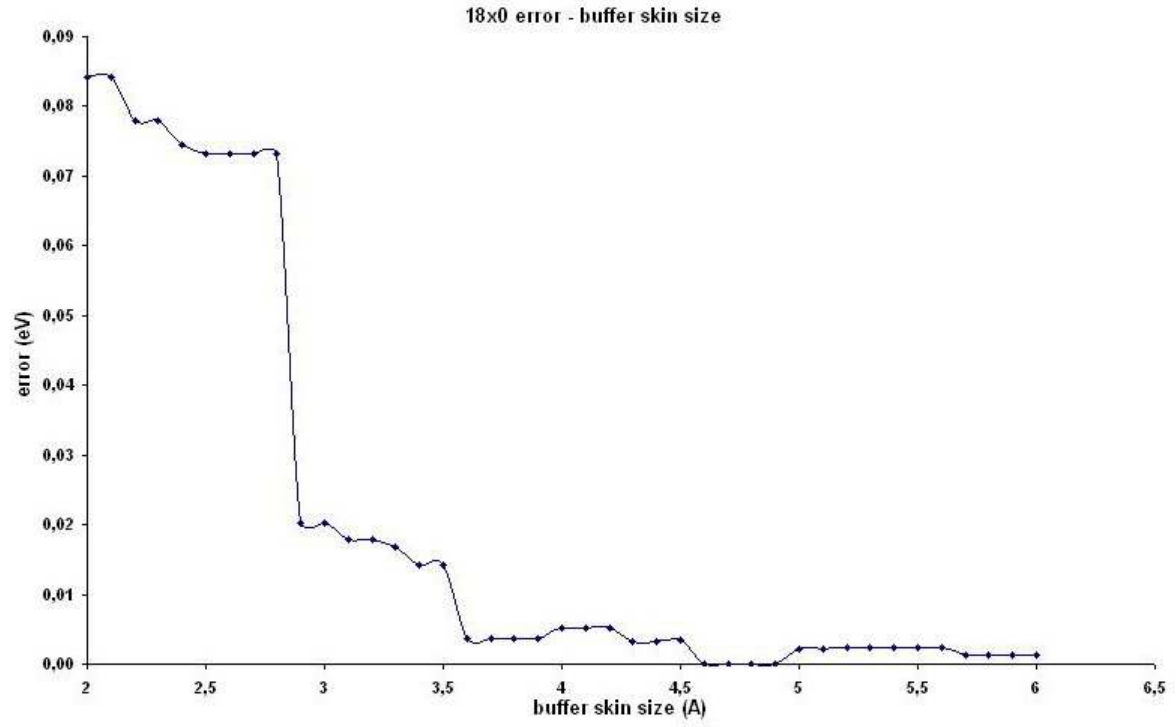


Şekil 4.5 (10,0) ve (9,0) KNT lerin durum yoğunluğu (R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, 1998)

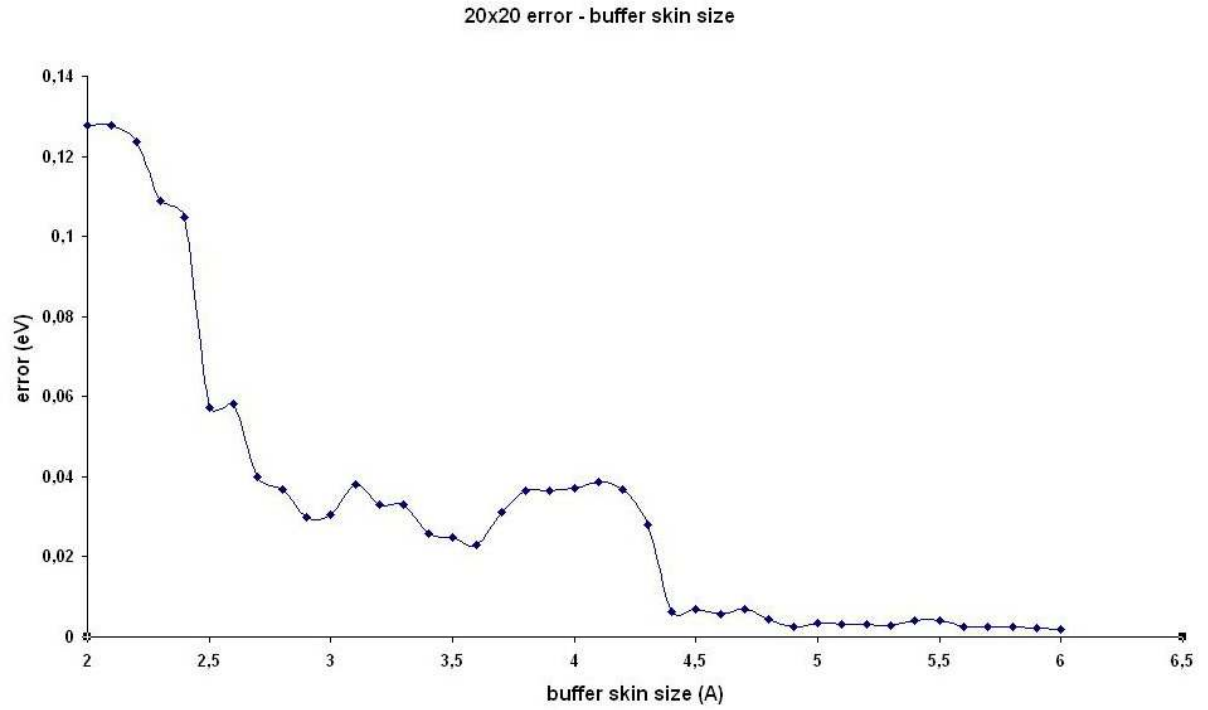
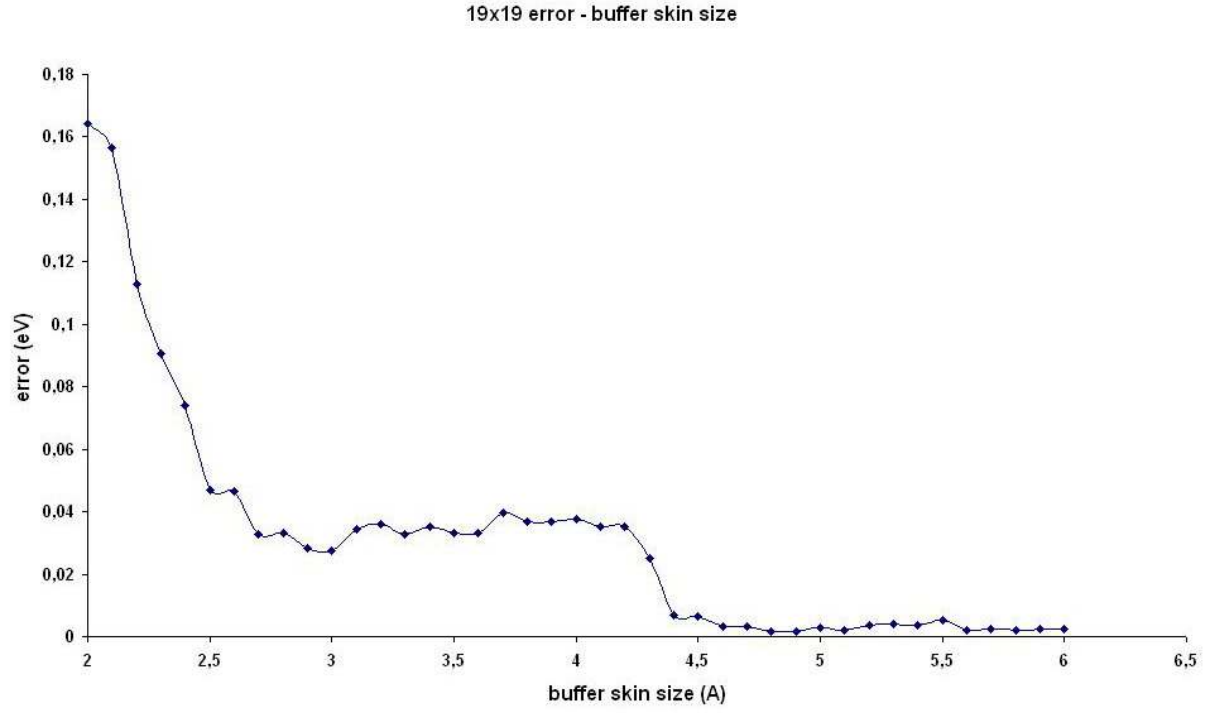
Şekil 4.5 (a) ve (b) sırasıyla (10,0) ve (9,0) zig-zag yapıdaki karbon nanotüplerin durum yoğunluğu grafiği görülmektedir. Zig-zag yapıdaki metalik (9,0) KNT ile yarıiletken (10,0) KNT nin durum yoğunluğu karşılaştırmaları incelenmiştir. Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu $E=0$ konumuna getirilmiştir. Yarıiletken karbon nanotüpler için durum yoğunluğu sıfır değerine sahipken metalik karbon nanotüpler için belirgin bir durum yoğunluğu değeri vardır.

5. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında farklı yapıdaki karbon nanotüplerin (metaller için 2x2 den 20x20 ye kadar tüm tüpler, yarıiletkenler için ise 4x0 dan 30x0 a kadar tüm tüpler) durum yoğunlukları 0,1 K de ve 300 K de 0,025 eV elektronik sıcaklıkta O(N) Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Çalışmalarında G.Dereli, C.Özdoğan (2003)(a), G.Dereli, C.Özdoğan (2003)(b), C.Özdoğan, G.Dereli, T.Çağın (2002) tarafından geliştirilen O(N) sıkı-bağ moleküler dinamik simülasyon programı kullanıldı. Bu program da velocity verlet algoritmaları kanonik NVT ortamında kullanıldı. Simülasyon süresini saptayan moleküler dinamik adımı 1 fs olarak seçildi. Simülasyon programında KNT nin boyunu belirleyen katman sayısı (nlayer) 20 olarak seçildi. O(N³) yöntemi, Schrödinger denklemini tüm sistemin Hamilton matrisinin köşegenleştirilmesiyle çözer, bu da atom sayısının (N) küpü ile orantılı simülasyon zamanı O(N³) gerektirmektedir. Order(N) metodu ise, tüm sistemi alt sistemlere böler. Her bir alt sistemin çözümleri bulunarak toplam sistemin çözümü elde edilir (divide and conquer-D&C). O(N) tekniği her atomun sadece yerel çevresinin bağ yapmaya etkisi olduğu prensibinden hareket eder. Buna göre alt sistemler seçilir. D&C yaklaşımı, tüm sistemi alt sistemlere bölerek her bir sistemi, kendi içerisinde çözer. Her alt sistemin bir buffer bölgesi ve buna göre oluşturulmuş hamilton matrisi vardır. Tüm sistemin hamilton matrisinin çözümü yerine oluşturulan küçük hamilton matrislerinin çözümü yapılır. Küçük hamilton matrisleri köşegenleştirilerek özdeğerler ve özvektörler elde edilir. Her bir alt sistem köşegenleştirildikten sonra elde edilen bilgiler esas sistemin kimyasal potansiyelini hesaplamada kullanılır. Hesaplanan kimyasal potansiyel bize fermi enerjisinin seviyesini verir. Buradan bant yapısı enerjisi bulunur. Her alt sistem çözümlerinin toplamıyla tüm sistemin çözümü bulunmuş olur. Alt sistemlerin büyüklüğünü “buffer skin size” parametresi belirler. O(N) sonuçlarının, O(N³) ile uygunluğunu sağlayabilmek için, çalışılan her tüp için O(N³)-O(N) enerji hata grafikleri oluşturulmuştur. Bu grafikler tüpün 1 MD simülasyon adımı için, O(N³) ortalama atom başına toplam enerji değeri ile O(N) atom başına toplam enerji değerleri arasındaki farkın (bu fark “hata” olarak tanımlanmıştır) farklı “buffer skin size” değerlerine göre çizilmesi ile oluşturulmuştur. Şekil 4.6 ve Şekil 4.7 bu çalışmalara örnek olarak verilmiştir.



Şekil 4.6 Zig-Zag KNT lerin 'Buffer Skin Size' parametresine bağlı olarak $O(N^3)$ - $O(N)$ Toplam Enerji Fark grafikleri



Şekil 4.7 Armchair KNT lerin ‘Buffer Skin Size’ Parametresine bağlı olarak $O(N^3)$ - $O(N)$ Toplam Enerji Fark grafikleri

Şekil 4.6 ve Şekil 4.7 de enerji farkını sıfır veya sıfıra yakın veren $4.6 A^0$, $4.8 A^0$, $4.8 A^0$, $6.0 A^0$ buffer skin size parametreleri belirlenmiştir. Buffer skin size değeri $O(N^3)$ ortalama atom başına toplam enerji değerleri ile $O(N)$ atom başına toplam enerjilerinin farkını minimum yapan değer baz alınarak bulunmuştur. Buffer skin size parametresinin büyük seçilmesi simülasyon zamanını attırır. Küçük seçilmesi ise hatalı sonuçlara neden olur. Bu nedenle enerji farkını minimum yapan değerler buffer skin size parametresi olarak belirlenmiştir. Çizelge 4.1 ve 4.2 de çalışılan bütün KNT ler için “buffer skin size” parametreleri tablo halinde verilmiştir.

Çizelge 4.1 Armchair KNT ler için Buffer Skin Size (A^0) Değerleri

$\vec{C}_h = (n, m)$	Buffer Skin Size(A^0)	$\vec{C}_h = (n, m)$	Buffer Skin Size(A^0)
(2,2)	4.3	(12,12)	4.9
(3,3)	3.8	(13,13)	4.8
(4,4)	4.9	(14,14)	4.8
(5,5)	4.4	(15,15)	5.2
(6,6)	4.6	(16,16)	5.1
(7,7)	4.6	(17,17)	5.0
(8,8)	4.6	(18,18)	6.0
(9,9)	4.6	(19,19)	4.8
(10,10)	4.8	(20,20)	6.0
(11,11)	4.9		

Çizelge 4.2 Zig-Zag KNT ler için Buffer Skin Size(A^0) Değerleri

$\vec{C}_h = (n, m)$	Buffer Skin Size(A^0)	$\vec{C}_h = (n, m)$	Buffer Skin Size(A^0)
(4,0)	5.0	(18,0)	4.6
(5,0)	5.0	(19,0)	5.8
(6,0)	4.6	(20,0)	5.7
(7,0)	4.9	(21,0)	4.8
(8,0)	4.4	(22,0)	4.7
(9,0)	4.6	(23,0)	5.8
(10,0)	4.3	(24,0)	4.8
(11,0)	4.5	(25,0)	5.8
(12,0)	4.5	(26,0)	4.7
(13,0)	4.6	(27,0)	4.7
(14,0)	4.5	(28,0)	4.8
(15,0)	4.8	(29,0)	5.8
(16,0)	4.6	(30,0)	4.8
(17,0)	4.6		

Buffer skin size parametresi belirlendikten sonra program, farklı yapıdaki KNT ler için belirli moleküler dinamik simülasyon adımlarında çalıştırıldı. Çalıştırılan her bir simülasyon adımı belirli bir zamana karşılık gelmektedir (Δt) (Ek 1). Yapılan çalışmaların neticesinde, farklı yapıdaki tüplerin, bant enerji aralığı (E_g), fermi enerji değerleri ve elektronik durum yoğunlukları (eDOS) moleküler dinamik (MD) adımına bağlı grafikleri elde edilmiştir. Bu grafikler kullanılarak, farklı yapıdaki KNT lerin elektronik durum yoğunlukları (eDOS) ile çaplarına (denklem 2.5) bağlı ilişkileri incelenmiş ve literatürdeki yapılan çalışmalarla olan durumları karşılaştırılmalı olarak değerlendirilmiştir.

