

GRAFİT İÇİNDE BORUN YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ

Erkan ABADAN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

ŞUBAT 2010

ANKARA

Erkan ABADAN tarafından hazırlanan GRAFİT İÇİNDE BORUN YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ 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. Bora ALKAN

.....

Fizik, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet KASAP

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Tarih : 05 / 02 / 2010

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 orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Erkan ABADAN

GRAFİT İÇİNDE BORUN YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Erkan ABADAN

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Şubat 2010

ÖZET

Bu tez çalışmasında yoğunluk fonksiyonu teorisiyle grafit içinde değişik atomların konakladığı, özellikle borun tutunmasıyla oluşan yapıların özellikleri incelendi. Bütün hesaplamalar Castep paket programında 310 eV kesilim enerjisinde yerel yoğunluk yaklaşımının (LDA) CA-PZ modeli kullanılarak yapıldı. Geometri optimizasyonu sonrası yapıların yapısal parametreleri, toplam ve oluşum enerjileri, enerji durum yoğunlukları ve elektron yoğunluk haritaları hesaplandı. Son olarak bazı sistemlerin basınca bağlı olarak nasıl değiştikleri incelendi.

Bilim Kodu : 202.1.075
Anahtar Kelimeler : Yoğunluk fonksiyonu teorisi, bor, grafit, castep
Sayfa Adedi : 105
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

DENSITY FUNCTIONAL THEORY OF BORON WITHIN GRAPHITE
(M.Sc. Thesis)

Erkan ABADAN

GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
February 2010

ABSTRACT

In this thesis, boron doped graphite compounds has been performed using the density functional theory under the local density approximation. All computations have been done with CA-PZ mode of local density approach (LDA) and 310 cut-off energy using the Castep package program. In the geometry optimizations the parameters of structures, total and formation energies, density of states properties and electron maps of structures has been examined. Then, some of boron doped grafit structures examined under the pressure.

Science Code : 202.1.075

Key Words : Density function theory, boron, graphite, castep

Page Number : 105

Adviser : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

TEŞEKKÜR

Başta maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman benden esirgemeyen, her zaman bana inanan ve güvenen aileme sonsuz teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, güler yüzü ve sevgisiyle her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen, gösterdiği büyük sabırla beni yönlendiren danışman hocam Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK' e teşekkür ederim. Ayrıca her konuda benimle bilgisini paylaşan hocam Arş. Gör. Sezgin AYDIN' a teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xvii
1. GİRİŞ	1
2. YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ (DFT)	3
2.1. Castep Paket Programı	7
3. BOR, KARBON VE AZOT ATOMLARI	10
3.1. Bor	10
3.1.1. Bor elementinin özellikleri	11
3.2. Karbon	18
3.2.1. Karbon fazları	18
3.2.2. Elmas	19
3.2.3. Fullerenler	20
3.2.4. Grafit	21
3.3. Azot	23
4. HESAPLAMALAR	24
4.1. Grafit (C ₄)-(1×1×1) Kristal Yapısının İncelenmesi	24

Sayfa

4.2. Grafit (C_4)-(1×1×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan Farklı Formlarının İncelenmesi.....	27
4.3. Grafit (C_{16})-(2×2×1) Kristal Yapısının İncelenmesi.....	36
4.4. Grafit (C_{16})-(2×2×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan BC_{16} Yapısının Farklı Formlarının ve C Atomu Tutunmasıyla Oluşan Formunun İncelenmesi.....	40
4.5. Grafit (C_{36})-(3×3×1) Kristal Yapısının İncelenmesi.....	63
4.6. Grafit (C_{36})-(3×3×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan BC_{36} Yapısının Farklı Formlarının Ve C, N Atomlarının Tutunmasıyla Oluşan Formların İncelenmesi.....	67
4.7. C1 Formunun Değişik Basınçlarda İncelenmesi (5GPa, 10GPa, 15GPa).....	93
4.8. BC_{36} Yapısının Elastik Sabitlerinin Hesaplanması.....	100
5. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	102
KAYNAKLAR.....	103
ÖZGEÇMİŞ.....	105

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. Bor elementinin atomik özellikleri.....	10
Çizelge 3.2. Bor elementinin fiziksel özellikleri	12
Çizelge 3.3. Bor elementinin kimyasal özellikleri.....	13
Çizelge 3.4. Bor ürünleri kullanım alanları.....	14
Çizelge 3.5. Özel bor kimyasalları kullanım alanları	15
Çizelge 3.6. Ekonomik açıdan önemli bor mineralleri	16
Çizelge 4.1. Grafit (C_4) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri	25
Çizelge 4.2. Grafit (C_4) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, iki tabaka arası mesafe (L_1 - L_2).....	26
Çizelge 4.3. Grafit (C_4) kristal yapısının toplam ve oluşum enerjisi.....	27
Çizelge 4.4. Oluşan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) geometri optimizasyon öncesi birim örgü parametreleri	28
Çizelge 4.5. Oluşan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri	28
Çizelge 4.6. BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2), Bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafeleri (L_1 - L_2).....	32
Çizelge 4.7. BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) toplam enerji (E_n), oluşum (formation) enerji (E_f).....	35
Çizelge 4.8. Grafit (C_{16}) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri.....	36

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.9. Grafit (C_{16}) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	39
Çizelge 4.10. Grafit (C_{16}) kristal yapısının toplam ve oluşum enerjisi	39
Çizelge 4.11. B1 (BC_{16}), B2 (BC_{16}), B3 (BC_{16}), B4 (BC_{16}), B5 (BC_{16}), B6 (B_2C_{14}), B7 (C_{17}) yapılarının geometri optimizasyon öncesi birim örgü parametreleri	41
Çizelge 4.12. B1 (BC_{16}), B2 (BC_{16}), B3 (BC_{16}), B4 (BC_{16}), B5 (BC_{16}), B6 (B_2C_{14}), B7 (C_{17}) yapılarının geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri	41
Çizelge 4.13. B1 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	53
Çizelge 4.14. B2 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	53
Çizelge 4.15. B3 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	54
Çizelge 4.16. B4 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	55
Çizelge 4.17. B5 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	56
Çizelge 4.18. B6 (B_2C_{14}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	57
Çizelge 4.19. B7 (C_{17}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	58
Çizelge 4.20. B1 (BC_4), B2 (BC_4), B3 (BC_4), B4 (BC_4), B5 (B_2C_{14}) formlarının ve B7 (C_{17}) yapısının toplam enerji (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f)	62

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.21. Grafit (C_{36}) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri.....	63
Çizelge 4.22. Grafit (C_{36}) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	65
Çizelge 4.23. Grafit (C_{36}) kristal yapısının toplam ve oluşum enerjisi.....	66
Çizelge 4.24. C1 (BC_{36}), C2 (BC_{36}), C3 (BC_{36}), C4 (BC_{36}), C5 (BC_{36}), C6 (B_2C_{34}), C7 (C_{37}), C8 (NC_{36}) yapılarının geometri Optimizasyon öncesi birim örgü parametreleri.....	67
Çizelge 4.25. C1 (BC_{36}), C2 (BC_{36}), C3 (BC_{36}), C4 (BC_{36}), C5 (BC_{36}), C6 (B_2C_{34}), C7 (C_{37}), C8 (NC_{36}) yapılarının geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri.....	68
Çizelge 4.26. C1 (BC_{36}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	81
Çizelge 4.27. C2 (BC_{36}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	82
Çizelge 4.28. C3 (BC_{36}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	83
Çizelge 4.29. C4 (BC_{36}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	84
Çizelge 4.30. C5 (B_2C_{34}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	85
Çizelge 4.31. C6 (BC_{36}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	86
Çizelge 4.32. C7 (C_{37}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe ($L1-L2$).....	87

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.33. C8 (NC ₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	87
Çizelge 4.34. C1 (BC ₃₆), C2 (BC ₃₆), C3 (BC ₃₆), C4 (BC ₃₆), C5 (BC ₃₆), C6 (B ₂ C ₃₄), C7 (C ₃₇) ve C8 (NC ₃₆) yapılarının toplam enerji (E _n), oluşum (formation) enerjisi (E _f).....	92
Çizelge 4.35. C1 Formunun değişik basınçlarda geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri	93
Çizelge 4.36. C1 (BC ₃₆) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2).....	97
Çizelge 4.37. C1 (BC ₃₆) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yapının toplam enerjisi (E _n), oluşum (formation) enerjisi (E _f).....	99
Çizelge 4.38. BC ₃₆ yapısının elastik sabitleri	100
Çizelge 4.39. BC ₃₆ yapısının Bulk Modülü	101

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. Boraks kristali	10
Şekil 3.2. Bor atom yapısı	11
Şekil 3.3. Bor'un kristal yapısı	12
Şekil 3.4. Karbonun bazı allotropları: a) elmas, b) grafit, c) altıgen elmas, d-f) fullerenerler (C_{60} , C_{540} , C_{70}), g) amorf karbon, h) karbon nanotüp	19
Şekil 3.5. Elmas	19
Şekil 3.6. Fulleren	20
Şekil 3.7. Grafit	21
Şekil 3.8. Grafen yüzeyi	22
Şekil 3.9. Grafitin tabakalar arası yapısı ve atomlar arası mesafesinin gösterimi	22
Şekil 4.1. Grafit (C_4) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	25
Şekil 4.2. Grafit (C_4) kristal yapısının durum yoğunluğu.	26
Şekil 4.3. A1 (BC_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi.	29
Şekil 4.4. A2 (BC_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	29
Şekil 4.5. A3 (BC_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	30
Şekil 4.6. A4 (BC_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	30
Şekil 4.7. A5 (B_2C_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	31
Şekil 4.8. A1 (BC_4) yapısının durum yoğunluğu	32
Şekil 4.9. A2 (BC_4) yapısının durum yoğunluğu	33

Şekil	Sayfa
Şekil 4.10. A3 (BC ₄) yapısının durum yoğunluğu.....	33
Şekil 4.11. A4 (BC ₄) yapısının durum yoğunluğu	34
Şekil 4.12. A5 (B ₂ C ₄) yapısının durum yoğunluğu.....	34
Şekil 4.13. Grafit (C ₁₆) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi.....	37
Şekil 4.14. Grafit (C ₁₆) kristal yapısının durum yoğunluğu	39
Şekil 4.15. B1 (BC ₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları ve (c)elektron yoğunluğu gösterimi.	42
Şekil 4.16. B2 (BC ₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	43
Şekil 4.17. B3 (BC ₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	45
Şekil 4.18. B4 (BC ₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	46
Şekil 4.19. B5 (B ₂ C ₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi.....	48
Şekil 4.20. B6 (B ₂ C ₁₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi.....	49
Şekil 4.21. B7 (C ₁₇) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	51
Şekil 4.22. B1, yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	53
Şekil 4.23. B2 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	54
Şekil 4.24. B3 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	55
Şekil 4.25. B4 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	56
Şekil 4.26. B5 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	57
Şekil 4.27. B6 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	58
Şekil 4.28. B1 (BC ₁₆) yapısının durum yoğunluğu.....	59