O(N) sıkı bağ moleküler dinamik yöntemi paralel ortamda çalıştırılarak farklı simetrik yapılardaki tek duvarlı karbon nanotüpler için fermi enerji değerleri (E_F) iki farklı sıcaklık için (0,1 K ve 300 K) elde edildi (Çizelge 4.3 - 4.4 - 4.5 ve 4.6).

Çizelge 4.3 Armchair KNT lerin 0.1 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri

(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E_F (0,1 K)
(2,2)	80	1,404609	3,49862
(3,3)	120	2,065612	3,29100
(4,4) (4.9)	160	2,735498	3,83522
(4,4) (5.6)	160	2,735498	3,54030
(5,5)	200	3,408721	3,72534
(6,6)	240	4,083567	3,66642
(7,7)	280	4,759325	3,74300
(8,8)	320	5,435650	3,74000
(9,9)	360	6,112349	3,73510
(10,10)	400	6,789311	3,70652
(11,11)	440	7,466462	3,73308
(12,12)	480	8,143755	3,73484
(13,13)	520	8,821157	3,73400
(14,14)	560	9,498645	3,73272
(15,15)	600	10,176201	3,73100

Çizelge 4.4 Zig-Zag KNT lerin 0.1 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri

(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E_F (0,1 K)
(4,0)	80	1,606753	3,10686
(5,0)	100	1,989787	3,33714
(6,0)	120	2,375706	3,36242
(7,0)	140	2,763236	3,73614
(9,0)	180	3,540941	3,71132
(10,0)	200	3,930579	3,70672
(11,0)	220	4,320547	3,71808
(12,0)	240	4,710763	3,71222
(13,0)	260	5,101169	3,71636
(14,0)	280	5,491724	3,72174
(17,0) (4.6) *	340	6,664018	3,72246
(17,0) (5,8) *	340	6,664018	3,72700
(22,0)	440	8,619078	3,72412
(24,0)	480	9,401355	3,72760
(26,0)	520	10,183725	3,72512
(28,0)	560	10,966169	3,72870
(30,0)	600	11,748673	3,72718

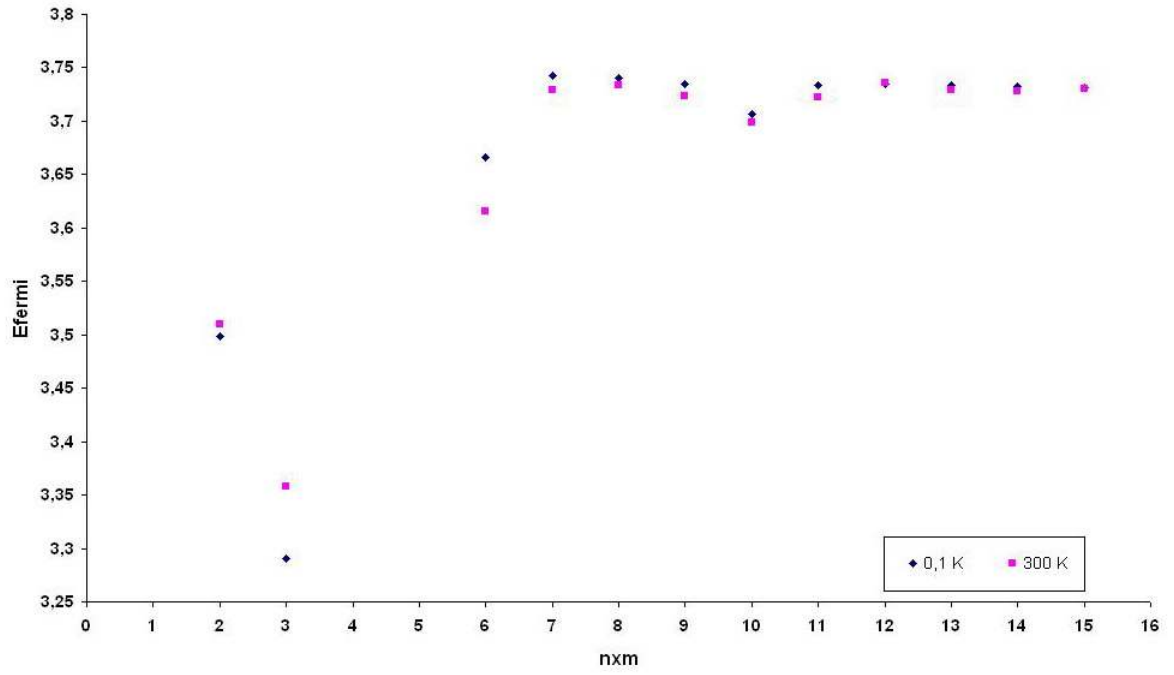
* (17,0) KNT için iki farklı “buffer skin size” parametresi için hesaplama yapılmıştır.

Çizelge 4.5 Armchair KNT lerin 300 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri

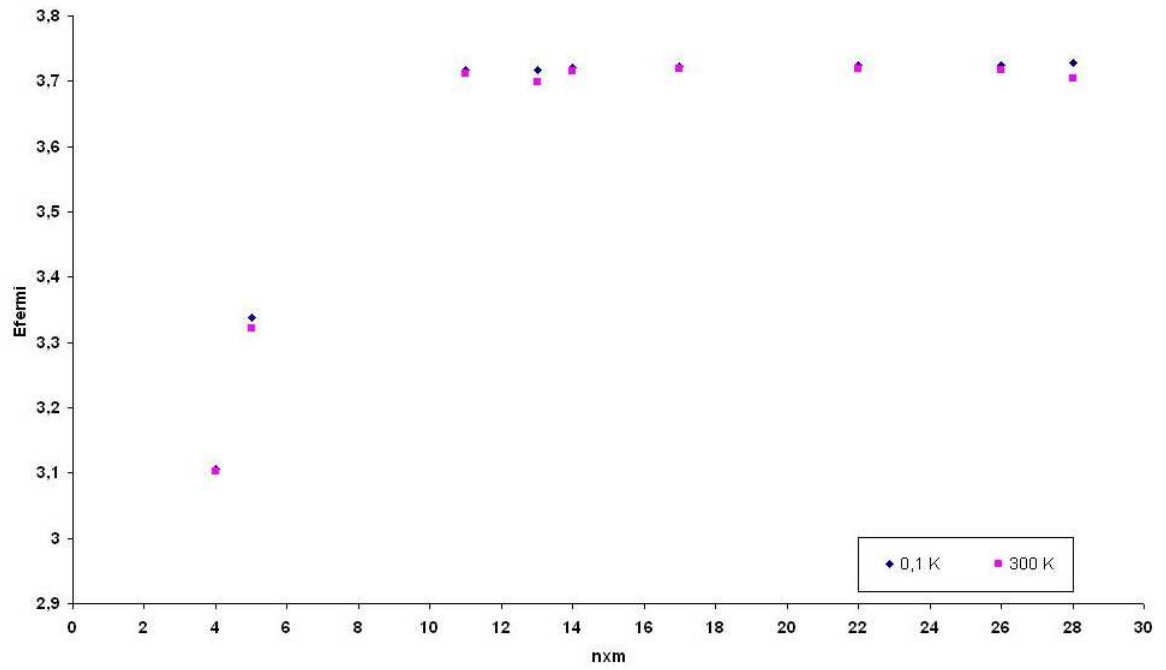
(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E_F (300 K)
(2,2)	80	1,404609	3,51000
(3,3)	120	2,065612	3,35800
(6,6)	240	4,083567	3,61599
(7,7)	280	4,759325	3,72900
(8,8)	320	5,435650	3,73399
(9,9)	360	6,112349	3,72300
(10,10)	400	6,789311	3,69899
(11,11)	440	7,466462	3,72199
(12,12)	480	8,143755	3,73600
(13,13)	520	8,821157	3,72900
(14,14)	560	9,498645	3,72799
(15,15)	600	10,176201	3,73000
(16,16)	640	10,853813	3,72600
(17,17)	680	11,531471	3,72900
(19,19)	760	12,886895	3,72600

Çizelge 4.6 Zig-Zag KNT lerin 300 K Sıcaklıktaki Fermi Enerji (E_F) Değerleri

(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E_F (300 K)
(4,0)	80	1,606753	3,10200
(5,0)	100	1,989787	3,32100
(6,0)	120	2,375706	3,54200
(9,0)	180	3,540941	3,68799
(11,0)	220	4,320547	3,71099
(12,0)	240	4,710763	3,72300
(13,0)	260	5,101169	3,69799
(14,0)	280	5,491724	3,71499
(15,0)	300	5,882398	3,71399
(16,0)	320	6,273168	3,70799
(17,0)	340	6,664018	3,71900
(18,0)	360	7,054934	3,72099
(19,0)	380	7,445905	3,72199
(21,0)	420	8,227984	3,71600
(22,0)	440	8,619078	3,71900
(23,0)	460	9,010203	3,72300
(24,0)	480	9,401355	3,70799
(25,0)	500	9,792529	3,72499
(26,0)	520	10,183725	3,71700
(27,0)	540	10,574939	3,71799
(28,0)	560	10,966169	3,70499
(29,0)	580	11,357414	3,72300
(30,0)	600	11,748673	3,72000



Şekil 4.8 Armchair KNT 'lerin Sıcaklığa Bağlı Fermi Enerji Değişimi



Şekil 4.9 Zig-Zag KNT 'lerin Sıcaklığa Bağlı Fermi Enerji Değişimi

Farklı simetrik yapılarıdaki karbon nanotüpler için fermi enerji değerleri 0.1 K ve 300 K sıcaklık değerleri için hesaplanmıştır. Bu değerler fermi enerjisi civarında karbon nanotüplerin davranışını (metalik, metalik yarıiletken veya yarıiletken) belirlememizi sağladı. Fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu (eDOS) grafiklerine bakılarak farklı simetrik yapıdaki karbon nanotüplerin metalik veya yarıiletken bir davranış gösterdiği belirlendi. Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde fermi enerjisi civarında elektronik durum yoğunluğu gözleniyorsa karbon nanotüplerde metalik davranış, göstermiyorsa yarıiletken davranış beklenir.

Simülasyonlarda, elektronik durum yoğunlukları aşağıdaki formüller kullanılarak hesaplanmaktadır;

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

N sistemdeki elektron sayısı olmak üzere:

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

Elektronik durum yoğunluğu grafiklerinde eğimlerdeki değişiklikler bize orada bir durum yoğunluğu olduğu bilgisini verir. Çizelge 4.7 ve 4.8 de zig-zag KNT ler için 2 farklı sıcaklıkta (0.1 K ve 300 K de) enerji bant aralığı değerleri verilmiştir.

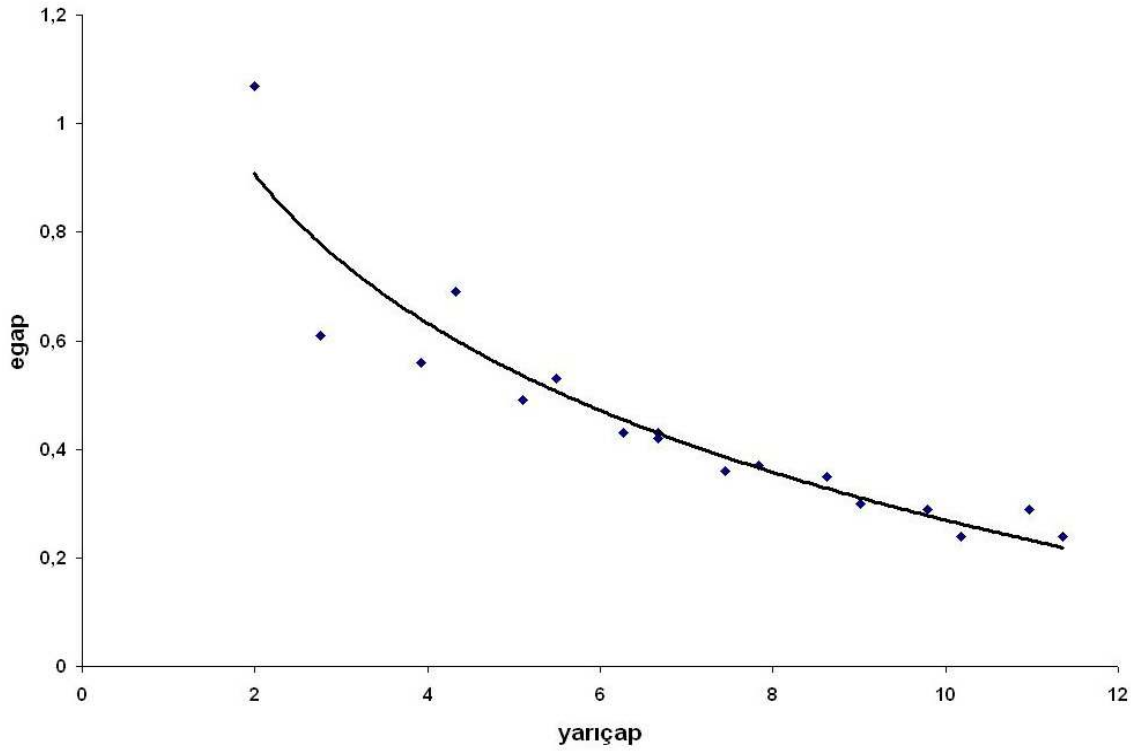
Şekil 4.10 ve 4.11 de bu değerler yarıçapa karşı çizilmiştir. Yarıçap arttıkça enerji bant aralığı düşmektedir KNT lerin yarıçapı büyüdükçe enerji bant aralığı grafin tabakanın enerji bant aralığı değerine yaklaşmaktadır.

Çizelge 4.7 Zig-Zag KNT ler için 0.1 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

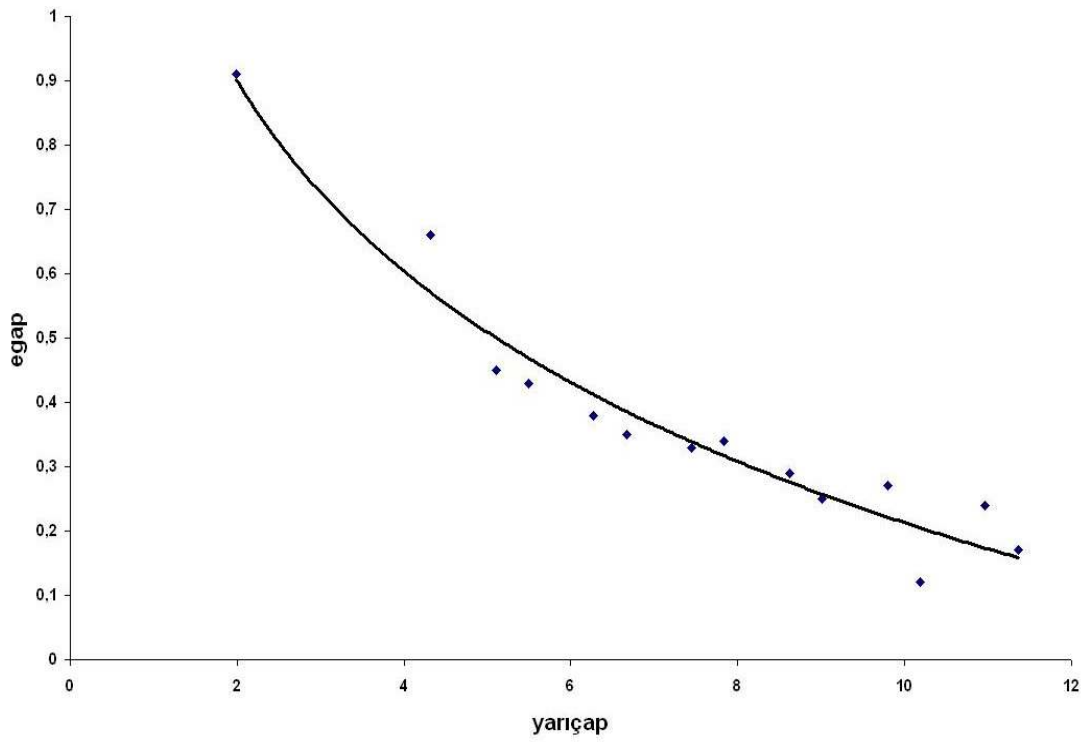
(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E _{gap} (eV) (0.1 K)
(4,0)	80	1,606753	
(5,0)	100	1,989787	1,07
(6,0)	120	2,375706	0,35
(7,0)	140	2,763236	0,61
(9,0)	180	3,540941	0,11
(10,0)	200	3,930579	0,59
(11,0)	220	4,320547	0,69
(12,0)	240	4,710763	0,08
(13,0)	260	5,101169	0,49
(14,0)	280	5,491724	0,53
(15,0)	300	5,882398	0,06584
(16,0)	320	6,273168	0,43
(17,0)	340	6,664018	0,42
(18,0)	360	7,054934	0,0474
(19,0)	380	7,445905	0,36
(20,0)	400	7,836924	0,37
(21,0)	420	8,227984	0,24
(22,0)	440	8,619078	0,35
(23,0)	460	9,010203	0,3
(24,0)	480	9,401355	0,035
(25,0)	500	9,792529	0,29
(26,0)	520	10,183725	0,24
(27,0)	540	10,574939	0,035
(28,0)	560	10,966169	0,29
(29,0)	580	11,357414	0,24
(30,0)	600	11,748673	0,01082

Çizelge 4.8 Zig-Zag KNT ler için 300 K Sıcaklıktaki Bant Aralığı (E_g) Değerleri

(n,m)	Atom Sayısı	KNT nin yarıçapı (simülasyon)	E _{gap} (eV) (300 K)
(4,0)	80	1,606753	
(5,0)	100	1,989787	0,91
(6,0)	120	2,375706	0,29
(7,0)	140	2,763236	
(9,0)	180	3,540941	0,13
(10,0)	200	3,930579	0,58
(11,0)	220	4,320547	0,66
(12,0)	240	4,710763	0,07
(13,0)	260	5,101169	0,45
(14,0)	280	5,491724	0,43
(15,0)	300	5,882398	0,04
(16,0)	320	6,273168	0,38
(17,0)	340	6,664018	0,35
(18,0)	360	7,054934	0,03
(19,0)	380	7,445905	0,33
(20,0)	400	7,836924	0,34
(21,0)	420	8,227984	0,23
(22,0)	440	8,619078	0,29
(23,0)	460	9,010203	0,25
(24,0)	480	9,401355	0,02422
(25,0)	500	9,792529	0,27
(26,0)	520	10,183725	0,12
(27,0)	540	10,574939	0,00446
(28,0)	560	10,966169	0,24
(29,0)	580	11,357414	0,17
(30,0)	600	11,748673	0,0323



Şekil 4.10 Zig-Zag KNT lerin 0,1 K de yarıçapına bağlı olarak Egap değişimi



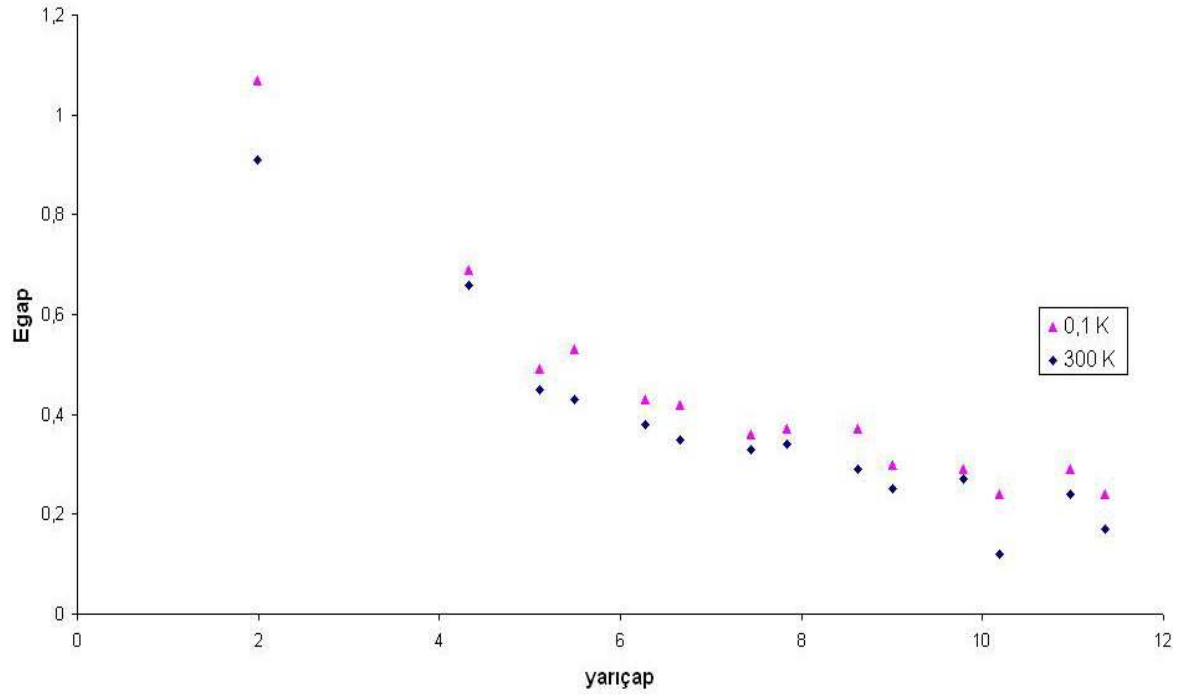
Şekil 4.11 Zig-Zag KNT lerin 300 K de yarıçapına bağlı olarak Egap değişimi

Yarıiletken zig-zag KNT : ($m = 0$) durumunda ($n - m \neq 3i$) ise $\vec{C}_h = (n, 0)$ vektörü yarıiletken zig-zag KNT (i : tamsayı olmak üzere)

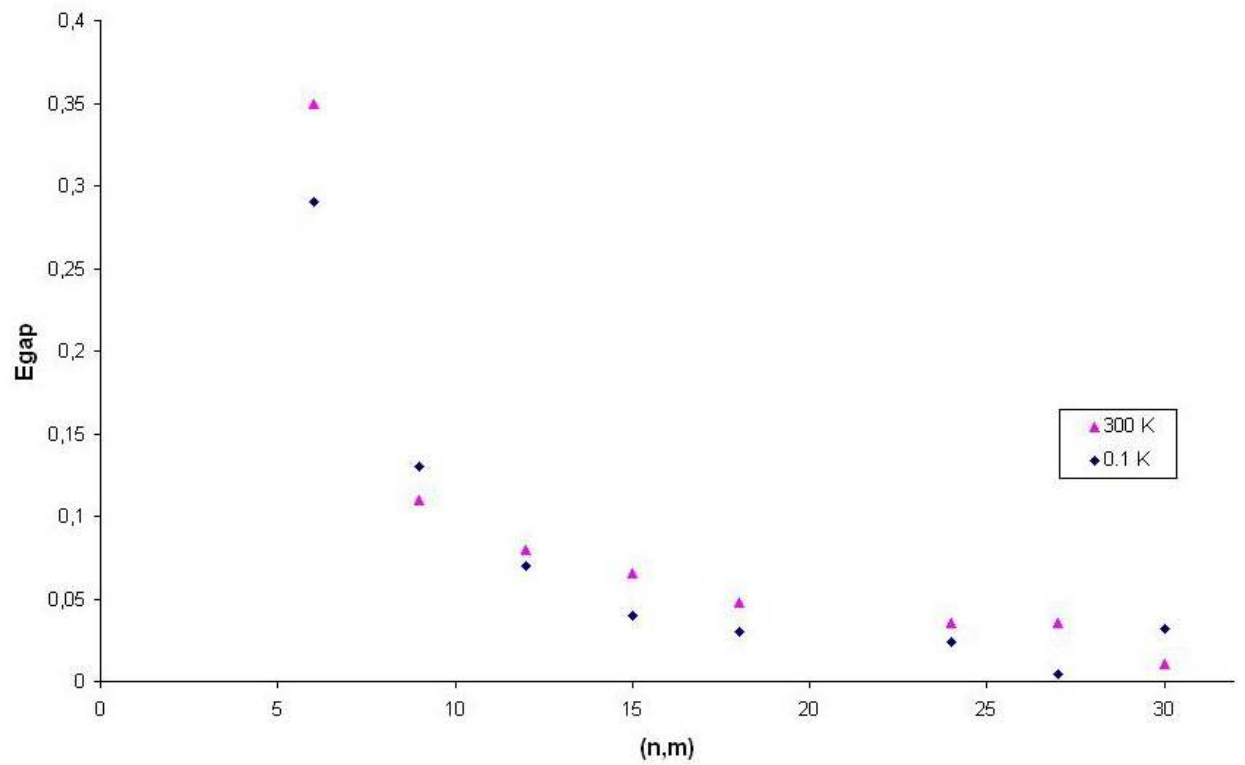
Şekil 4.12 de yarıiletken zig-zag KNT lerin iki farklı sıcaklıkta enerji bant aralıkları yarıçapa göre çizildi. Her iki sıcaklık değeri içinde enerji bant aralığı değerleri yarıçapa göre $\frac{1}{r^2}$ şeklinde azalmaktadır. Sıcaklık arttıkça enerji bant aralığı değerlerinde azalma gözlemlendi.

($m = 0$) durumunda ($n - m = 3i$) ise; bu KNT ler metal zig-zag KNT olarak tanımlanır. (i : tamsayı olmak üzere)

Şekil 4.13 te metal zig-zag KNT ler için iki farklı sıcaklıkta enerji bant aralığı değerleri KNT birim hücreindeki hegzağın sayısına göre çizildi. Bu grafikte de metal zig-zag KNT ler içinde enerji bant aralığı değerlerinin hegzağın sayısı arttıkça daha hızlı bir şekilde sıfıra gittiği gözlemlendi. Bu sonuç literatürde bu KNT ler için metalik yarıiletken KNT ler teriminin kullanılmasını desteklemektedir. Sıcaklık etkisinin enerji bant aralığı değerlerinde azalmaya neden olduğu gözlemlendi.



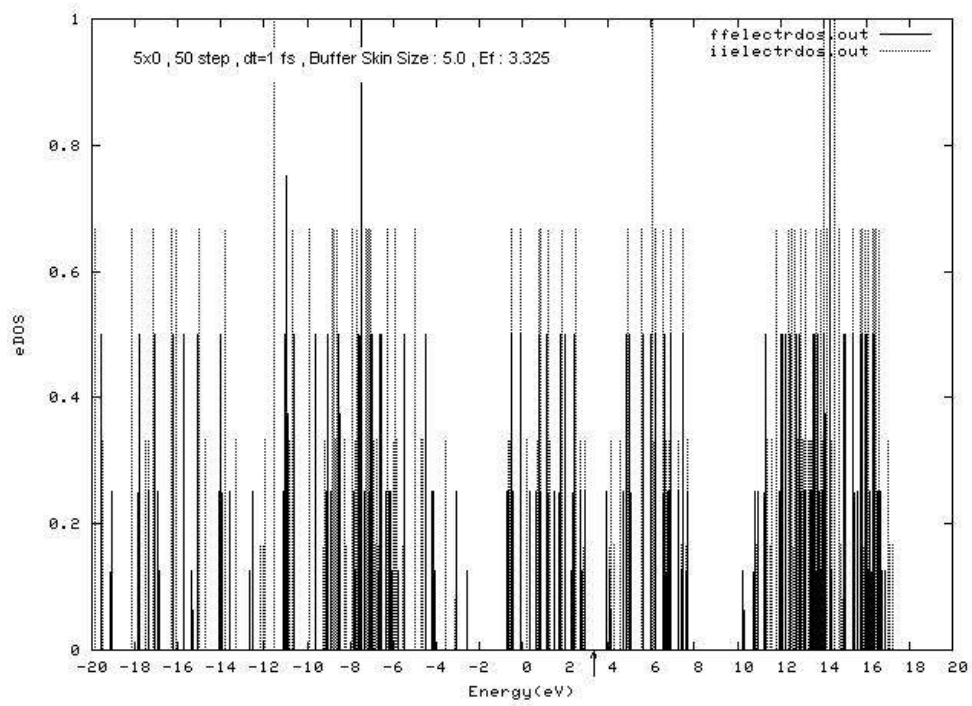
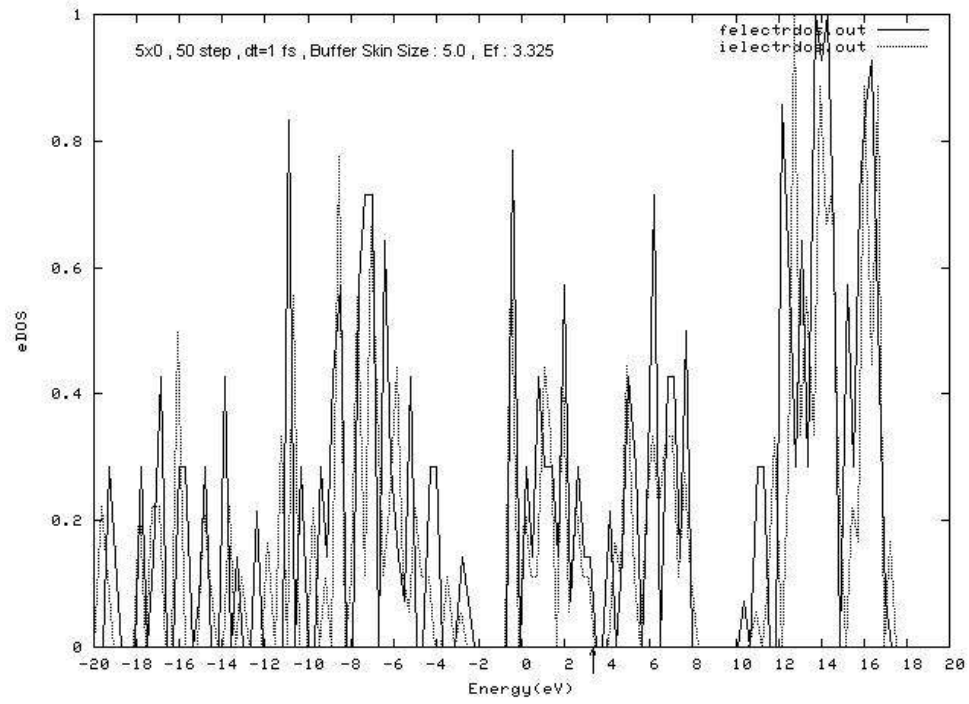
Şekil 4.12 Yarıiletken Zig-Zag KNT lerin enerji bant aralıklarına sıcaklık etkisi