Şekil	Sayfa
Şekil 4.29. B2 (BC_{16}) yapısının durum yoğunluğu	59
Şekil 4.30. B3 (BC_{16}) yapısının durum yoğunluğu	60
Şekil 4.31. B4(BC_{16}) yapısının durum yoğunluğu	60
Şekil 4.32. B5 (BC_{16}) yapısının durum yoğunluğu	61
Şekil 4.33. B6 (B_2C_{14}) yapısının durum yoğunluğu	61
Şekil 4.34. B7 (C_{17}) yapısının durum yoğunluğu	62
Şekil 4.35. Grafit (C_{36}) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	64
Şekil 4.36. Grafit (C_{36}) kristal yapısının durum yoğunluğu	66
Şekil 4.37. C1 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	69
Şekil 4.38. C2 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	70
Şekil 4.39. C3 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	72
Şekil 4.40. C4 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	73
Şekil 4.41. C5 (B_2C_{34}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	75
Şekil 4.42. C6 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	76
Şekil 4.43. C7 (C_{37}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	78
Şekil 4.44. C8 (NC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi	79
Şekil 4.45. C1 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	81
Şekil 4.46. C2 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	82

Şekil	Sayfa
Şekil 4.47. C3 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	83
Şekil 4.48. C4 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	84
Şekil 4.49. C5 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	85
Şekil 4.50. C6 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi	86
Şekil 4.51. C1 (BC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	88
Şekil 4.52. C2 (BC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	89
Şekil 4.53. C3 (BC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	89
Şekil 4.54. C4 (BC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	90
Şekil 4.55. C5 (BC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	90
Şekil 4.56. C6 (B ₂ C ₃₄) yapısının durum yoğunluğu	91
Şekil 4.57. C7 (C ₃₇) yapısının durum yoğunluğu	91
Şekil 4.58. C8 (NC ₃₆) yapısının durum yoğunluğu	92
Şekil 4.59. C1 (5GPa) yapısının optimize (a) sonrası birim hücre yapıları, (b) elektron yoğunluğu gösterimi	94
Şekil 4.60. C1 (10GPa) yapısının optimize (a) sonrası birim hücre yapıları, (b) elektron yoğunluğu gösterimi	95
Şekil 4.61. C1 (15GPa) yapısının optimize (a) sonrası birim hücre yapıları, (b) elektron yoğunluğu gösterimi	96
Şekil 4.62. Yapıların yakın komşulukları ile yaptığı bağlar (a) 5GPa, (b) 10GPa, (c) 15GPa	97
Şekil 4.63. C1 (BC ₃₆) yapısına (a) 5GPa, (b) 10GPa, (c) 15GPa basınç uygulandığında yapıların toplam durum yoğunluğu	98

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler

Açıklama

Å

Angstrom

eV

Elektron volt

B

Bor

C

Karbon

N

Azot

GPa

Giga pascal

P

Elektron yoğunluğu

Kısaltmalar

Açıklama

CASTEP

Cambridge Serial Total Energy Package

DFT

Density functional theory

(Yoğunluk fonksiyoneli teorisi)

LDA

Local density approximation

(Yerel yoğunluk yaklaşımı)

GGA

Generalized gradient approximation

(Genelleştirilmiş eğim yaklaşımı)

E_n

Molekülün toplam enerjisi

E_f

Oluşum (formation) enerjisi

E_{xc}

Değiş tokuş ve korelasyon enerjisi

1. GİRİŞ

Yoğunluk fonksiyoneli teorisini temel alan ab-initio hesaplamalar yarıiletken ve iletken kristal yapıların bulk ve yüzeylerinin fiziksel özelliklerinin incelenmesinde sıkça kullanılmaktadır. Borun grafit içindeki tutunması ve oluşan yeni yapılar birçok araştırmacı tarafından bu hesaplamalarla incelenmiştir[1–2].

Grafit teknolojik açıdan büyük bir öneme sahiptir ve birçok alanda kullanılmaktadır. Bor katkılı grafit ise, oluşan yeni yapılar çok kuvvetli elektronik teknolojide kullanılan materyaline dönüşmekte ve ısı kaybını engelleyici karakter kazanmaktadır [3]. Borun grafit içindeki termal çözünürlüğü 2350 °C’ dir bu özelliği bor-grafit yapısının sert ve dayanıklı bir madde olmasını sağlar [4].

Bor katkılı grafit yapısı bu günlerde ileri Li-ion bataryalarında, mobil iletişimde ve bilgisayarlarda kullanılmaktadır [5–6].

Bu çalışmada da Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi ile grafit içinde bor, karbon, azot atomlarının tutunmasıyla oluşan yapıların, özellikle borun farklı yerlere tutunmasıyla oluşan yapıların bağ uzunlukları, oluşum enerjileri, elektron durum yoğunlukları hesaplandı. İki tabakalı grafit yapılardan 4 C atomu, 16 C atomu ve 36 C atomuyla oluşturulan grafit yapıların içine bor, karbon ve azot katkılanmasıyla oluşan 20 değişik yapı optimize edildi.

Bu çalışmadaki hesaplamalar CASTEP paket programında [7] yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) için Local Density Approximation (LDA) yaklaşımı [8] ile gerçekleştirilmiştir. LDA yaklaşımında CA-PZ modeli kullanılarak, 310 eV kesilim enerjisinde Ultrasoft [9] sözde potansiyeli ile yapılmıştır.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde yoğunluk fonksiyonu teorisi ve bu çalışmaları yaparken kullandığımız teorik yöntemler kısaca verildi. Castep paket programının genel özelliklerine değinildi. Üçüncü bölümde geometrik optimizasyonu yapılan bor

atomu, karbon atomu ve azot atomunun karakteristik özelliklerinden bahsedilerek dördüncü bölümde hesaplamalara geçildi. Son bölümde ise elde ettiğimiz sonuçlar yorumlandı.

2. YOĞUNLUK FONKSİYONU TEORİSİ (DFT)

Hohenberg-Kohn (1964) ve Kohn-Sham (1965) tarafından geliştirilen yoğunluk fonksiyonu teorisi, bir elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisi elektron yoğunluğunun (ρ) bir fonksiyoneli olarak ifade eder. Taban durum yoğunluk ve enerji fonksiyonu ile sistemin taban durum özellikleri tanımlanabilir [10]. Yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT), metal, yalıtkan ve yarı iletkenlerin temel durum özelliklerini belirlemek için oldukça başarılı bir yaklaşımdır. Son yıllarda katıların bulk ve yüzey özelliklerinin yanı sıra protein ve karbon nano tüplerin fiziksel özelliklerinin incelenmesinde de kullanılmaktadır [11–12].

Bir molekülün enerjisi veya diğer fiziksel büyüklükler Schrödinger denkleminin çözülmesiyle elde edilebilir. Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

ile verilir. Burada $\hat{H}$ moleküldeki etkileşimleri tanımlayan bir operatör, ψ moleküler dalga fonksiyonu, E ise moleküler sistemin farklı kararlı durumlarına karşılık gelen enerjidir.

Buradaki temel nicelik yoğunluktur. Hamiltoniyeni,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r}_i - \vec{d}_{\alpha}|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.1)$$

İle verilen N elektronlu sistem için yazılan Schrödinger denklemi, N tane tek elektron Schrödinger denklemine indirgenir [13].

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Buradaki $\Psi_i(\vec{r})$ ler tek elektron dalga fonksiyonları ve $V(\vec{r})$ tek elektronun tüm etkileşimlerini içeren potansiyel terimidir,

$$V(\vec{r}) = V_{dis}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (2.3)$$

Potansiyeldeki ilk terim iyonlarla olan etkileşimi, ikinci terim diğer elektronlarla olan etkileşimi, üçüncü terim ise değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimini anlatır. Formalizm bu hali ile kesindir.

Hohenberg ve Kohn 1964'de, homojen olmayan elektron gazının taban durumunu bulmak için YFT geliştirmişlerdir. Böyle bir sistem için parçacık yoğunluğu,

$$\rho(\vec{r}) = N \int |\Psi_0(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots \vec{r}_N \quad (2.4)$$

ile verilir. Burada Ψ_0 sistemin taban durumu dalga fonksiyonudur. Sistemin taban durum enerjisinin yoğunluğun fonksiyoneli olarak verilebileceği ve enerji fonksiyonelinin, iyonlarla etkileşim ile ilgili olan terimi dışındaki kısmının ($F[\rho]$) evrensel olduğu gösterilmiştir. Verilen iki önemli teorem şunlardır [13].

- Verilen $V_{dis}(\vec{r})$ ile belirlenen yoğunluk sistemi tek olarak betimler.
- $F[\rho]$ minimum değerini ancak ve ancak taban durumu yoğunluğunda alır.

Teoremlerden ilki, yoğunluğun sistemi betimlemek için dalga fonksiyonu yerine kullanılabileceğini anlatır.

Bir sonraki yıl, Kohn ve Sham bu gün Kohn Sham denklemleri olarak bilinen, enerji fonksiyonelinin minimum yapan yoğunluğun bulunabileceği denklemleri vermiştir.

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + \int d\vec{r}' d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + E_{XC}[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r}) V_{dis}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.5)$$

Yoğunluk fonksiyoneli,

$$V_{eff} = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + V_{XC}[\rho(\vec{r})] + V_{dis}(\vec{r}) \quad (2.6)$$

tanımlanmasıyla,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.7)$$

ile verilen yoğunluğa göre minimize edilirse,

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.8)$$

denklemini elde edilir. Denklem öz uyumlu çözümleridir.

- 1- Verilen başlangıç yoğunluğundan, Eş.2.6 ile V_{eff} hesaplanır.
- 2- V_{eff} (Eş.2.8) de yazılarak Ψ_i 'ler elde edilir.
- 3- Bulunan Ψ_i 'ler ile Eş.2.7'den yeni yoğunluk elde edilir.
- 4- Belirlenen hesap bitirme ölçütü sağlanmıyorsa 1-3 arası işlemler bulunan yeni yoğunlukla tekrar edilir.

Hesap bittiğinde elde edilen yoğunluk Eş.2.5'de yazılarak sistemin taban durumu enerjisi elde edilmiş olacaktır.