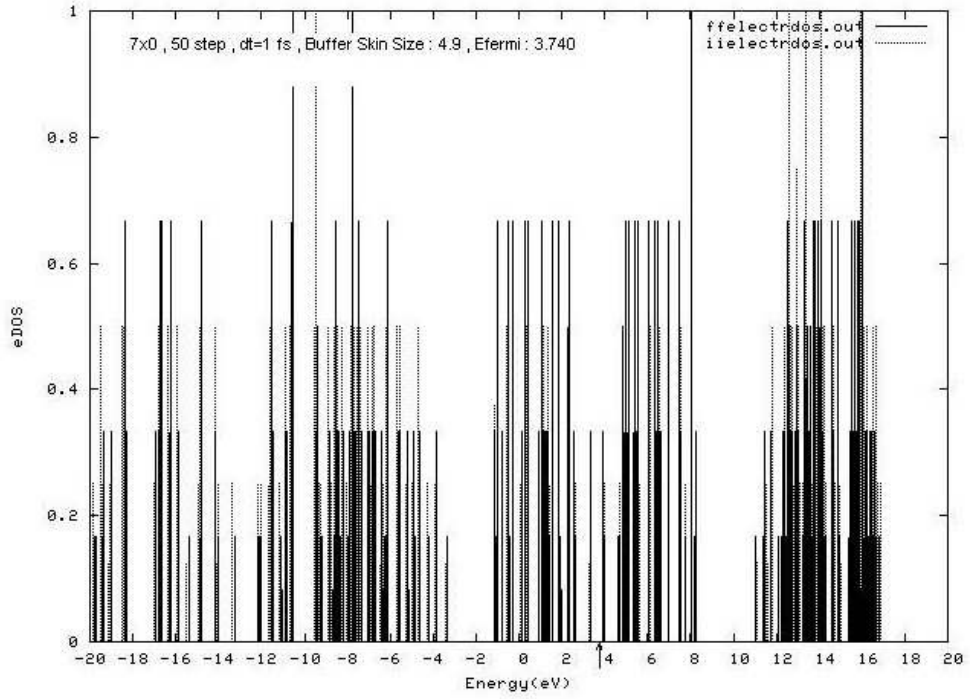
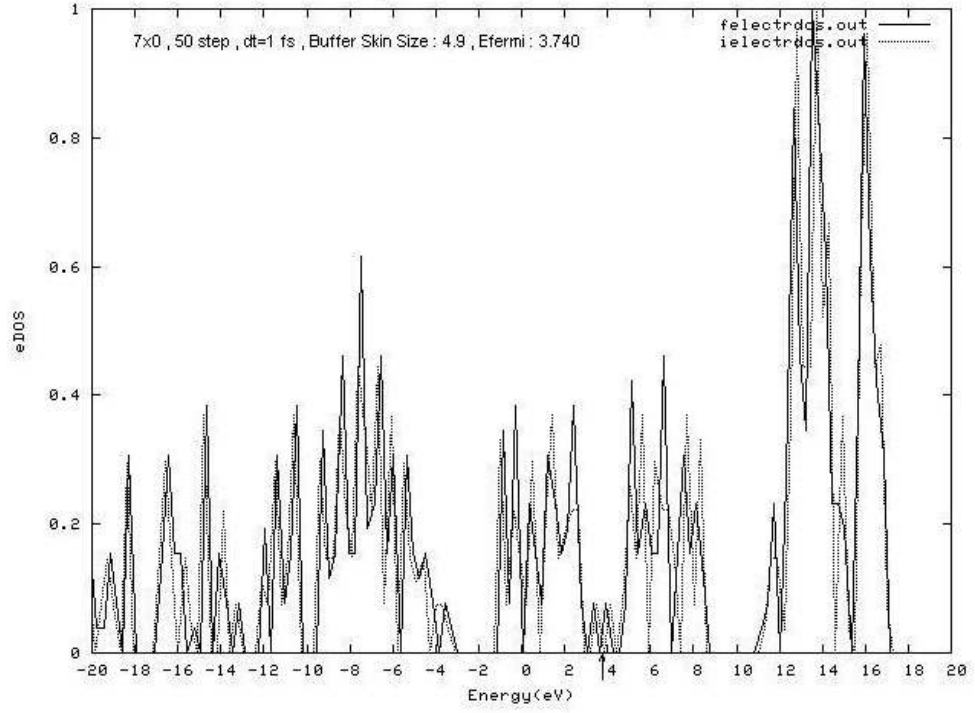
Şekil 4.13 Metalik Zig-Zag KNT lerin enerji bant aralıklarına sıcaklık etkisi

Şekil 4.14 ten 4.21 e kadar 0.1 K de elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri verilmiştir. Kesik çizgilerle verilen durum yoğunluğu grafikleri her bir enerji değerindeki yerel durum yoğunluklarını göstermektedir. Simülasyon öncesi ve simülasyon sonrası sistem belli bir dengeye (equilibration) ulaştıktan sonraki durumlar grafik üzerinde belirtilmiştir. Ayrıca fermi seviyeleri grafikler üzerinde okla işaretlenmiştir. Bu grafikler 0.1 K de elde edilmiştir.

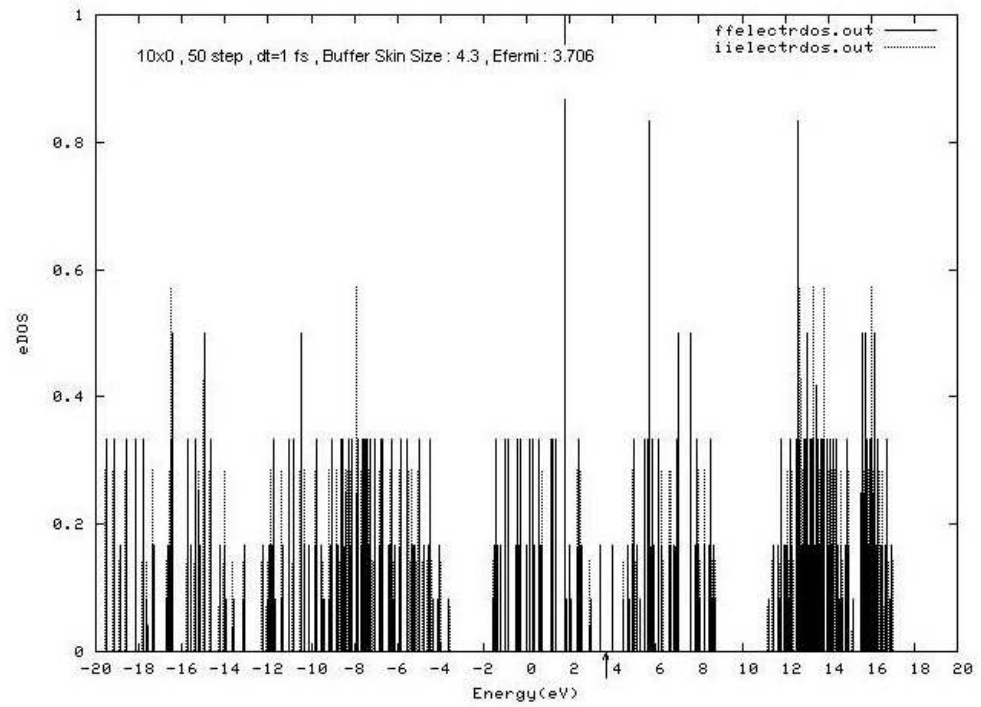
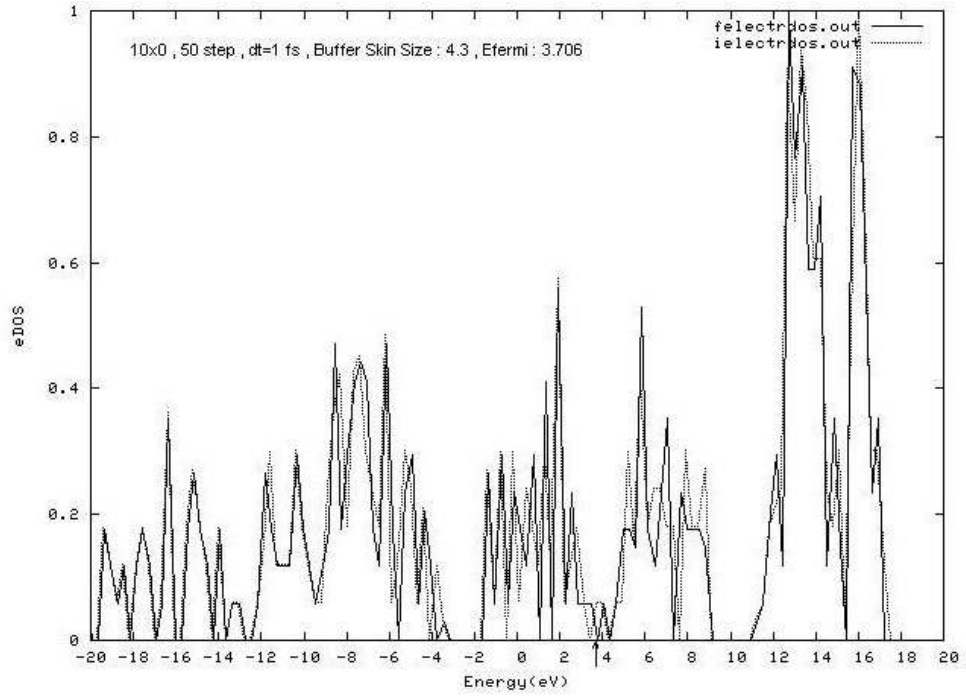
Bu grafikler bize fermi enerjisi civarında yerleşmiş durumların olup olmadığına dair bilgi vermektedir. Bu da KNT lerin metal, yarıiletken veya metalik yarıiletken özellik göstermeleri ile ilgili bilgiler vermektedir.



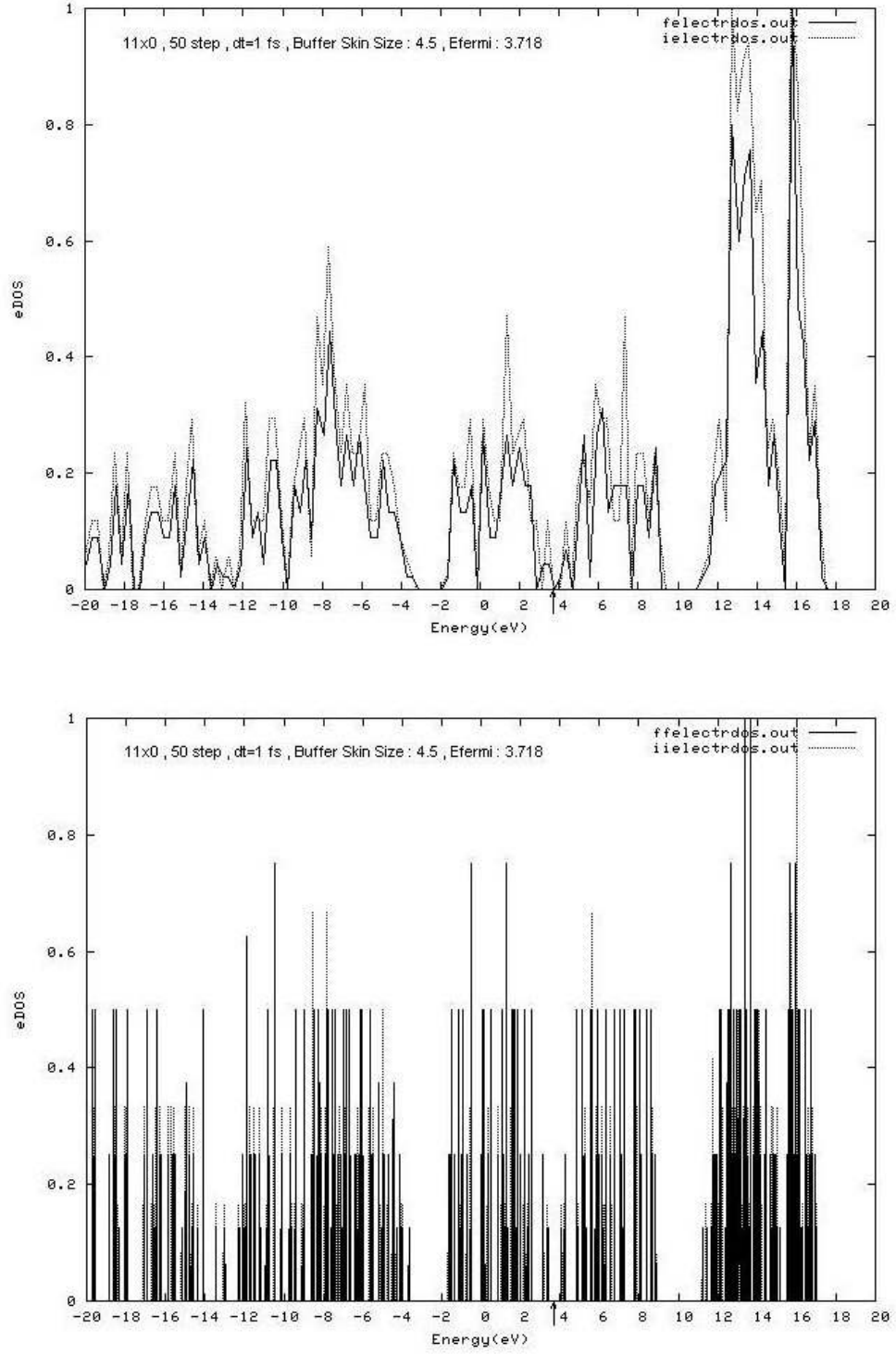
Şekil 4.14 5x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



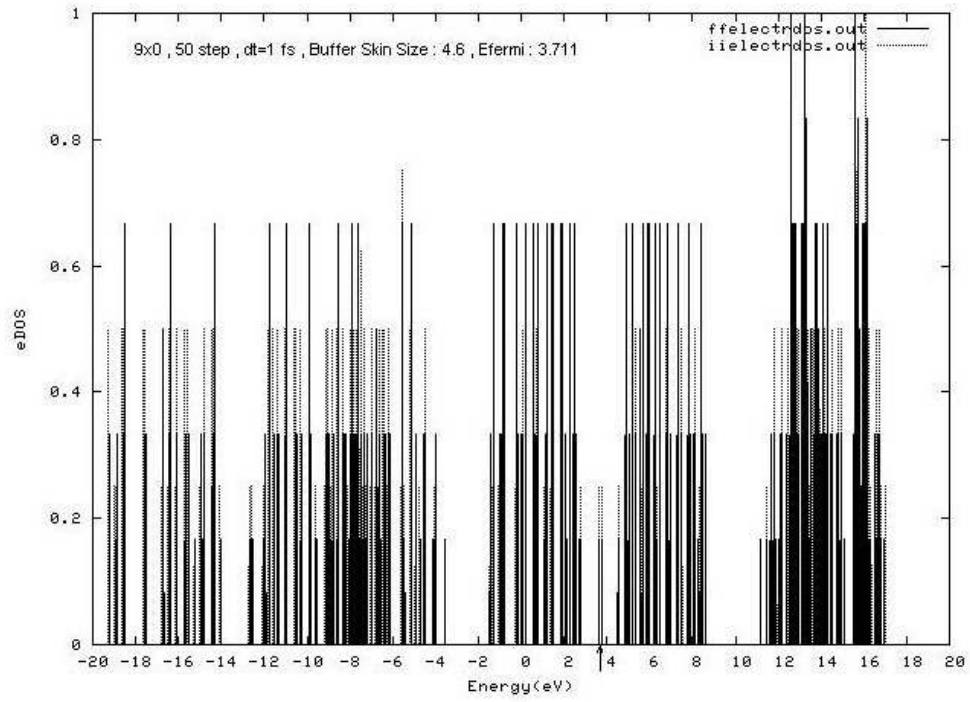
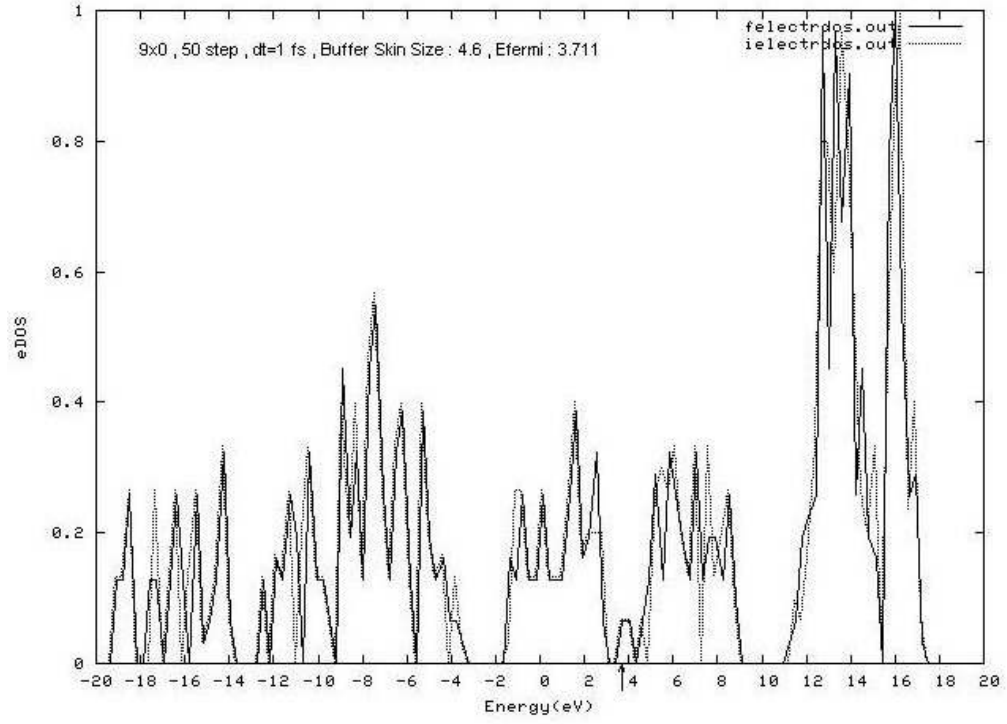
Şekil 4.15 7x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.9 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



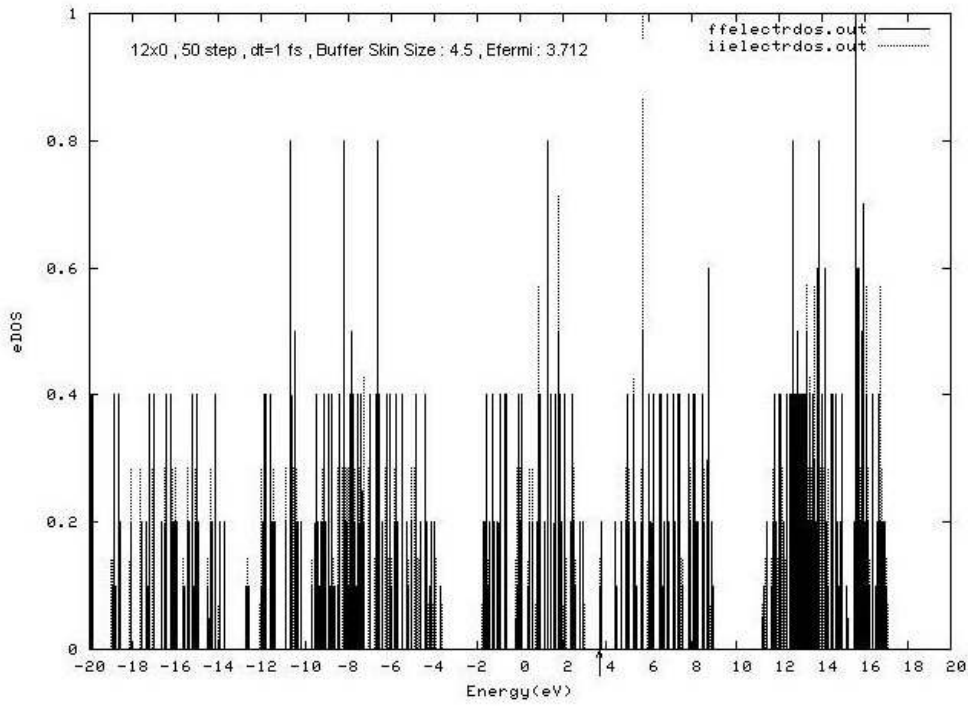
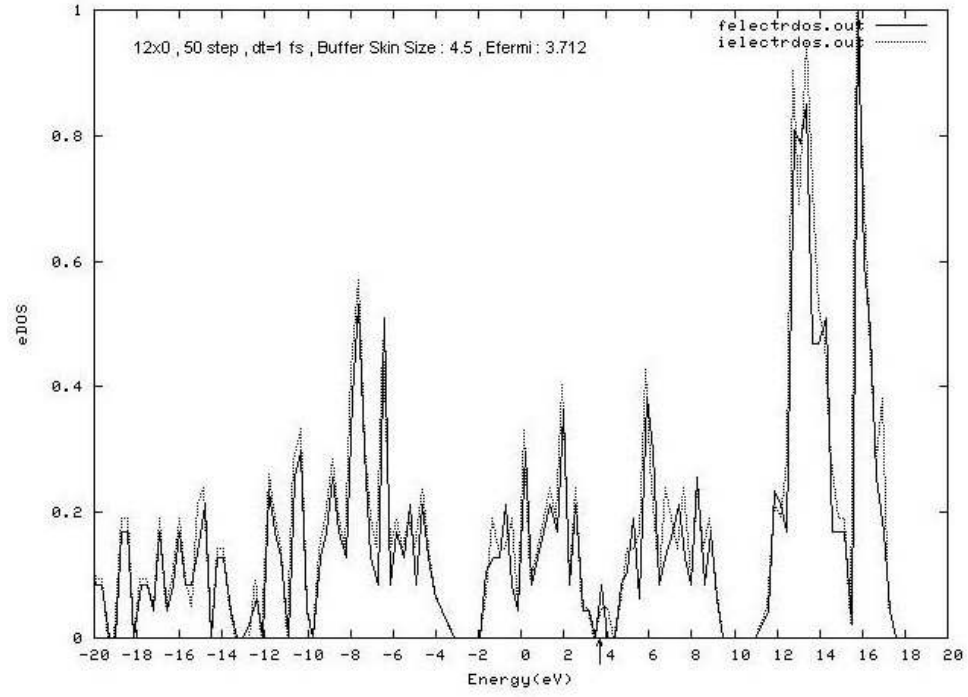
Şekil 4.16 10x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.3 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



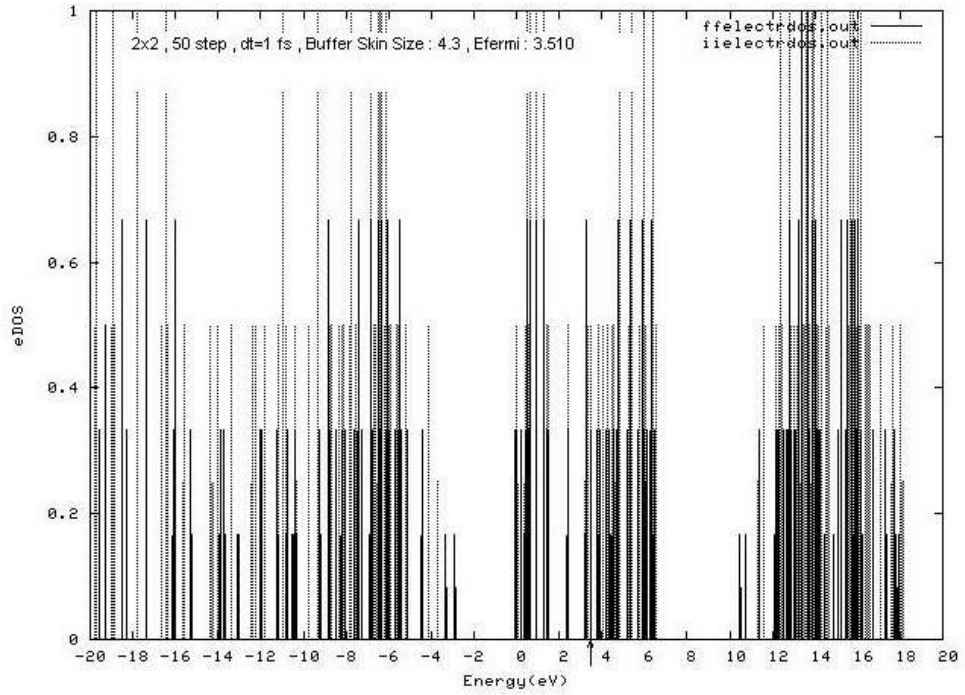
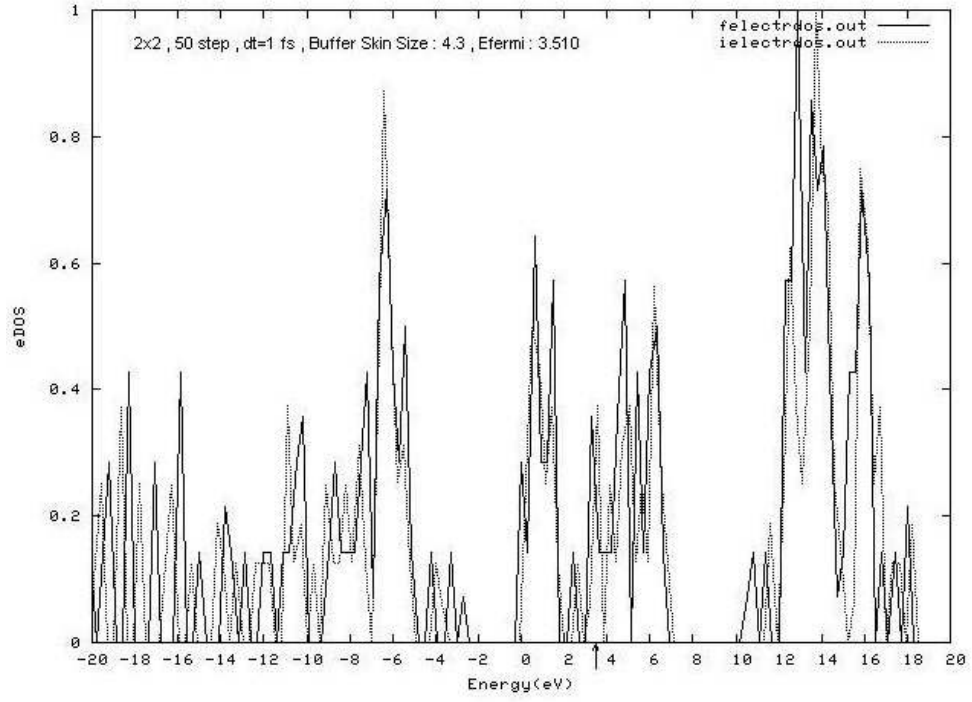
Şekil 4.17 11x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