Yöntemin kesinliğini bozan etken Eş.2.5'deki E_{XC} terimidir. Bu terimin formu bilinmediğinden, yoğunluğun fonksiyoneli olarak yazmak zordur. Bunun için iki

yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımı (local density approximation, LDA) ve genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımıdır (generalized gradient approximation, GGA). Yerel yoğunluk yaklaşımı “Local Density Approximation”, (LDA) çoğunlukla Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde kullanılmaktadır. Kohn-Sham denklemlerini çözerken, sadece klasik olmayan

$$E_{xc}[\rho] = T[\rho] - T_{KS}[\rho] + E_x[\rho] + E_c[\rho] \quad (2.9)$$

yaklaşımı yapılmalıdır. Etkileşmeyen Kohn-Sham enerjisi için, tahminen küçük düzeltmeler vardır ve bunlar homojen elektron gazının yüksek ve düşük yoğunluk limitleri için doğru olarak hesaplanabilir ve ρ_0 homojen elektron gazı yoğunluğu olarak eklenebilir [8]. Sonuç, yoğunluk için rasyonel çok terimli olarak eklenilebilir [14]. LDA’da homojen olmayan elektron gazı enerjisi, aşağıdaki yerel yaklaşımlar kullanılarak hesaplanmaktadır,

$$E_{xc}[\rho(r)] = \int d\vec{r} \rho(r) \varepsilon_{xc}^{\rho_0}[\rho(r)] \quad (2.10)$$

$$\varepsilon_{xc}^{\rho_0} = \frac{E_{xc}[\rho_0]}{\rho_0} \quad (2.11)$$

Yerel yoğunluk yaklaşımını genişletmek için doğal bir yol, ona safsızlık hakkında bilgi dahil etmektir. $|\nabla \rho(r)|$, yerel eğimin büyüklüğü safsızlığın bir ölçüsüdür ve bu bilgi $E_{xc}(r) = E_{xc}(\rho(r), |\nabla \rho(r)|)$ değiş tokuş-korelasyon fonksiyonelinin içine dahil edilebilir. İlk denklemler, $|\nabla \rho(r)|$ yerel eğimin usulüne göre saf genişlemenin orijinal yerel yoğunluk yaklaşımından daha az doğru olduğu izlenimini bırakmıştır. LDA’nın başa çıkamadığı durumlarda bazı sınırlamaların çığırmasıyla saf eğim genişlemesi ortaya çıkar. Eğim genişlemesinin fiziksel olmayan sistemlere karşılık gelmesi, LDA’nın fiziksel sistemden başka bir yaklaşıklıkla karşılık gelmesi ile yorumlanır. Genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımı “Generalized Gradient

Approximation” (GGA), ρ_{XC} üzerine bilinen birçok kısıtlamaların zorla toplandığı açıkça düzenlenmiş bir fonksiyonel tarafından ortaya konulmuştur [15]. LDA ve GGA’daki E_{XC} değiş-tokuş korelasyon fonksiyonelleri sırası ile aşağıdaki biçimde verilebilmektedir:

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{\rho_0}[\rho(r)] dr \quad (2.12)$$

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{GGA}[\rho(r), \nabla \rho(r)] dr \quad (2.13)$$

E_{XC} LDA’ da sadece $\rho(r)$ yoğunluk değişkenine bağlı iken GGA’ da $\rho(r)$ yoğunluk değişkeni ve onun eğimi $\nabla \rho(r)$ ’ye bağlıdır [16].

2.1. Castep Paket Programı

Cambridge Sequential Total Energy Package (CASTEP) kısaltması olan Castep, Cambridge Üniversitesi teorik yoğun madde grubu tarafından geliştirilmiştir.

CASTEP paket programı materyal biliminde kuantum mekaniksel temel ilkelerden hareketle hesap yapan, hesaplamalarda yoğunluk fonksiyonu teorisini kullanılan önemli yazılımlardan birisidir.

CASTEP paket programı ilgili sistemin elektronik durumları için kuantum mekanik denklemleri kullanarak, toplam enerji (pseudo potansiyel) 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 vb.) verir.

CASTEP paket programı materyal biliminde, moleküller, katıhal ve yüzey problemleri ile ilgili hesaplamalarda geniş bir kullanım alanı vardır [17].

Bu alanda yapılan çalışmalar şöyle sıralanabilir;

- Metaller; yüzey özellikleri
- Metaller; bulk özellikleri
- Yarı-iletkenler; yüzey özellikleri
- Yarı-iletkenler; bulk özellikleri
- Genel yüzey özellikleri
- Mineraller
- Elektronik yapı (band yapıları ve durum yoğunluğu)
- Malzemelerin optik özellikleri
- Malzemelerin nokta kusurlarının özellikleri (boşluklar, interstitials and substitutional impurities)
- Sıcaklığa bağımlı çalışmalar
- Basınç altında faz dönüşümleri
- Moleküller ve moleküler kristaller
- Sistemin dalga fonksiyonunun ve yük yoğunluğunun 3 boyutlu gösterimi

CASTEP programı, hesaplamaları süper hücre adı verilen periyodik olarak tekrarlı birim hücrelerden yapar. Programa giriş verileri sadece ilgili atomların numarası ve başlangıç geometrisidir. Bu metotta pseudo potansiyelleri kullanılmaktadır. Bu potansiyel sadece valans elektronlarında etkin olan bir potansiyeldir. Elektronik dalga fonksiyonu düzlem dalga temel setleri cinsinden yazılmıştır ve elektron-elektron etkileşimleri, yoğunluk fonksiyonu teorisi kullanılarak pseudo potansiyellerinin ve düzlem dalganın birlikte kullanımı, sistemdeki atomlar üzerinde etkin olan atomların hesabında oldukça kolaylık sağlar [17].

Toplam enerji hesaplamalarını, elektronik yapısındaki karışıklık nedeniyle metallere uygulamak, yarıiletken ve yalıtkanlara uygulamaktan daha zordur. Castep paket programında kullanılan metotlar ile metaller üzerinde yapılan hesaplamalar kolaylaştırılmıştır.

LDA yaklaşımında bir sistemde elektron yoğunluğu sabit kabul edilir. Elektron yoğunluğu yerel olarak değişmekte ise nonlocal ya da yerel olmayan yoğunluk yaklaşımı (Nonlocal Gradient Approximation, NLGA) veya genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (Generalized Gradient Approximation, GGA) denir [17].

CASTEP paket programında yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak; bir molekülün ve malzemenin fiziksel büyüklükleri hesaplanmaktadır. Toplam enerji;

$$E_t(\rho) = \sum_i \left\langle \Phi_i + \left| \frac{\nabla^2}{2} \right| \Phi_i \right\rangle + \langle \rho(r_1) \left[E_{xc}[\rho(r_1)] + \frac{V_e(r_1)}{2} - V_N \right] \rangle + V_{NN} \quad (2.14)$$

ifadesi ile hesaplanır. Enerjinin koordinata göre birinci türevi bize sisteme etki eden kuvveti verir ($F = -dE / dR$). Bütün kuvvetler sıfır olduğunda bu bize sistemin denge durumunu verir. Enerjinin birinci türevinden sistem geometrisi elde edilir ve buna geometrik optimizasyonu denir.

Geometri optimizasyonu yapıldıktan sonra sistemin elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikleri hesaplanabilir. Bunlar band yapıları, durum yoğunluğu, optik özellikleri, fonon dispersiyonu, fonon durum yoğunluğu, nüfuslama analizi, gerilim tensörü olarak sıralanabilir [17].

3. BOR, KARBON VE AZOT ATOMLARI

3.1. Bor

Bor, periyodik tabloda B harfi ile gösterilen, atom numarası 5, atom ağırlığı 10,81 olan metalle ametal arası yarı iletken özelliğe sahip bir elementtir. Bor tabiatta hiçbir zaman serbest halde bulunmaz. Doğada yaklaşık 230 çeşit bor minerali olduğu bilinmektedir.

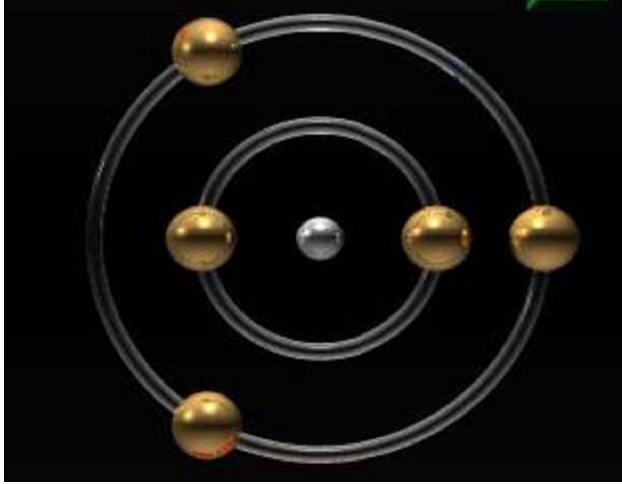
Periyodik cetvelin 3A grubunun ilk ve en hafif üyesidir. Temel hal elektron konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^1$ 'dir. İlk üç iyonlaşma enerjisi 800,6 2427,1 ve 3659,7 kJmol^{-1} 'dir ve grup 3A' nın diğer elementlerinin iyonlaşma enerjilerinden büyüktür [18–19].

Borun saf elementi ilk kez 1808 yılında Fransız kimyager J.L. Gay-Lussac ve Baron L.J. Thenard ile İngiliz kimyager H. Davy tarafından bor oksidin potasyum ile ısıtılmasıyla elde edilmiştir. Daha saf bor, ancak bromit veya klorit formlarının tantalum flamenti vasıtasıyla hidrojen ile reaksiyona sokulmasıyla elde edilmektedir. Bor ismi borun tuzu olan boraks dan türetilmiştir [20].



Şekil 3.1. Boraks kristali

3.1.1. Bor elementinin özellikleri

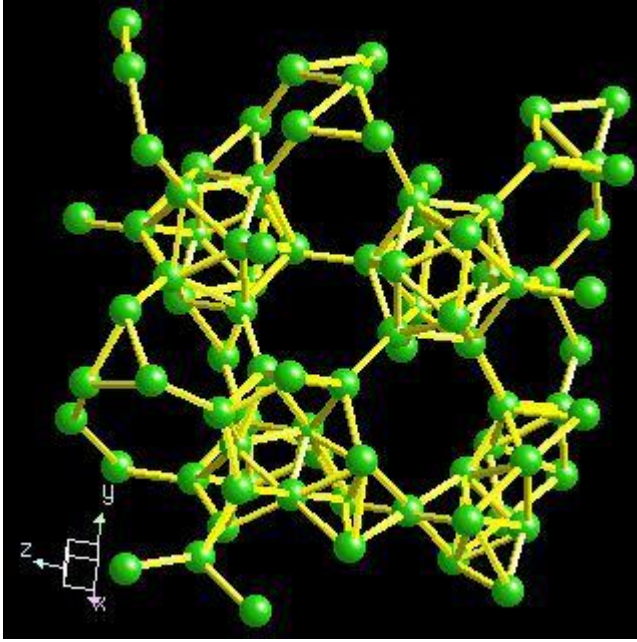


Şekil 3.2. Bor atom yapısı

Çeşitli metal veya ametal elementlerle yaptığı bileşiklerin gösterdiği farklı özellikler, endüstride birçok bor bileşiğinin 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 elmasa benzer ve neredeyse elmas kadar serttir. Kütle numaraları 10 ve 11 olmak üzere iki kararlı izotopu vardır, bunlar; ^{10}B (% 18,8) ve ^{11}B (%81,2) izotoplarıdır. Bor elementinin atomik özellikleri Çizelge 3.1’de verilmektedir [21].