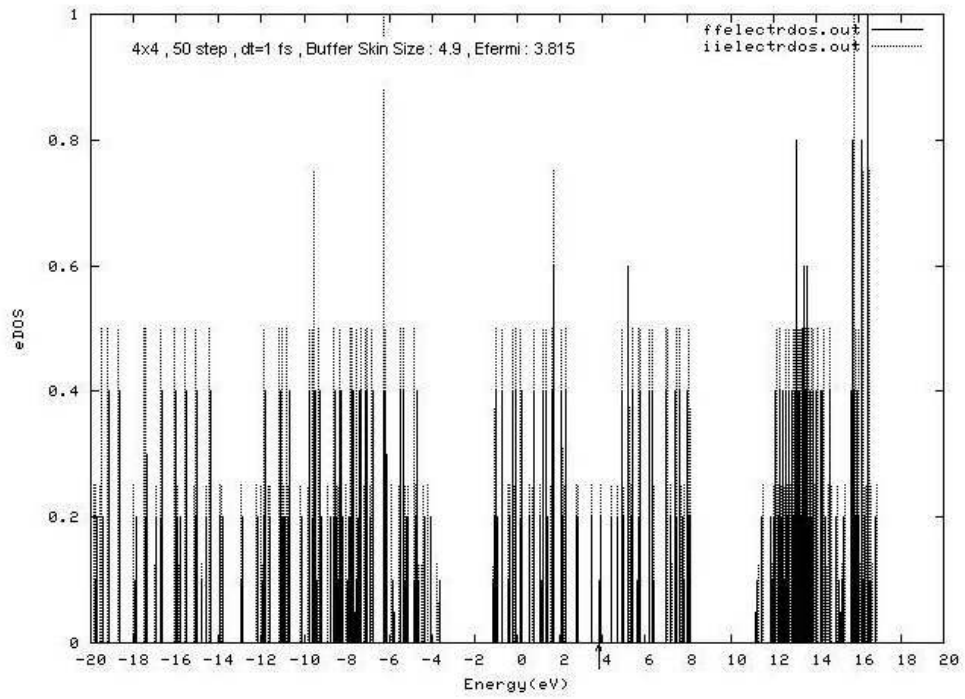
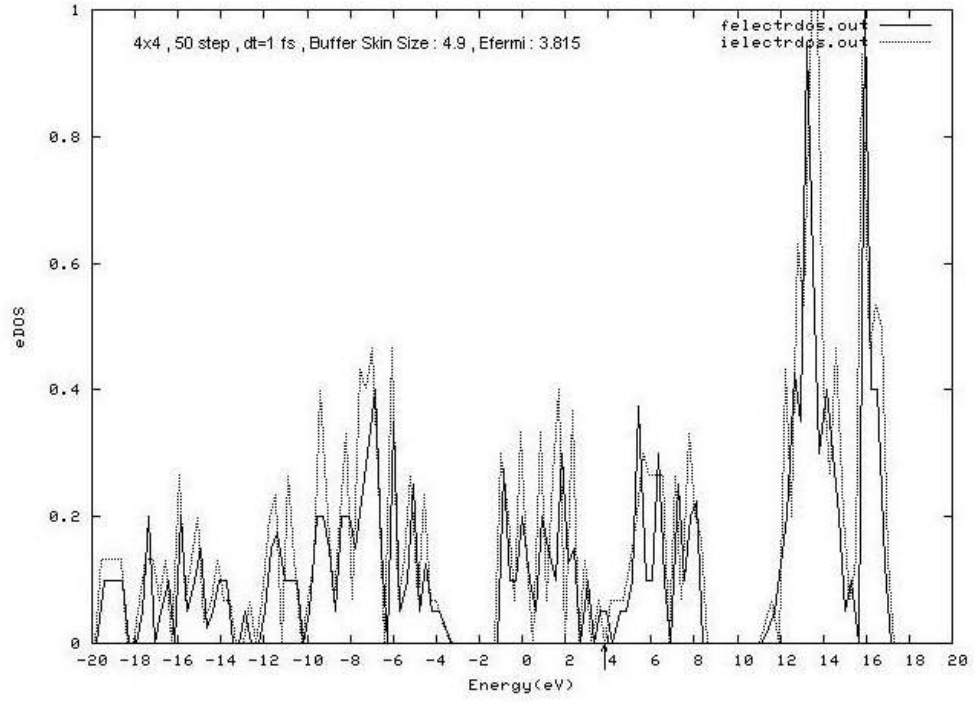
Şekil 4.18 9x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 4.19 12x0 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri

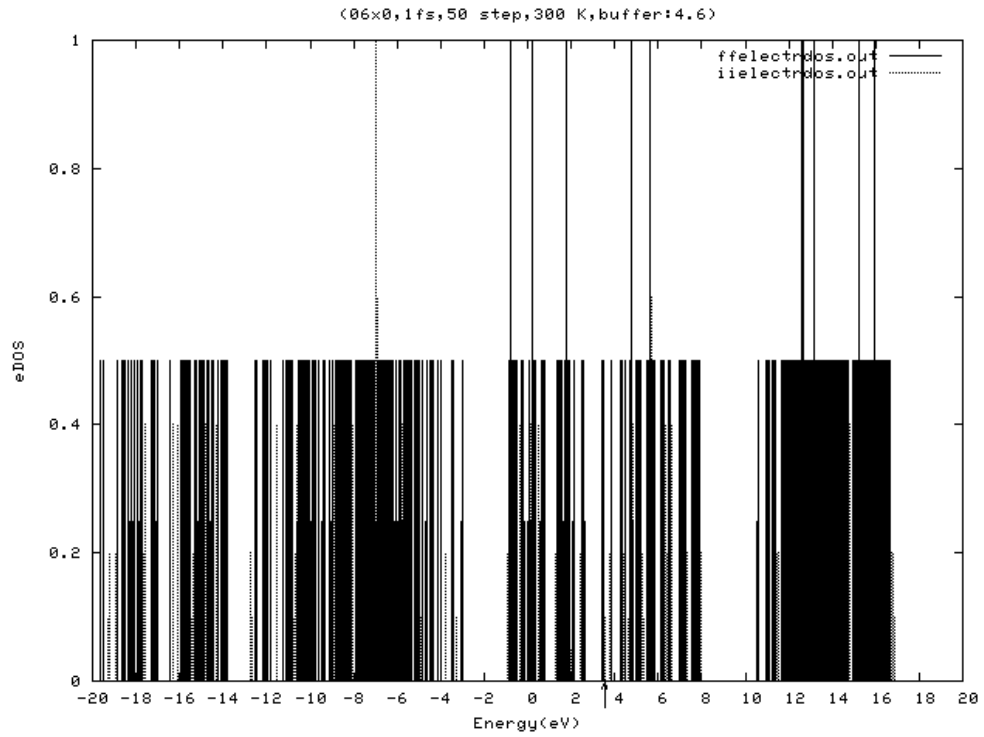
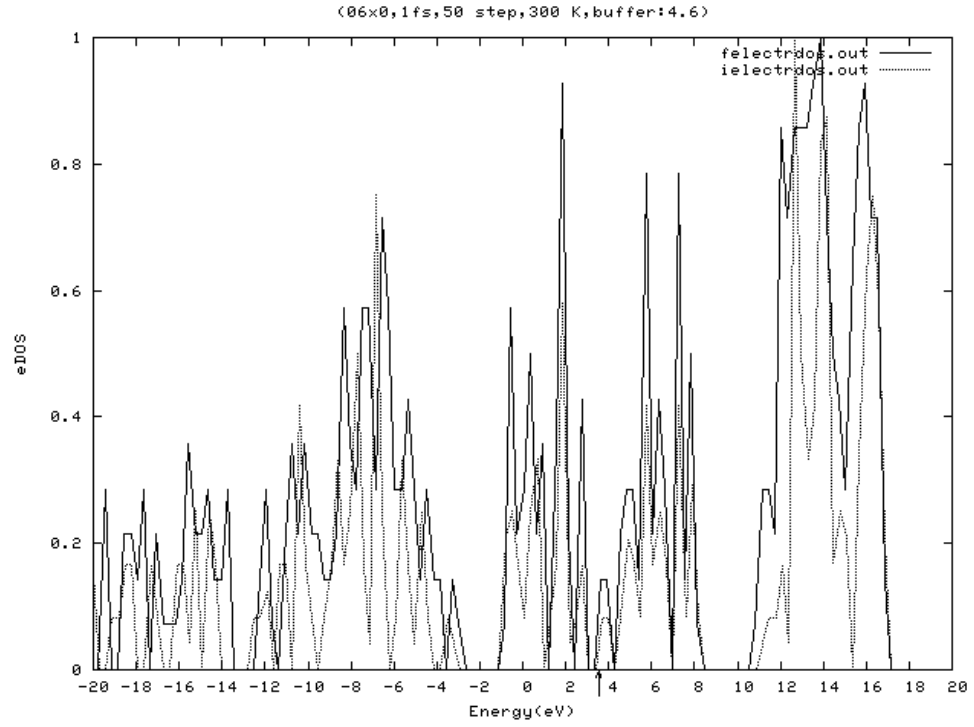


Şekil 4.20 2x2 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.3 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri

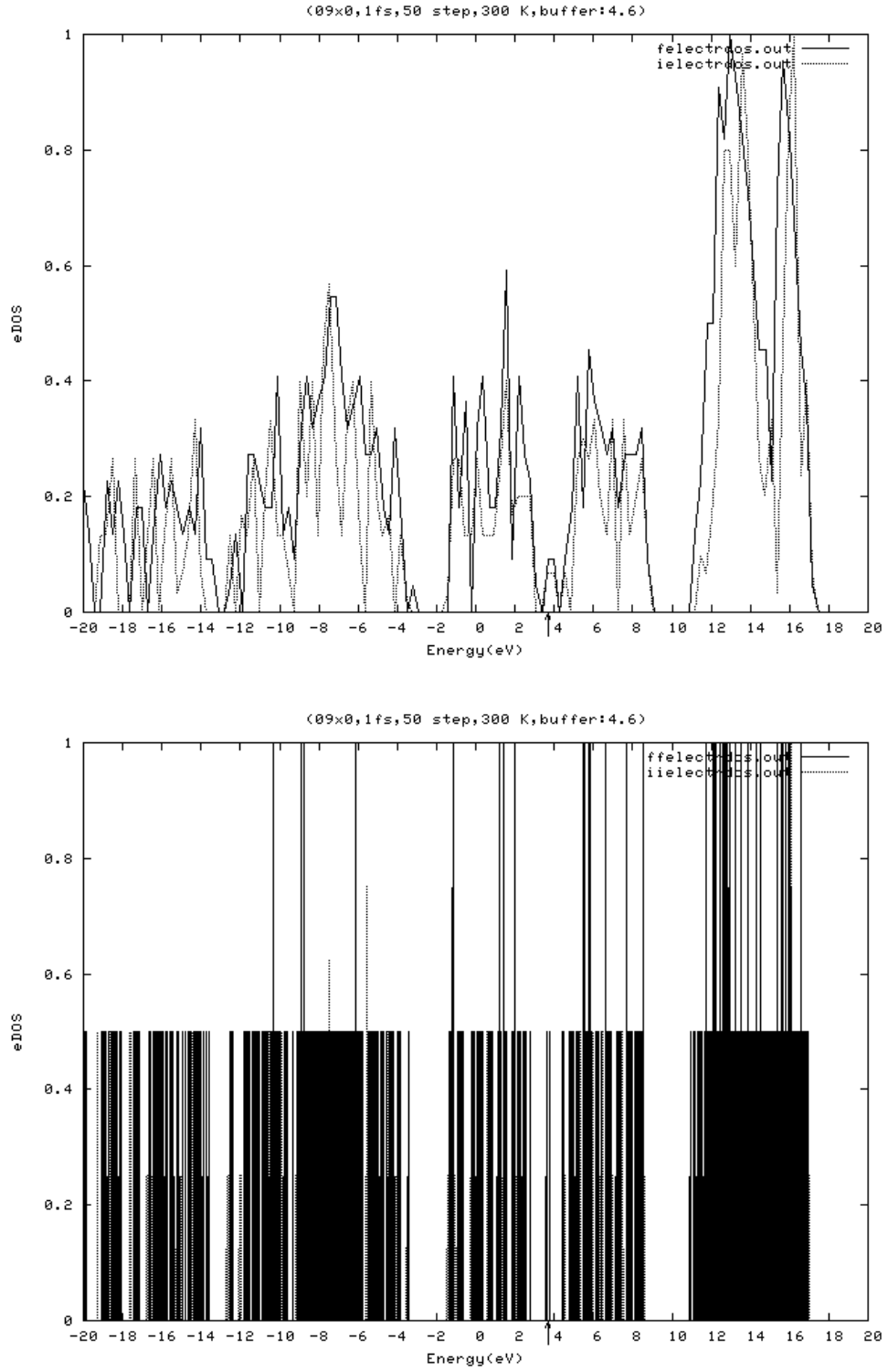


Şekil 4.21 4x4 KNT için , 0.1 K , Buffer Skin Size 4.9 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri

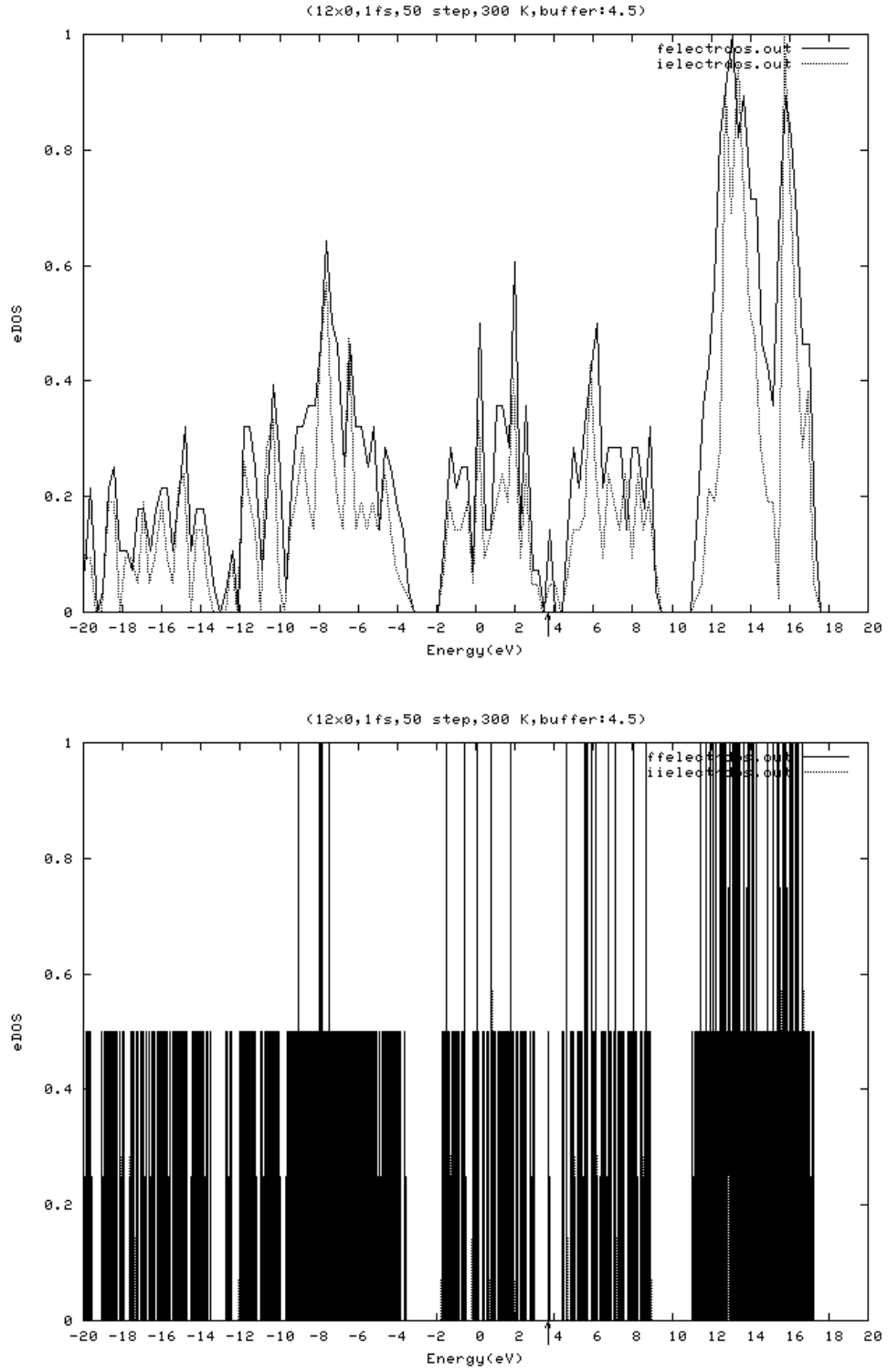
Şekil 4.22 den 4.28 e kadar 300 K de elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafikleri örnek olarak verilmiştir. Kesik çizgilerle verilen durum yoğunluğu grafikleri her bir enerji değerindeki yerel durum yoğunluklarını göstermektedir. Simülasyon öncesi ve simülasyon sonrası sistem belli bir dengeye (equilibration) ulaştıktan sonraki durumlar grafik üzerinde belirtilmiştir. Ayrıca fermi seviyeleri grafikler üzerinde okla işaretlenmiştir. Bu grafiklerden elde edilen enerji bant aralıkları Çizelge 4.7 ve 4.8 de tablo halinde verilmiştir.