Çizelge 3.1. Bor elementinin atomik özellikleri

Atom çapı	1,17Å
Atomik hacmi	4,6cm ³ /mol
Kristal yapısı	Rhombohedral
Elektron konfigürasyonu	1s ² 2s ² p ¹
İyonik çapı	0,23Å
Elektron sayısı (yüksüz)	5
Nötron sayısı	6
Proton sayısı	5
Valans elektronları	2s ² p ¹



Şekil 3.3. Bor'un kristal yapısı

Kristal bor, önemli ölçüde hafiftir, serttir, çizilmeye karşı dayanıklıdır ve ısıya karşı karardır. Bor kırmızı ötesi ışığın bazı dalga boylarına karşı saydamdır ve oda sıcaklığında zayıf elektrik iletkenliğine sahiptir. Yüksek sıcaklıkta iyi bir iletkenidir. Kristal bor kimyasal olarak inerttir. Bor hidroklorik ve hidroflorik asitlerle kaynatıldığında bozulmaz. Sadece çok ince öğütülmüş bor, konsantre nitrat asidi ile yavaş oksitlenir.

Bor elementinin fiziksel ve kimyasal özellikleri Çizelge 3.2. ve Çizelge 3.3'de verilmektedir [21].

Çizelge 3.2. Bor elementinin fiziksel özellikleri

Atomik kütlesi	10,811
Kaynama noktası	4275K; 4002°C; 7236°F
Termal genleşme katsayısı	0,0000083cm/cm/°C (0°C)
Kondüktivite (elektriksel), (termal)	$1,0 \times 10^{-12} \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$, 0,274 W/cmK
Yoğunluk	2,34g/cc (300K)
Görünüş	Sarı-Kahverengi ametal kristal
Elastik modülü(bulk)	320/GPa
Atomizasyon entalpisi	573,2 kJ/mole (25°C)
Füzyon entalpisi	22,18 kJ/mole
Buharlaşma entalpisi	480 kJ/mole
Sertlik (mohs), (vickers)	9,3 49000 MN m ⁻²
Buharlaşma ısısı	489,7 kJ/mol
Ergime noktası	2573K, 2300°C, 4172°F
Molar hacim	4,68 cm ³ /mole
Fiziksel durum	(20°C & 1atm): Katı
Spesifik ısı	1,02J/gK
Buhar basıncı	0,348Pa (2300°C)

Çizelge 3.3. Bor elementinin kimyasal özellikleri

Elektrokimyasal eşdeğer	0,1344g/amp-hr
Elektronegativite (Pauling)	2,04
Füzyon ısısı	50,2kJ/mol
İyonizasyon potansiyeli	
-Birinci	8,298
-İkinci	25,154
-Üçüncü	37,93
Valans elektron potansiyeli (-eV)	190

Bor mineralleri ve bileşikleri çeşitli endüstri dallarında çok farklı malzeme ve ürünlerin üretiminde kullanılmaktadır. Uzay ve hava araçları, nükleer uygulamalar, askeri araçlar, yakıtlar, elektronik ve iletişim sektörü, tarım, cam sanayi, kimya ve deterjan sektörü, seramik ve polimerik malzemeler, nanoteknolojiler, otomotiv ve enerji sektörü, metalurji ve inşaat gibi 500'e yakın alanda kullanılmaktadır. Ancak tüketilen bor ürünlerinin %80'e yakını cam, seramik-frit, tarım ve deterjan sektörlerinde yoğunlaşmıştır. Bor ürünlerinin başlıca kullanım alanları Çizelge 3.4'de verilmiştir [22].

Çizelge 3.4. Bazı önemli konsantre ve rafine bor bileşiklerinin kullanım alanları

Ürün	Kullanım Alanları
Kalsiyum Bor Cevheri (Kolemanit)	Tekstil kalite cam elyafı, bor alaşımları, metalurjik curuf yapıcı, nükleer atık depolama
Sodyum Bor Cevherleri (Üleksit ve Probertit)	Yalıtım cam elyafı, borosilikat camlar, gübre
Tinkal	Rafine borların üretimi (deka-penta), sodyum perborat, susuz boraks, disodyum oktaborat, pentaborat, metaborat,
Borik Asit	Antiseptikler, boralaşımları, nükleer uygulamalar, naylon, yangın geciktiriciler, fotoğrafçılık, tekstil, gübre, katalistler, cam, cam elyaf, emaye, sır, antiseptikler,
Susuz Boraks	Gübreler, cam elyaf, cam, metalurjik curuf yapıcı, emaye- sır, yangın geciktirici, kaynak-lehimcilik,
Sodyum Perborat	Deterjan ve beyazlatıcılar, tekstil, dezenfektan ve bazı diğ macunları
Disodyum Metaborat	Yapıştırıcı, deterjanlar, zirai ilaçlama, fotoğrafçılık, tekstil
Sodyum Pentaborat	Yangın geciktiriciler, gübreler
Rafine Boraks Dekahidrat	Yapıştırıcılar
Rafine Boraks Pentahidrat	Çimento, ilaç ve kozmetikleri, korozyon önleyici, böcek ve mantar zehirleri, elektrolitik rafinasyon, gübreler, yangın geciktiriciler, cam, cam elyafı, böcek ve bitki öldürücü, deri ve tekstil
Disodyum Oktaborat Tetrahidrat	Yangın söndürücüler, gübreler , tarım ilaçları ve ağaç koruyucular

Genellikle ileri teknoloji gerektiren metotlar ile dünyada ticari olarak üretilen ve değişik kullanım alanları olan 100'den fazla özel bor ürünü mevcuttur. Çizelge 3.5'de özel bazı bor kimyasallarının kullanım alanları verilmiştir [22].

Çizelge 3.5. Özel bor kimyasalları kullanım alanları.

Ürün	Kullanım Alanları
Amorf Bor	Askeri Piroteknik
Kristalin Bor	Nükleer Silahlar ve Nükleer Güç Reaktörlerinde Muhafaza
Bor Flamentleri	Havacılık için Kompozitler, Spor malzemeleri için Kompozitler
Bor Halidleri (tuzları)	İlaç Sanayi, Katalistler, Elektronik Parçalar, Bor Flamentleri ve Fiber Optikler
Özel Sodyum Boratlar	Fotoğrafçılık Kimyasalları, Yapıştırıcılar, Tekstil Finishing Bileşikleri, Deterjan ve Temizlik Malzemeleri, Yangın Geciktiricileri, Gübreler ve Zırai Araçlar
Fluoborik Asit	Kaplama Solüsyonları, Fluoborat Tuzlar, Sodyum Bor Hidrürler
Trimetil Borat	Sodyum Bor Hidrürler
Sodyum Bor Hidrürler (Sodyum Borohidrat)	Özel Kimyasalları Saflaştırma, Kağıt Hamurunu Beyazlaştırma, Metal Yüzeylerin Temizlenmesi
Bor Esterleri	Polimerizasyon Reaksiyonları için Katalist, Polimer Stabilizatörleri, Yangın Geciktiricileri

Bor minerallerinin ise oldukça fazla çeşidi vardır. Sayıları 100'e yakındır. Bazı mineraller genellikle her yatakta gözlenirken bazıları ise çok ender olarak gözlenir. Bor mineralleri bünyelerinde değişik oranlarda bor oksit (B_2O_3) içeren mineraller

olup, ülkemizde yaygın olarak bulunan bor mineralleri; tinkal, kolemanit ve üleksit'dir. Dünya kolemanit rezervinin tamamına yakını ülkemizde bulunmaktadır. Ticari ve Türkiye yatakları açısından önemli olan bor mineralleri Çizelge 3.6. verilmiştir [23].

Çizelge 3.6. Ekonomik açıdan önemli bor mineralleri

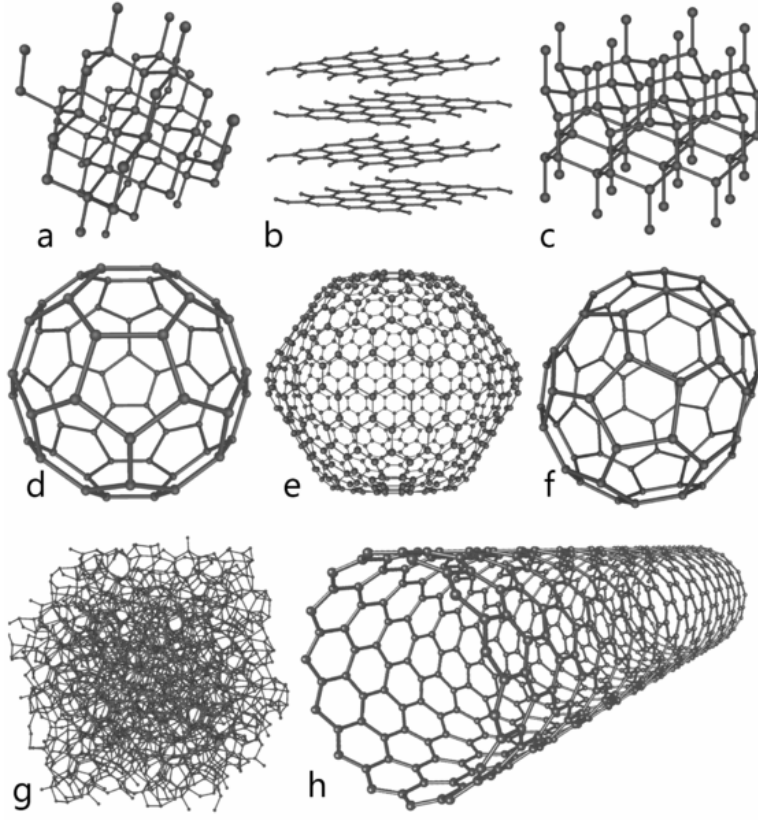
Kimyasal Bileşik	Kimyasal Formül	B ₂ O ₃	H ₂ O	Bulunduğu Yer
Boraks (Tinkal)	Na ₂ B ₄ O ₇ ·10H ₂ O	% 36,5	%47,2	Türkiye(Kırka),ABD, Arjantin
Kernit	Na ₂ B ₄ O ₇ ·4H ₂ O	%51,0	%26,4	ABD,Arjantin
Kolemanit	CaB ₆ O ₁₁ ·5H ₂ O	%50,8	%21,9	Türkiye (Emet, Bigadiç, Kestelek), ABD, Şili
Üleksit	NaCaB ₅ O ₉ ·8H ₂ O	%43,0	%35,6	Türkiye(Bigadiç),ABD
Probertit	NaCaB ₅ O ₉ ·5H ₂ O	%49,6	%25,6	ABD
Szaybelit	MgBO ₂ (OH)	%41,4	%10,7	Kazakistan,Çin
Datolit	CaB ₄ Si ₂ O ₁₂ ·2H ₂ O	%26,7	%5,6	Doğu Rusya, Kazakistan
Sasolit	H ₂ BO ₃	%56,3	%43,7	İtalya

3.2. Karbon

Periyodik tabloda C simgesi ile gösterilen, atom sayısı 6, atom ağırlığı 12,011 olan karbon atomu, periyodik çizelgenin 4A grubunda yer alır. Grup elementlerinin en hafifi ve en az metalik olanıdır. Periyodik çizelgedeki başka birçok grubun tersine, 4A grubu elementleri, kimyasal bakımdan birbirinden çok farklıdır; grubu temsil edici davranışı en az gösteren de karbondur.

3.2.1. Karbon fazları

Aynı maddenin değişik kristal biçimlerine allotrop denir. Elmas ve grafit, karbonun allotroplarıdır. Elmasta her karbon atomu, dört başka karbon atomuna bağlanarak üç boyutlu katı bir yapı oluşturur; grafitte ise karbon atomları, üst üste yığılmış geniş, yassı levhalar oluşturacak biçimde, iki boyutlu düzlemde birbirlerine bağlanmıştır. Bu levhalar birbirlerinin üzerinden kolayca kayar; grafitin iyi bir yağlayıcı olma özelliği de bundan kaynaklanır. Grafitin kağıt üzerinde iz bırakmasının nedeni de, bu ince atom levhalarının grafitten ayrılarak kağıdın üzerinde birikmesidir. Elmas ve grafit dışında karbonun ayrıca altıgen elmas gibi doğal, camsı karbon, fullerenler kümelenmiş elmas nanoçubukları, , doğrusal asetilenik karbon (LAC) gibi yapay allotropları da vardır. Karbonun belirgin, kendilerine özgü bir yapısı yada biçimi olmayan allotropuna amorf karbon denir. Kömür bu biçimdedir [24].



Şekil 3.4. Karbonun bazı allotropları: a) elmas, b) grafit, c) altıgen elmas, d-f) fullerrenler (C_{60} , C_{540} , C_{70}), g) amorf karbon, h) karbon nanotüp

3.2.2. Elmas

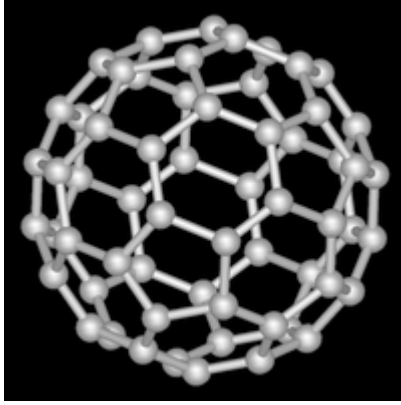


Şekil 3.5. Elmas

Arı elmas, bilinen en sert doğal maddedir. Renksiz ve saydam olmasına karşın, başka minerallerle arılığı bozulduğu zaman, pastel renklerden mat siyaha kadar uzanan çeşitli renklerde bulunabilir. Elmas, kimyasal bakımdan eylemsizdir; ama yüksek

sıcaklıklarda havada yanması sağlanabilir. Isıyı iyi iletmez ve elektrik yalıtkanıdır. Elmasın özellikleri, bütünüyle birbirine kenetlenmiş dörtyüzlü karbon atomlarının oluşturduğu kristal yapısından kaynaklanır; bu atomların her biri, en yakın dört komşusuna ortaklaşa bağlanmıştır. Karbon-karbon bağının olağanüstü dayanıklılığı ve ortaklaşa bağlarla kenetlenmiş yapısı, elmasın sert ve eylemsiz olmasını sağlayan nedenlerdir [24].

3.2.3. Fullerenler



Şekil 3.6. Fulleren

Karbonun yapay allotropları olan Fullerenler, grafit benzeri yapılara sahiptir fakat grafit gibi saf altıgen değil, aynı zamanda beşgen ve hatta bazan yedigen kristaller de içerir. Bu yapı, altıgen kristallerden oluşan ana düzlemin kıvrılarak küreler, elipsoidler ve silindirler oluşturmasına yol açar. Fullerenlerin yapıları ve özellikleri nano malzemeler alanında dev bir araştırma konusudur.

Karbon nanotüpler boş silindir şeklinde bir yapıya sahiptir ve hegzagonal olarak yerleştirilmiş karbon atomlarından oluşmuş bir tabakanın birkaç nano metre çapında bir tüp oluşturacak şekilde dürülmesiyle oluşturulan yapılardır [25-26].

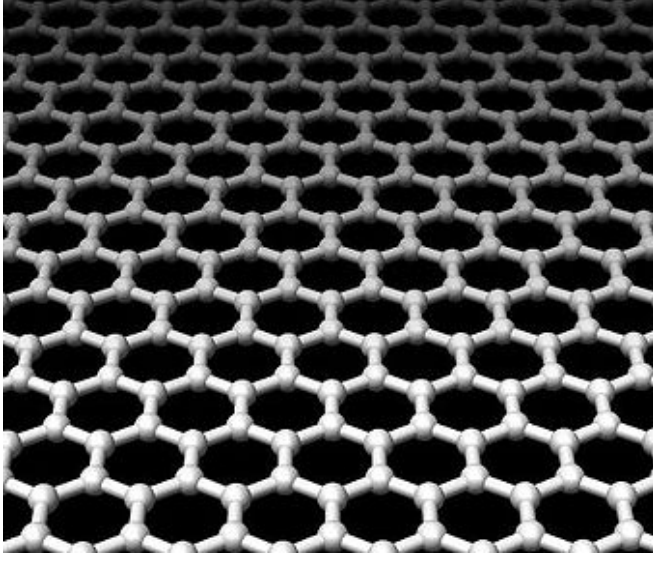
3.2.4. Grafit



Şekil 3.7. Grafit

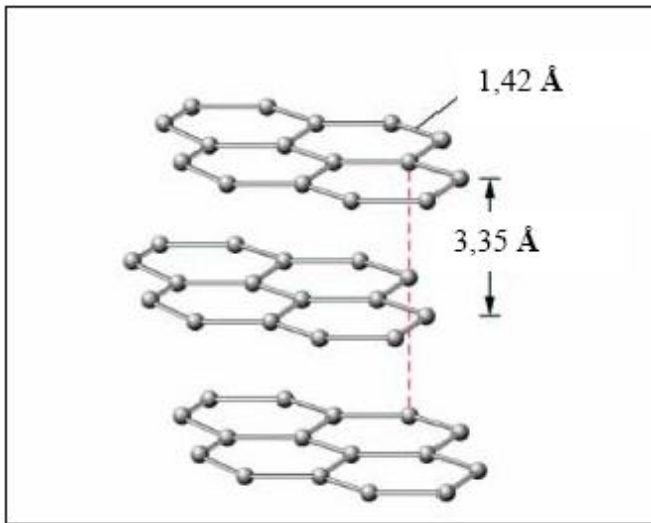
Grafit karbon elementinin hekzagonal kristal yapıya sahip allotropudur. Karbonun diğer allotropu olan elmasın tersine, yumuşak, yağlı, koyu gri ile siyah arası parlak bir rengi ve pul pul bir görünüşü vardır. Grafitte her bir karbon atomu aynı düzlemde bulunan diğer üç atoma altıgen halkalar oluşturacak şekilde bağlanır. Oluşan ağ iki boyutludur ve bu şekilde meydana gelen tabakalar birbirine zayıf Van der Waals kuvveti ile bağlanır. Bu yüzden, tabakalar birbirlerinin üzerinde kolayca kayar. Grafitin erime sıcaklığı 3527°C olduğundan çok yüksek sıcaklıklara dayanabilir, ayrıca çok iyi bir elektrik iletkenidir. Bu nedenle uzay kapsüllerinin ısı kalkanlarının yapımında da grafitten yararlanılmaya başlanmıştır.

İki boyutlu grafit tabakaları Grafen olarak isimlendirilir. Grafen'nin her bir katmanında karbon atomları bir bal peteği yapısında yerleştirilmiştir.



Şekil 3.8. Grafen yüzeyi

Grafen yapısında karbon-karbon bağ uzaklığı yaklaşık olarak 1.42 Å dur. Grafen tabakalarının üst üste gelmesi ile meydana gelen grafitte iki grafen tabakası arasındaki mesafe ise yaklaşık olarak 3.35 Å dur. Grafendeki güçlü karbon bağları ona yeryüzündeki bilinen en sağlam malzeme özelliğini kazandırmıştır. Bununla birlikte grafitteki grafen katmanlar arasındaki bağlar oldukça zayıftır. Kurşun kalemi kağıda sürtüncü bu zayıf bağlar kırılmakta ve kağıda yayılan grafen ve grafit tabakalar yazı izlerini oluşturmaktadır [27].



Şekil 3.9. Grafit'in tabakalar arası yapısı ve atomlar arası mesafesinin gösterimi

3.3. Azot

Azot, periyodik cetvelde N (Nitrojen) simgesi ile gösterilen bir element olup atom numarası 7'dir. Azot bir ametal elementtir. Yaşamımızda çok önemli bir yer teşkil eder. Azot'un elektro-negatiflik değeri 3,04 tür. Dış yörüngesinde beş elektron bulunur ve pek çok bileşiğinde 3 değerlidir. Saf azot, oda sıcaklığında renksiz ve reaktif olmayan bir gazdır. Dünya atmosferinin %78.08'ini oluşturur, 77°K de yoğunlaşır ve 63 °K de donar. Sıvı azot iyi bilinen bir dondurucudur.

Azot gazı, sıvı azotun ısıtarak buharlaşmaya bırakılmasıyla kolayca elde edilebilir. Çok geniş kullanım alanları olup, oksidasyonun istenmediği ortamlarda hava yerine kullanılabilir. Transistör, diyot ve tümlşik devre gibi elektronik bileşenlerin üretiminde, paslanmaz çelik üretiminde, güvenlik amacıyla sıvı patlayıcıların üzerini örtmek için, paketlenmiş gıdaların tazeliğini korumak için, inert, nemsiz ve oksitleyici olmayan özelliklerinden dolayı otomobil ve uçak tekerleklerinin dolumunda, paketlenmiş gıdaların tazeliğinin korunmasında azot gazı kullanılır. Sıvı azot ise suyun donma noktasının çok altındaki sıcaklıklarda kalabilme özelliğine (77 °K, -196 °C veya -20°F) sahiptir. Bu özelliğiyle bilgisayar donanımlarının soğutma sistemlerinde soğutucu olarak kullanımında, yüksek hassasiyetteki algılayıcılar ve düşük gürültü seviyeli amplifikatörlerde soğutucu olarak, canlı dokuların, üreme hücrelerinin ve diğer biyolojik örnek ve malzemelerin dondurularak korunması gibi çok değişik alanlarda kullanımını mümkün kılar [24-28].

4. HESAPLAMALAR

Bu çalışmada yoğunluk fonksiyonu teorisi ile grafit içinde değişik atomların (B,C, N) tutunmasıyla özellikle borun (B) farklı yerlere tutunması sonucu oluşan yapılar incelendi. Yapmış olduğumuz hesaplamalarda [1] nolu referans kaynak alındı.

Hesaplamalarımız Castep paket programı ile gerçekleştirildi. Yapılan hesaplamalar Ultrasoft sözde potansiyel kullanılarak, LDA (Local Density Approximation) yaklaşımıyla, CA-PZ değiş tokuş korelasyon fonksiyonu hesaba katılarak gerçekleştirildi. Hesaplamalarımız yapılırken düzlem dalga kesilim enerjisi 310 eV seçildi.