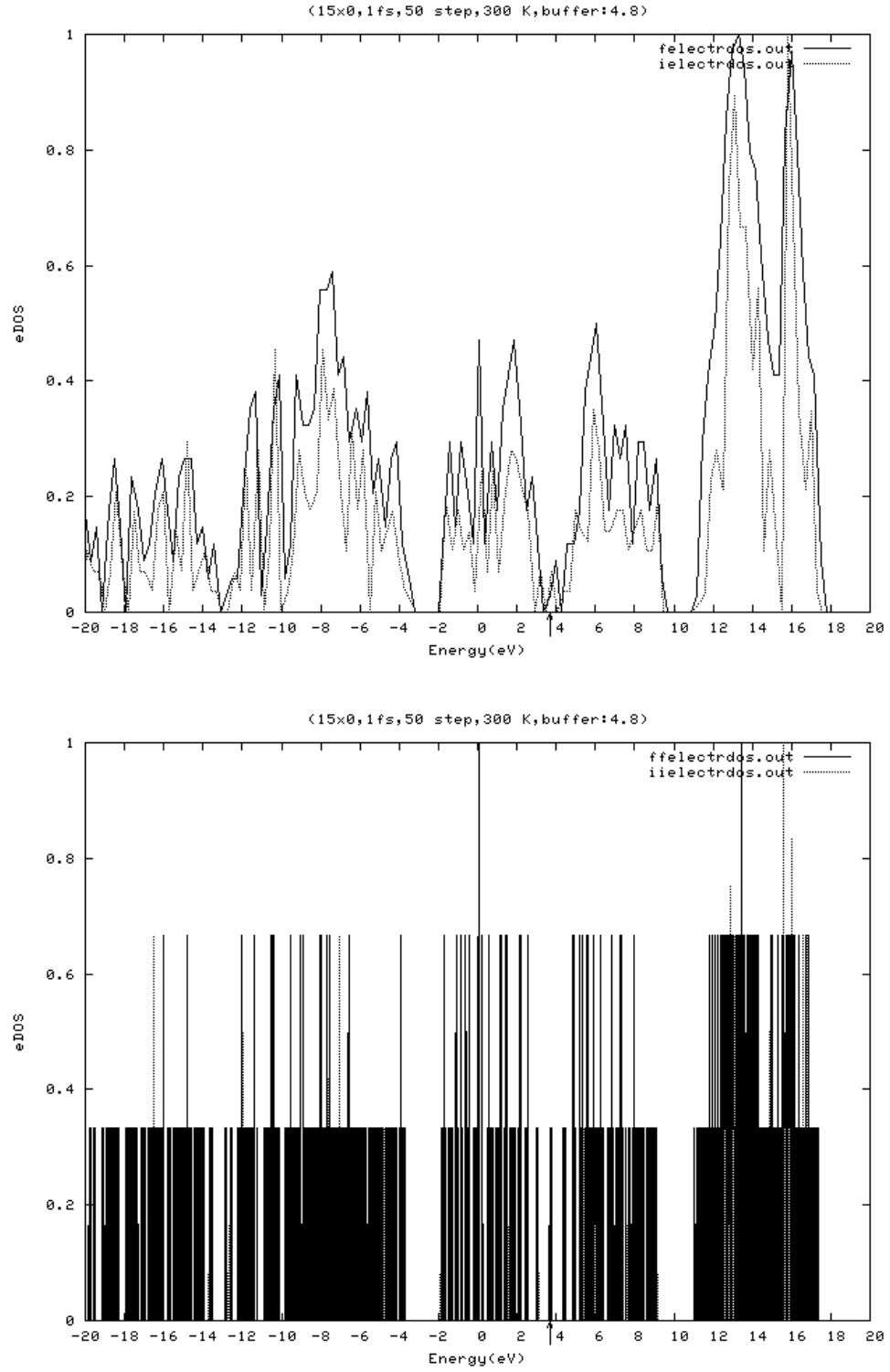
Şekil 4.22 6x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



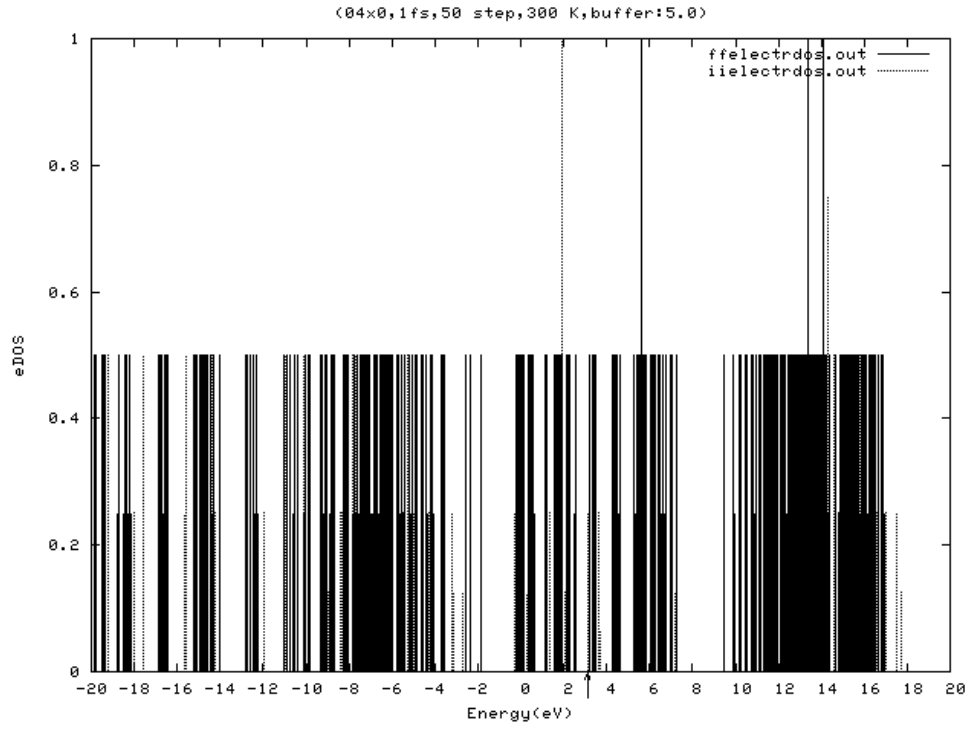
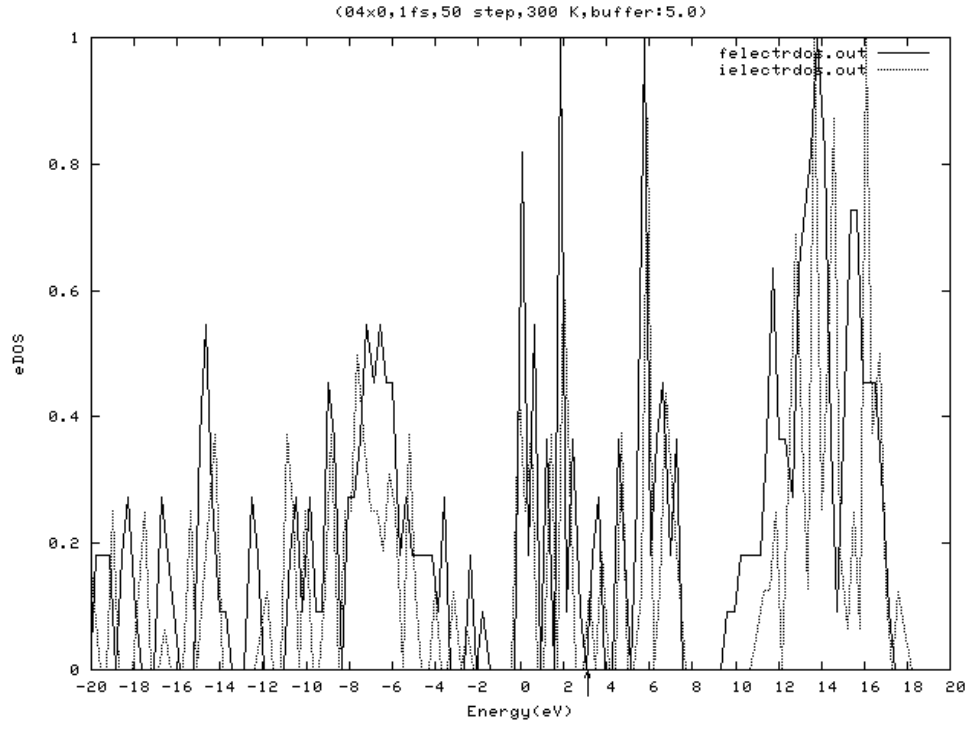
Şekil 4.23 9x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.6 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



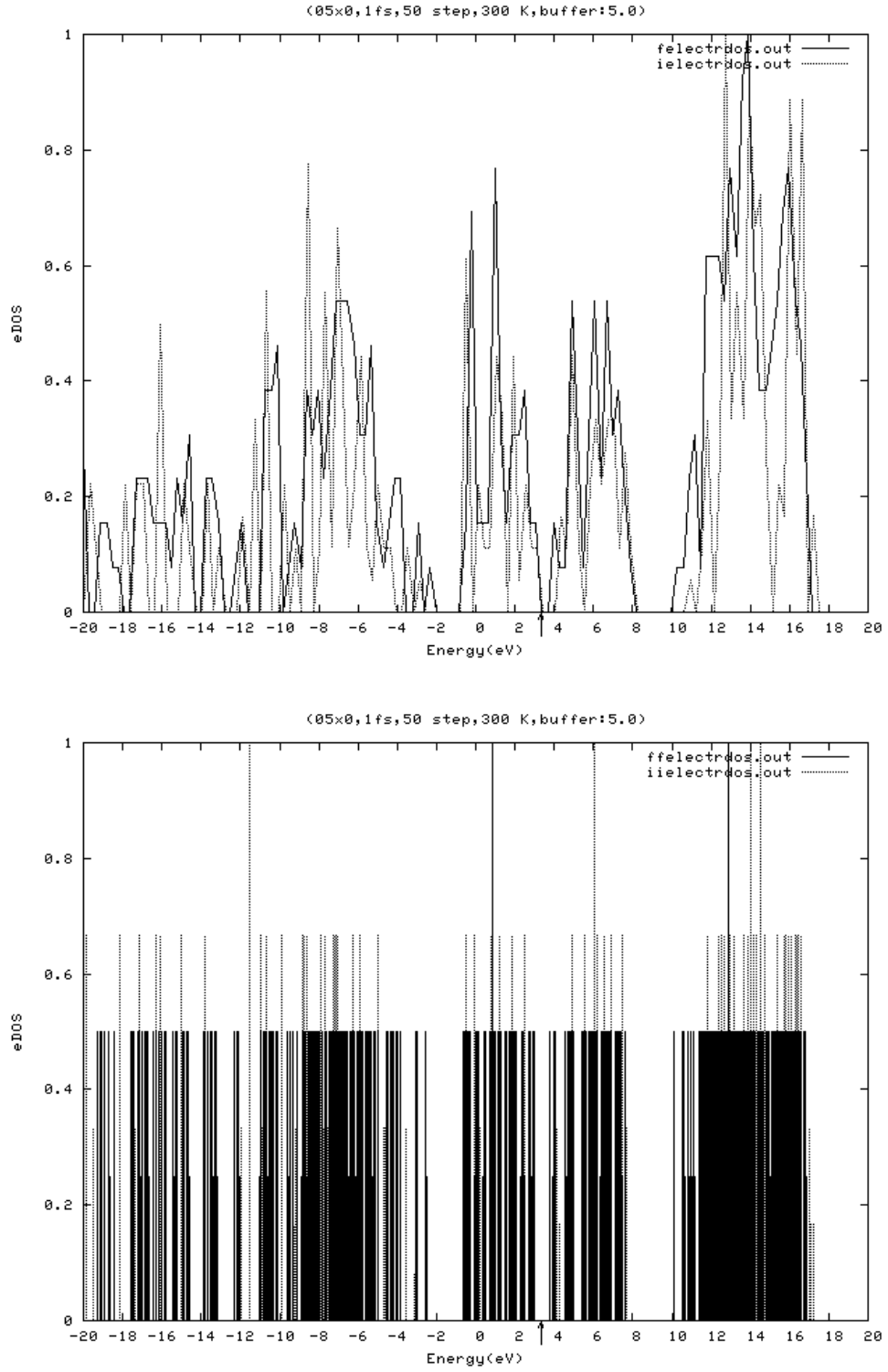
Şekil 4.24 12x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