Geometri optimizasyonunda BFGS (Brodyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) minimizasyon şeması kullanıldı. Geometri optimizasyonu için tolerans değerleri ise; toplam enerji değişimi 5×10^{-6} eV/atom, maksimum iyonik Hellmann-Feynmann değişimi 0,01 eV/Å, maksimum basınç değişimi 0,02 GPa ve maksimum iyonik yer değiştirme 5×10^{-4} Å şeklinde ayarlandı.

4.1. Grafit (C₄)-(1×1×1) Kristal Yapısının İncelenmesi

Çalışmamızda yukarıda verilen parametreler kullanılarak, 4 karbon atomu içeren grafit yapısı optimize edildi (2 Layers). Brillouin bölge örnekleme 12×12×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Kristal sistemi triklinikdir. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen C₄ (grafit) kristal yapısının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C), durum yoğunluğu, elektron yoğunluğu, toplam enerjisi ve oluşum (formation) enerjisi hesaplandı.

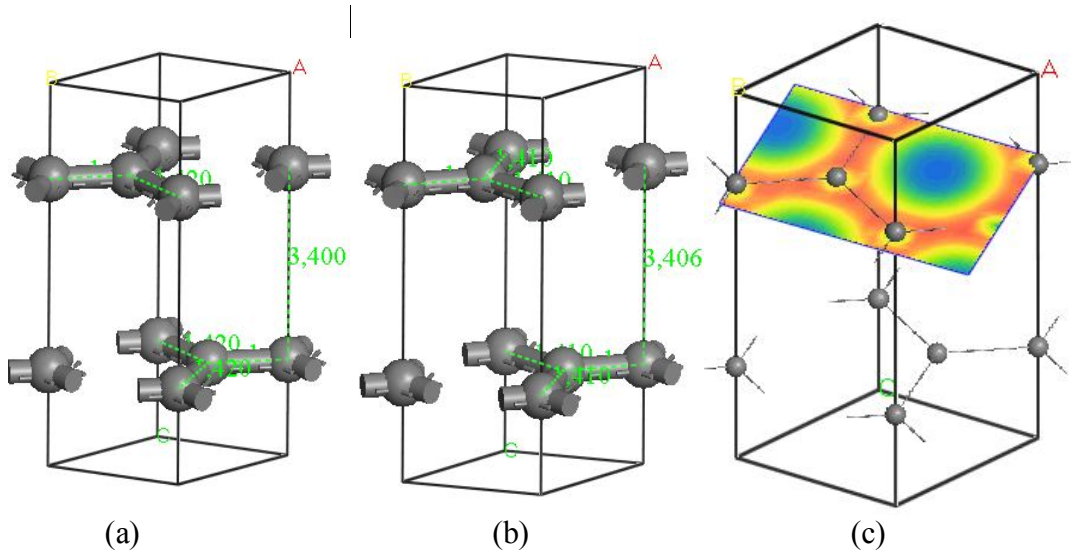
Grafit (C₄) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.1’de verildi. Şekil 4.1’de ise optimize öncesi ve sonrası gösterimi, elektron yoğunluğu verildi.

Şekillerde koyu (gri) renk ile gösterilen elementler karbon elementleridir.

Çizelge 4.1. Grafit (C_4) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri

Grafit(C_4)	a (Å)	b(Å)	c(Å)	α	β	γ
Optimizasyon öncesi	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0
Optimizasyon sonrası	2,44 2,45*	2,44 2,45*	6,81 6,73*	90,0	90,0	120,0

*[29]'da verilen değerler ile yapılan hesaplamadan elde edilen sonuçları göstermektedir. Kesilim enerjisi 300 eV olarak alınmıştır.



Şekil 4.1. Grafit (C_4) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre Yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

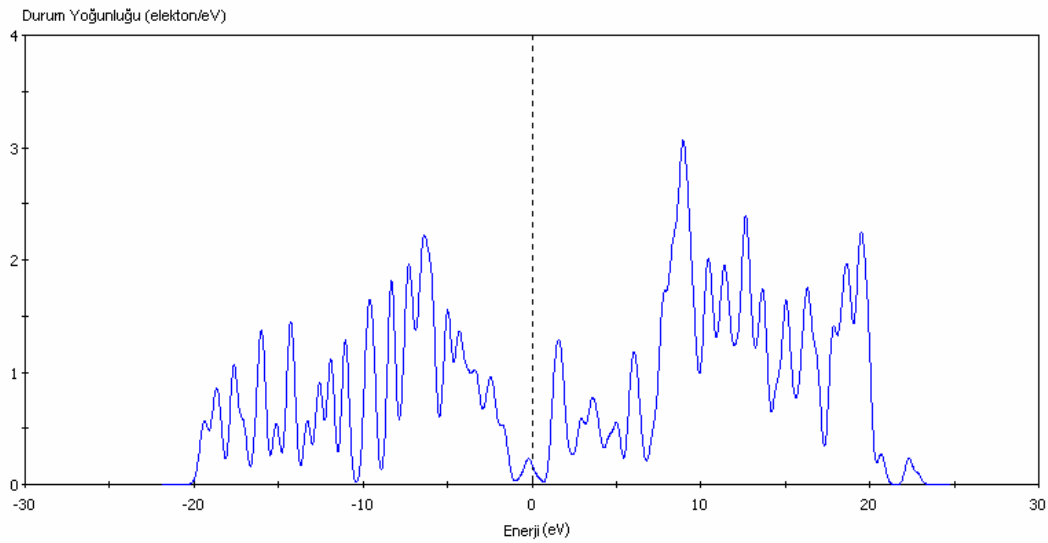
Şekil 4.1'de elektron yoğunluk haritası gösterilmiştir. Burada kırmızı bölgeler, yüksek elektron yoğunluğunu göstermektedir, mavi bölgeler ise düşük elektron yoğunluğunu veya elektron yoğunluğu olmayan bölgeleri göstermektedir.

Geometri optimizasyonu yapılan Grafit (C_4) kristal yapısının C-C atomları arasındaki bağ uzunlukları, iki tabaka arasındaki (L1-L2) uzaklık hesaplandı ve Çizelge 4.2’ verildi. (Tüm C-C atomları arasındaki mesafeler aynı olduğu için çizelgede yalnızca bir tanesi verildi).

Çizelge 4.2. Grafit (C_4) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, iki tabaka arası mesafe (L1-L2)

Grafit(C_4)	C-C (Å)	L1-L2 (Å)
Optimizasyon öncesi	1,42	3,40
Optimizasyon sonrası	1,41	3,41

Grafit (C_4) kristalinin durum yoğunluğu hesaplandı. Fermi seviyesi sıfır enerji seviyesi olarak seçildi ve şekillerde sıralı noktalar olarak gösterildi. Grafit (C_4) kristal yapısı için hesaplanmış toplam durum yoğunluğu Şekil 4.2’de verilmiştir.



Şekil 4.2. Grafit (C_4) kristal yapısının durum yoğunluğu

Valans bandının maksimumu ile iletim bandının minimumu arasındaki enerji farkı yalıtkan ve yarı iletken malzemelerin yasak band aralığını verir.

Şekil 4.2'den Grafit (C_4) kristal yapısının durum yoğunluğu incelendiğinde, yasak enerji aralığının olmadığı görülmektedir buda yapının iletken olduğunu gösterir.

Geometrik optimize edilen Grafit (C_4) kristal yapısının toplam enerjisi hesaplanmış ve Çizelge 4.3'de toplam enerjisi ve oluşum (formation) enerjisi verilmiştir.

Çizelge 4.3. Grafit (C_4) kristal yapısının toplam enerjisi (E_n), oluşum (formation) enerjisi(E_f)

Kristal yapısı	E_n (eV)	E_f (eV)
Grafit(C_4)	-622,141 -622,086*	-40,643

*[29]'da verilen değerleri göstermektedir.

4.2. Grafit (C_4)-(1×1×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan Farklı Formlarının İncelenmesi

Grafit (C_4)-(1×1×1) yapısı içinde bor (B) atomunun farklı yerlerde tutunmasıyla oluşan A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) formları optimize edildi. Brillouin bölge örnekleme 12×12×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen BC_4 yapısının ve formlarının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C, B-C), durum yoğunlukları, elektron yoğunlukları ve toplam enerjileri hesaplandı.

Bütün şekillerde koyu (gri) renk ile gösterilen elementler karbon, açık (pembe) renk ile gösterilenler ise bor elementleridir.

Oluşan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri

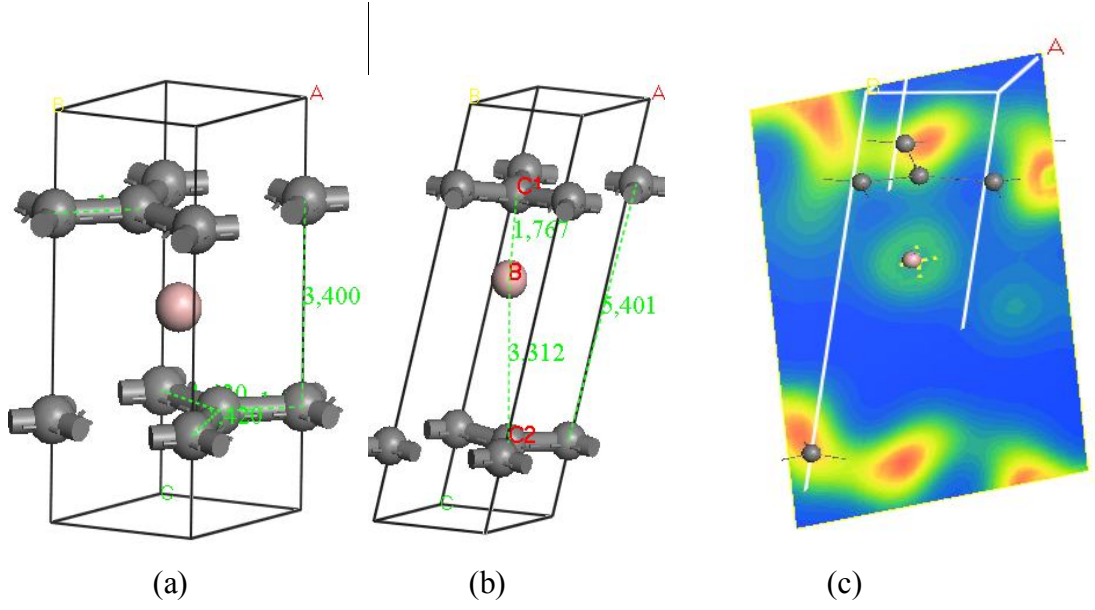
Çizelge 4.4 ve Çizelge 4.5’de verildi. Şekil 4.3-Şekil 4.7’de ise sırasıyla optimize öncesi-sonrası birim hücre ve elektron yoğunluğu gösterimi verildi.

Çizelge 4.4. Oluşan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) geometri optimizasyon öncesi birim örgü Parametreleri

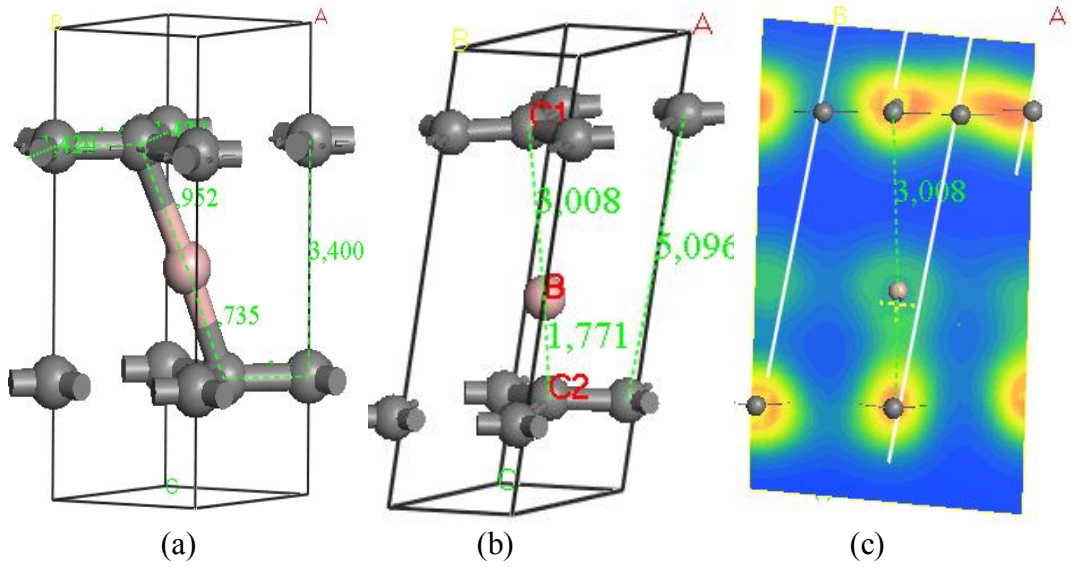
Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
A1 (BC_4)	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0
A2 (BC_4)	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0
A3 (BC_4)	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0
A4 (BC_4)	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0
A5(B_2C_2)	2,46	2,46	6,80	90,0	90,0	120,0

Çizelge 4.5. Oluşan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) geometri optimizasyon sonrası birim örgü Parametreleri

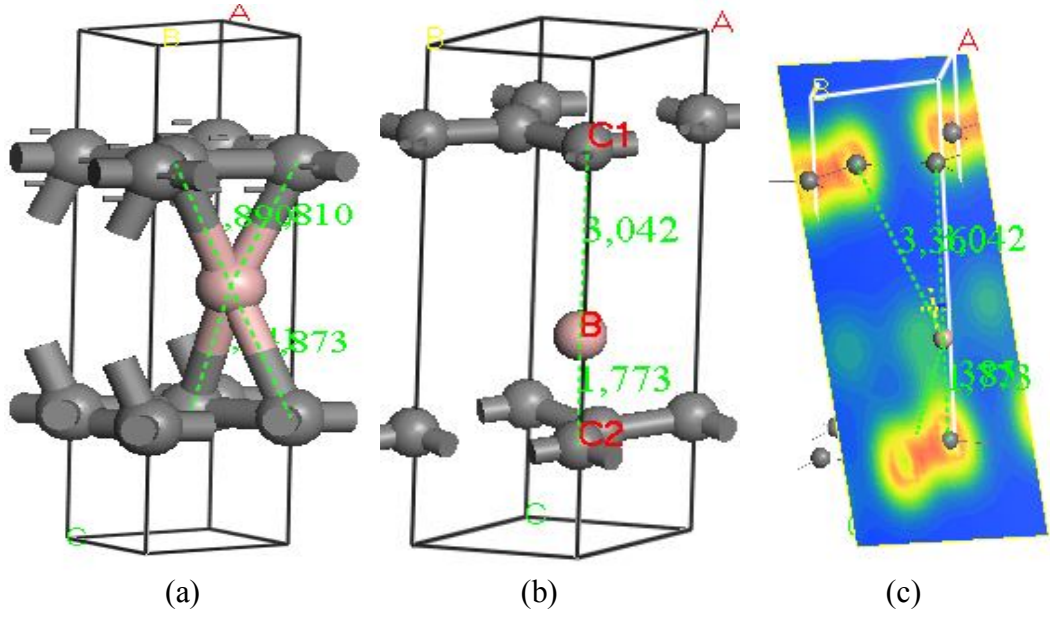
Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
A1 (BC_4)	2,44	2,43	8,70	70,38	97,76	119,98
A2 (BC_4)	2,44	2,44	8,18	80,82	100,42	119,95
A3 (BC_4)	2,43	2,44	8,06	89,59	90,09	119,98
A4 (BC_4)	2,44	2,44	7,41	90,25	89,75	120,04
A5(B_2C_2)	2,76	2,76	4,80	56,34	123,66	121,26



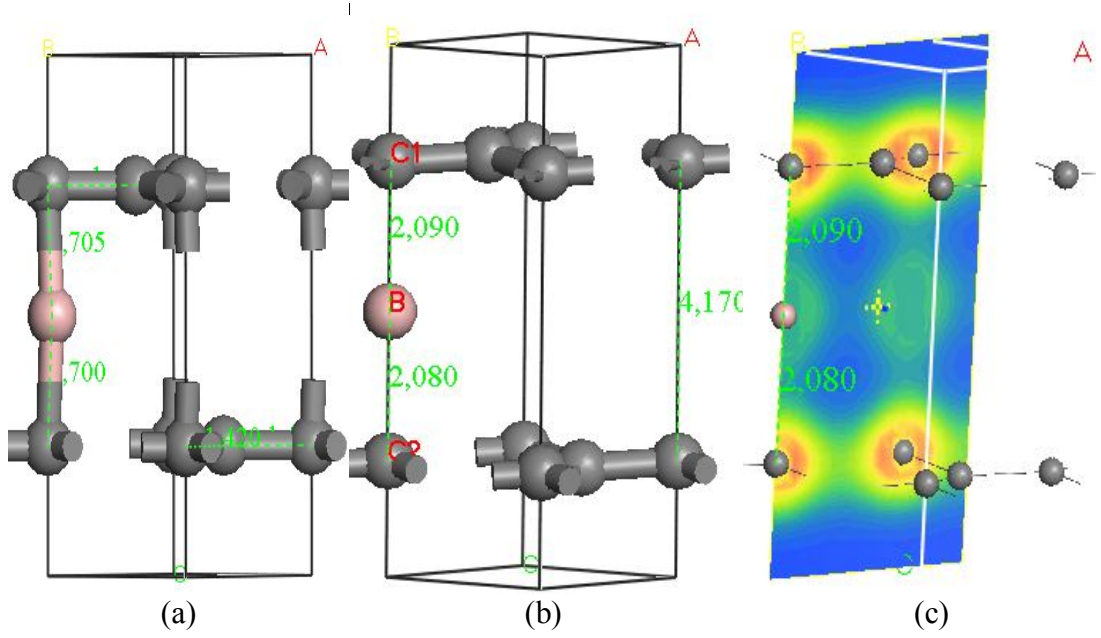
Şekil 4.3. A1 (BC₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



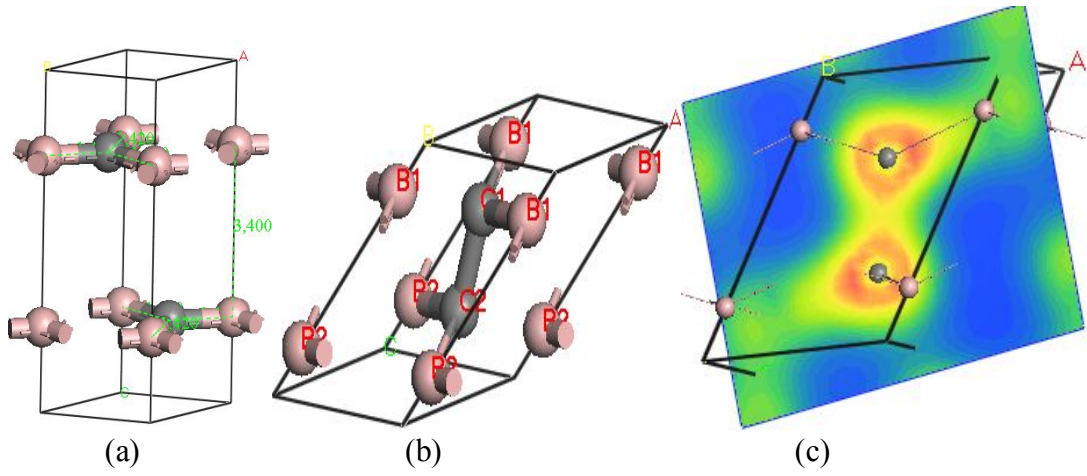
Şekil 4.4. A2 (BC₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.5. A3 (BC₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.6. A4 (BC₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.7. Oluşan A5 (B_2C_4) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

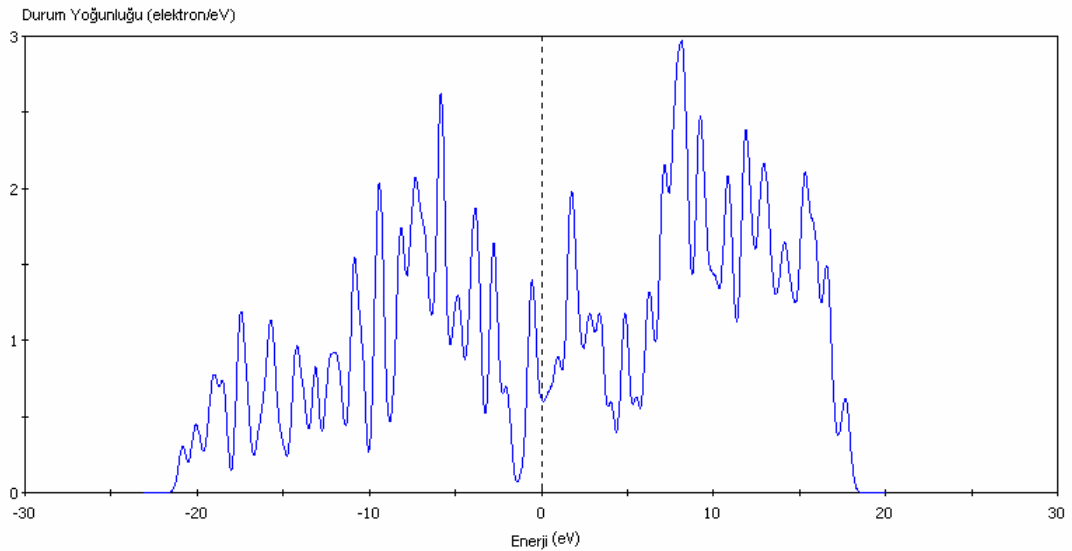
Şekil 4.3.-Şekil 4.7’de elektron yoğunluk haritaları görülmektedir. Kırmızı bölgeler, yüksek elektron yoğunluğunu göstermekte, mavi bölgeler ise düşük elektron yoğunluğunu veya elektron yoğunluğu olmayan bölgeleri göstermektedir. Kimyasal bağların yapısını belirleyebilmek için elektron yoğunluk haritaları önemlidir. Bağlar, yapıların sertliğini, kuvvetini araştırılmasını sağlar. Kovalent bağlar, iyonik ve metalik bağlardan daha kuvvetlidir ve sert bir yapıdadır. Elektron yoğunluğu verilen yapıların kırmızı bölgelerinde kovalent bağlar oluşmaktadır.