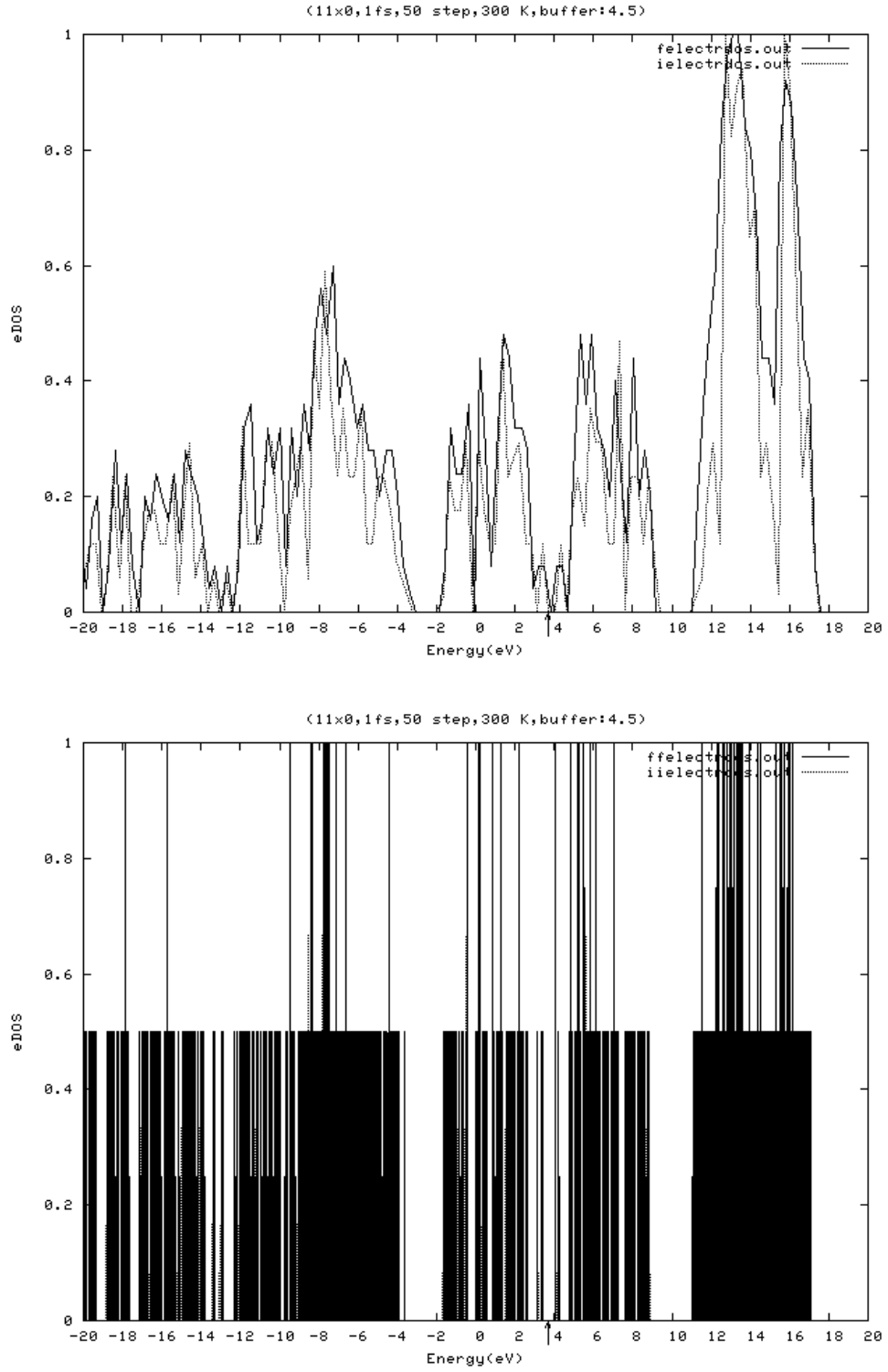
Şekil 4.25 15x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.8 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 4.26 4x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 4.27 5x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 5.0 MD adım : 50 , dt :1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri



Şekil 4.28 11x0 KNT için , 300 K , Buffer Skin Size 4.5 MD adım : 50 , dt : 1 fs çalışmaları için eDOS grafikleri

6. YORUM

Bu çalışmada $O(N)$ sıkı-bağ moleküler dinamik yöntemi kullanılarak farklı simetrik yapıdaki karbon nanotüplerin (metaller için 2×2 den 20×20 ye kadar tüm tüpler, yarıiletkenler için ise 4×0 dan 30×0 a kadar tüm tüpler) iki farklı sıcaklıkta elektronik durum yoğunlukları, enerji bant aralıkları, fermi seviyeleri incelenmiştir. İncelenen bütün tüpler için $O(N)$ sonuçlarının $O(N^3)$ ile uygunluğunu sağlayabilmek için, $O(N^3)$ - $O(N)$ enerji hata grafikleri oluşturulmuştur. Çalışılan bütün tüpler için $O(N^3)$ ortalama atom başına toplam enerji değerleri ile $O(N)$ atom başına toplam enerji değerlerinin farkını minimum yapan değer baz alınarak “buffer skin size” parametreleri belirlenmiştir. Buffer skin size parametresi belirlendikten sonra sıkı-bağ moleküler dinamik programı farklı yapıdaki KNT ler için belirli moleküler dinamik adımlarında çalıştırılmıştır. İncelenen farklı simetrik yapıdaki KNT ler için elektronik durum yoğunlukları (eDOS), bant aralığı enerjisi, fermi enerji değerleri moleküler dinamik (MD) adımına bağlı olarak çalışılmıştır. Fermi enerji civarındaki elektronik durum yoğunluğu grafiklerine bakılarak farklı simetrik yapılardaki karbon nanotüplerin metalik, yarıiletken ve metalik yarıiletken bir davranış gösterdiği belirlenmiştir. Bant enerji aralığı değerleri farklı sıcaklık değerleri için yarıçapa karşı çizilmiştir. Yarıçap arttıkça enerji bant aralığını düşmektedir. Yarıiletken zig-zag karbon nanotüplerin farklı iki sıcaklık değeri için enerji bant aralıkları yarıçapa göre çizilmiştir. Her iki sıcaklık değeri içinde enerji bant aralığı değerleri yarıçapa göre $\frac{1}{r^2}$ şeklinde azalmaktadır. Metalik zig-zag karbon nanotüpler içinde aynı çalışma yapılmıştır. Metalik zig-zag karbon nanotüpler içinde enerji bant aralığı değerlerinin hegzagon sayısı arttıkça daha hızlı bir şekilde sıfıra gittiği gözlemlenmiştir. Beklenildiği gibi sıcaklık etkisi her iki cins KNT de (yarıiletken ve metalik yarıiletken KNT) enerji bant aralığı değerlerini düşürecek şekilde olmuştur.

Bu çalışmada incelenen armchair KNT ler metalik davranış göstermiştir. Zig-zag KNT ler içinde $n-m=3i$ durumunu sağlayan KNT lerde metalik davranış gösterdiği belirlenmiştir. Diğer zig-zag KNT lerin bant aralığı enerjisi sonuçlarına bakılarak yarıiletken bir davranış gösterdiği belirlenmiştir.

Bu çalışmada incelenen farklı simetrik yapılardaki KNT lerin teorik ve literatür sonuçlar ile karşılaştırması yapılmıştır. R.Saito, G.Dresselhaus ve M.Dresselhaus (1998) un vermiş olduğu

$$E_g = \frac{a_{c-c}|t|}{d_t} \quad (|t| = 2,5eV, a_{c-c} = 1,42A^0, d_t \text{ KNT nin \u00e7apıdır})$$

denklemini ,

Yu.I. Prylutsky, S.S.Durov, O.V.Ogloblya, E.V.Buzaneva, P.Scharff (2000) ın vermiř olduđu

$$E_g = \beta_\pi \frac{d_0}{R_0} \quad (\beta_\pi = 3.3eV, d_0 = a_{c-c} \text{ ve } R_0 \text{ KNT nin \u00e7apıdır})$$

denklemleri kullanılarak yarıiletken KNT i\u00e7in hesaplamalar yapılmıřtır.

Ayrıca X.Blase, L.X.Benedict, E.L.Shirley, S.G.Louie (1994) ve H.Yorikawa, S.Muramatsu (1995), N.Hamada, S.Sawada, A.Oshiyama (1992), M.Simeoni, C.D.Luca, S.P.Picozzi, S.Santucci, B.Delley (2005), D.H.Oh, J.M.Park, K.S.Kim (2000), O.G\u00fclseren, T.Yildirim, and S.Ciraci (2002) nın vermiř oldukları bant enerji aralıđı deđerleri \u00c7izelge 4.9 da belirtilmiř ve \u00e7alıřmamızda bulunan sonu\u00e7larla karřılařtırmaları yapılmıřtır. Sonu\u00e7ların literat\u00fcr ile uygunluđu g\u00f6sterilmiřtir.

\u00c7alıřmalarımızda (3,3), (4,4), (5,5), (10,10) KNT ler i\u00e7in enerji bant aralıđı deđerleri sıfır olarak bulunmuřtur. Bu KNT ler metalik \u00f6zellik g\u00f6stermektedir. D. H. Oh vd., sıkı-bađ ve yarı ampirik kuantum kimyasal yaklařım kullanarak yaptıđı \u00e7alıřmalarda bu KNT ler i\u00e7in enerji bant aralıđı deđerleri sıfır olarak verilmiřtir. (6,0) KNT i\u00e7in enerji bant aralıđı deđerleri 0,29 eV olarak bulunmuřtur. D. H. Oh vd., yapmıř olduđu \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,20 eV ve N. Hamada vd., Tersoff ampirik potansiyelini kullanarak yaptıđı \u00e7alıřmalarda (6,0) KNT i\u00e7in enerji bant aralıđı 0,21 eV olarak verilmiřtir.

(9,0) KNT i\u00e7in enerji bant aralıđı 0,13 eV olarak bulunmuřtur. D. H. Oh vd., yaptıđı \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,09 eV, N. Hamada vd., yapmıř olduđu \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,045 olarak verilmiřtir. O. G\u00fclseren vd., ilk prensipler hesaplamaları kullanarak yaptıđı \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,093 eV olarak verilmiřtir. X. Blase vd., ab initio: psedu-potansiyel yerel durum yođunluđu (LDA) hesaplamalarından yapmıř oldukları \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,17 eV olarak verilmiřtir.

(10,0) KNT i\u00e7in enerji bant aralıđı 0,58 eV olarak bulunmuřtur. D. H. Oh vd., yaptıđı \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,59 eV, N. Hamada vd., yapmıř oldukları \u00e7alıřmalarda bu deđer 0,86

eV, O. Gülseren vd., yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0,764 eV, R. Saito vd., çalışmalarında 0,45 eV olarak verilmiştir. Y. I. Prylutsky vd., basit titreşim modelini kullanarak yaptığı çalışmalarda bu değer 1,19 eV, H. Yorikawa vd., sıkı-bağ yaklaşımı ve analitik ve numerik metotlar kullanarak yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0,65 eV olarak verilmiştir. (11,0) KNT için enerji bant aralığı 0,66 eV olarak bulunmuştur. N. Hamada vd., yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0,89 eV, O. Gülseren vd., yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0,939 eV, H. Yorikawa vd., ise bu değeri 0,80 eV olarak verilmiştir. (12,0) KNT için enerji bant aralığı 0,07 eV olarak bulunmuştur. N. Hamada vd., çalışmalarında bu değer 0,008 eV, O. Gülseren vd., çalışmalarında ise bu değer 0,078 eV olarak verilmiştir. (13,0) KNT için enerji bant aralığı 0,45 eV olarak bulunmuştur. N. Hamada vd., yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0,697 eV, O. Gülseren vd., çalışmalarında bu değer 0,625 eV olarak verilmiştir. (15,0) KNT için enerji bant aralığı 0,04 eV olarak bulunmuştur. N. Hamada vd., yapmış oldukları çalışmalarda bu değer 0 eV, O. Gülseren vd., çalışmalarında bu değer 0,028 eV olarak verilmiştir. Çalışmalarımın literatür ile uyum sağladığı gösterilmiştir.

Çizelge 4.9 KNT lerin bant aralıkları ($E_g (eV)$) ve literatür sonuçları karşılaştırması

(1) D.H. Oh vd.,2000, (2) N. Hamada vd., 1992, (3) O. Gülseren vd., 2002, (4) R. Saito vd., 1992, (5) Y.I. Prylutsky vd., 2000, (6) H. Yorikawa vd., 1995, (7) X. Blase vd., 1994

$\vec{C}_h = (n, m)$	$r(A^0)$	$E_g (eV)$	$E_g (eV)$ Kaynaklar (1),(2),(3),(4),(5),(6),(7)
3,3	2,0656	0	0(1)
4,4	2,7355	0	0(1)
5,5	3,4087	0	0(1)
10,10	6,7893	0	0(1)
6,0	2,3757	0,29	0,20(1) 0,21(2)
9,0	3,5409	0,13	0,09(1) 0,045(2) 0,093(3) 0,17(7)
10,0	3,9305	0,58	0,59(1) 0,86(2) 0,764(3) 0,45(4) 1,19(5) 0,65(6)
11,0	4,3205	0,66	0,89(2) 0,939(3) 0,80(6)
12,0	4,7107	0,07	0,008(2) 0,078(3)
13,0	5,1011	0,45	0,697(2) 0,625(3)
14,0	5,4917	0,43	0,7(2) 0,736(3)
15,0	5,8823	0,04	0(2) 0,028(3)
17,0	6,6640	0,35	0,27(4) 0,70(5)

KAYNAKLAR

- B. Shan, K. Cho, Phys. Rev. Lett. **94**, 236602 (2005)
- C. Özdoğan, G. Dereli, T. Çağın, Comp. Phy. Comm., **148**, 188 (2002)
- D. H. Robertson, D. W. Brenner, J. W. Mintmire, Phys. Rev. B **45**, 21 (1992)
- Dong-Hwa Oh, J. M. Park, K. S. Kim, Phys. Rev. B **62**, Number 3 (2000)
- G. Dereli, C. Özdoğan, Phys. Rev. B **67**, 035415 (2003)(a)
- G. Dereli, C. Özdoğan, Physical Review B, **67**, 035416 (2003)(b)
- G. Sun, J. Kürti, M. Kertesz, and R. Baughman, J. Phys. Chem. B **107**, 6924 (2003)
- H. Yorikawa and S. Muramatsu, Phys. Rev. B **52**, 2723 (1995)
- I. Cabria, J.W. Mintmire, and C.T. White, Phys.Rev.B **67**, 121406 (2003)
- J. W. Mintmire, C. T. White, Phys. Rev. Lett. **81**, 12 (1998)
- K. Kanamitsu and S.Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 483 (2002)
- M. Simeoni, C.D. Luca, S. Picozzi, S. Santucci, B. Delley, The Journal of Chemical Physics **122**, 214710 (2005)
- M. Ouyang, J. Huang, C.L. Cheung, and C.M. Lieber, Science **292**, 702 (2001)
- N. Hamada, S. Sawada, and A. Oshiyama, Phys. Rev. Lett. **68**, 1579 (1992)
- O. Gülseren, T. Yildirim, and S.Ciraci, Phys. Rev. B **65**, 153405 (2002)
- P. J. F. Harris, Carbon Nanotubes And Related Structures, Cambridge, (1999)
- R. Saito, G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London (1998)
- R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, Appl. Phys. Lett. **60**, 18 (1992)
- T. Miyake and Susumu Saito, Phys. Rev. B **72**, 073404 (2005)
- V. Zolyomi and J. Kürti, Phys. Rev. B **70**, 085403 (2004)
- X. Blase, L.X. Benedict, E.L. Shirley, and S.G. Louie, Phys. Rev. Lett. **72**, 1878 (1994)
- Y. I. Prylutsky, S.S. Durov, O.V. Ogloblya, E.V. Buzaneva, P. Scharff, Computational Material Science **17** (2000)
- Y. I. Proylutsky, O.V. Ogloblya, P.C. Eklund, P. Scharff, Synthetic Metals **121** (2001)

İNTERNET KAYNAKLARI

www.nanoturk.com

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

<http://volga.eng.yale.edu/sohrab/grouppage/CNT.html>

EK I

 Δt BELİRLENMESİ

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

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

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

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

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	24.06.1982	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1996-1999	Şehremini Lisesi
Lisans	1999-2003	Dumlupınar Üniversitesi Fen Edebiyat Fak. Fizik Bölümü