Geometri optimizasyonu yapılan BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2), Bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları (C-C, C-B), tabakalar arasındaki (L1-L2) uzaklıkları hesaplandı ve Çizelge 4.6’ da verildi.

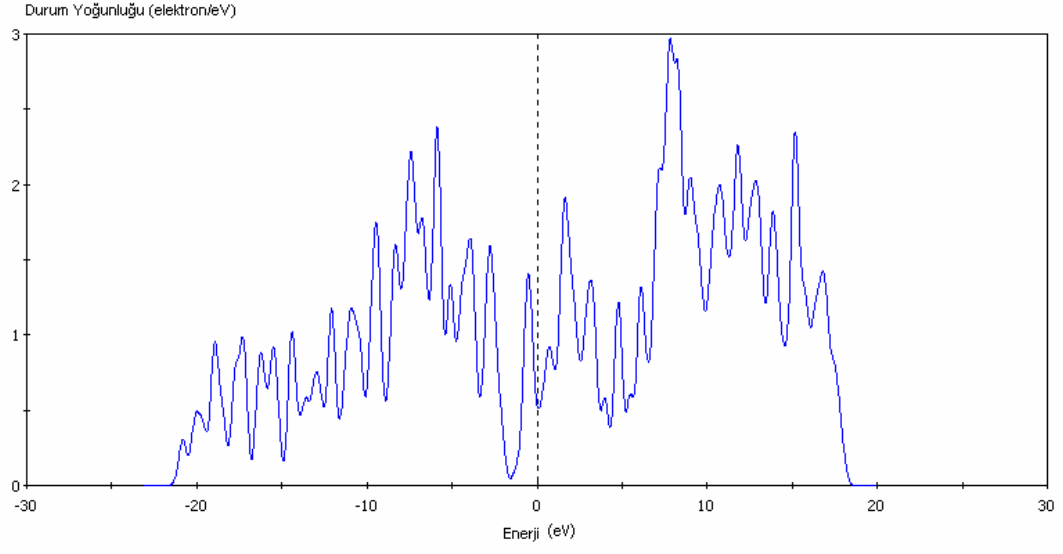
Çizelge 4.6. BC₄ yapısının farklı formlarının A1 (BC₄), A2 (BC₄), A3 (BC₄), A4 (BC₄), A5 (B₂C₂), Bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafeleri (L1-L2)

Farklı Formlar	B-C1 (Å)	B-C2 (Å)	C-C (Å)	B1-C1 (Å)	B2-C2 (Å)	C1-C2 (Å)	L1-L2 (Å)
A1 (BC ₄)	1,767	3,312	1,414	-	-	-	5,401
A2 (BC ₄)	3,008	1,771	1,415	-	-	-	5,096
A3 (BC ₄)	3,042	1,773	1,414	-	-	-	4,815
A4 (BC ₄)	2,090	2,080	1,409	-	-	-	4,170
A5 (B ₂ C ₄)	-	-	-	1,589	1,589	1,585	2,992

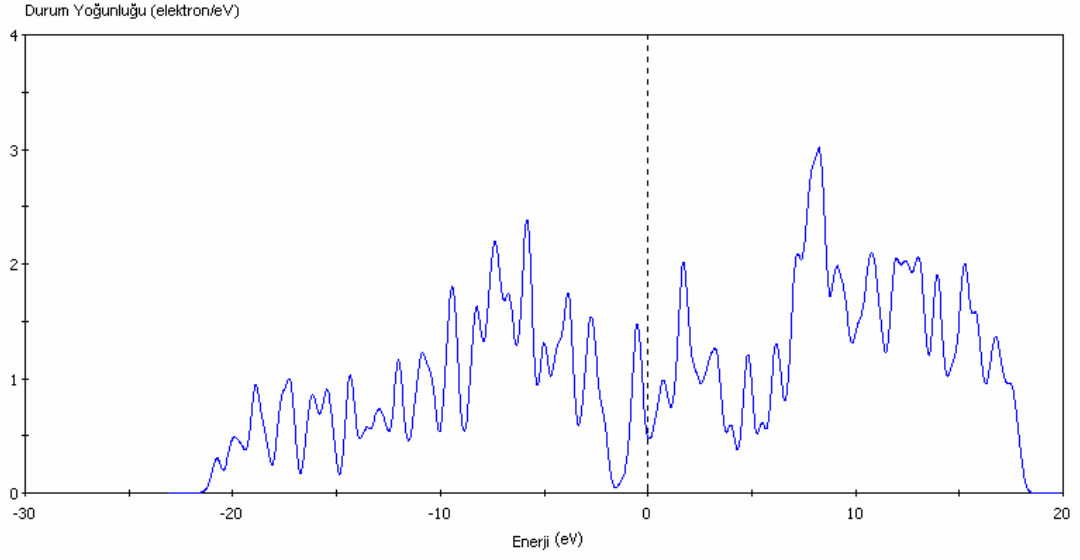
Geometri optimizasyonu yapılan BC₄ yapısının farklı formlarının A1 (BC₄), A2 (BC₄), A3 (BC₄), A4 (BC₄), A5 (B₂C₂) durum yoğunlukları hesaplandı. Fermi seviyesi sıfır enerji seviyesi olarak seçildi ve şekillerde sıralı noktalar olarak gösterildi. Farklı formlar için hesaplanmış toplam durum yoğunlukları Şekil 4.8-Şekil 4.12’de verilmiştir.



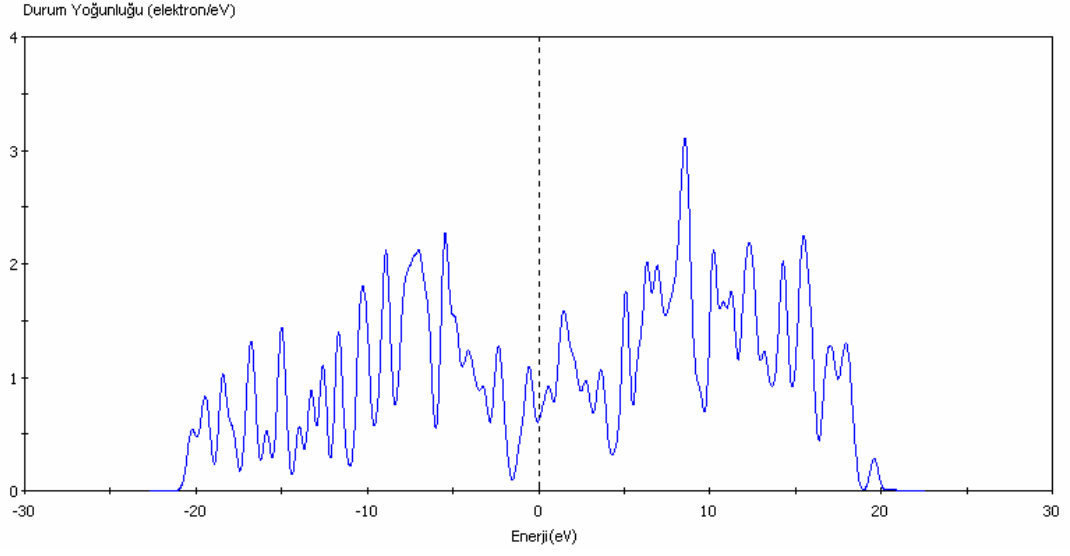
Şekil 4.8. A1 (BC₄) yapısının durum yoğunluğu



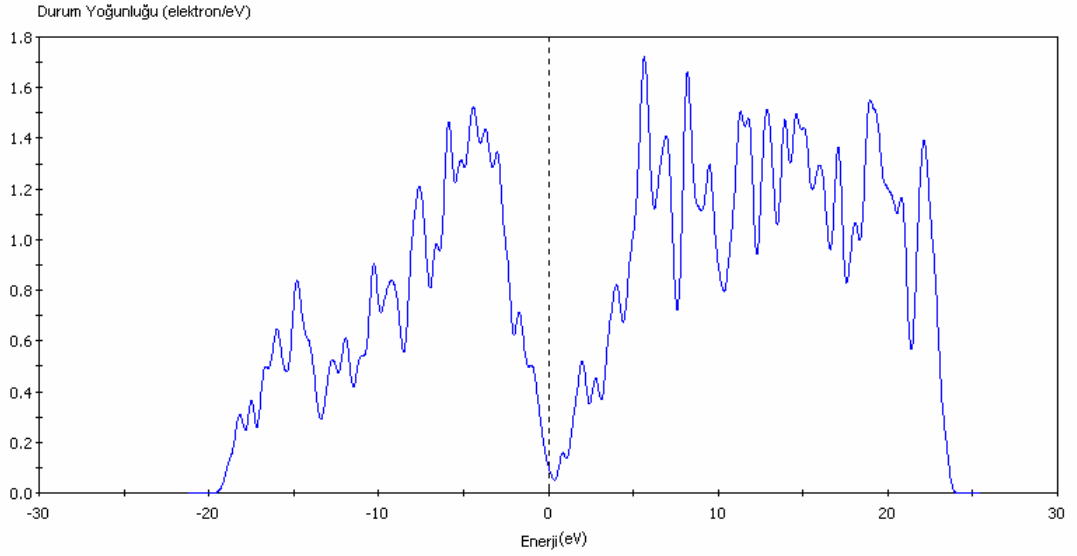
Şekil 4.9. A2 (BC₄) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.10. A3 (BC₄) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.11. A4 (BC_4) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.12. A5 (B_2C_4) yapısının durum yoğunluğu

Şekil 4.8-Şekil 4.12'deki toplam durum yoğunluklar incelendiğinde, farklı formlardaki yapıların sıfır enerji seviyesi seçilen Fermi seviyesinde bulunmadıklarından iletken yapılardır.

Geometrik optimize edilen BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) toplam enerjisi, oluşum (formation) enerjisi hesaplanmıştır. Çizelge 4.7’de toplam enerji (E_n) ve oluşum (formation) enerji (E_f) verilmiştir.

Çizelge 4.7. BC_4 yapısının farklı formlarının A1 (BC_4), A2 (BC_4), A3 (BC_4), A4 (BC_4), A5 (B_2C_2) toplam enerji (E_n), oluşum (formation) enerji (E_f)

Farklı Formlar	$E_n(eV)$	$E_f(eV)$
A1 (BC_4)	-696,368	-44,652
A2 (BC_4)	-696,376	-44,659
A3 (BC_4)	-696,379	-44,662
A4 (BC_4)	-696,322	-44,605
A5 (B_2C_4)	-465,356	-34,169

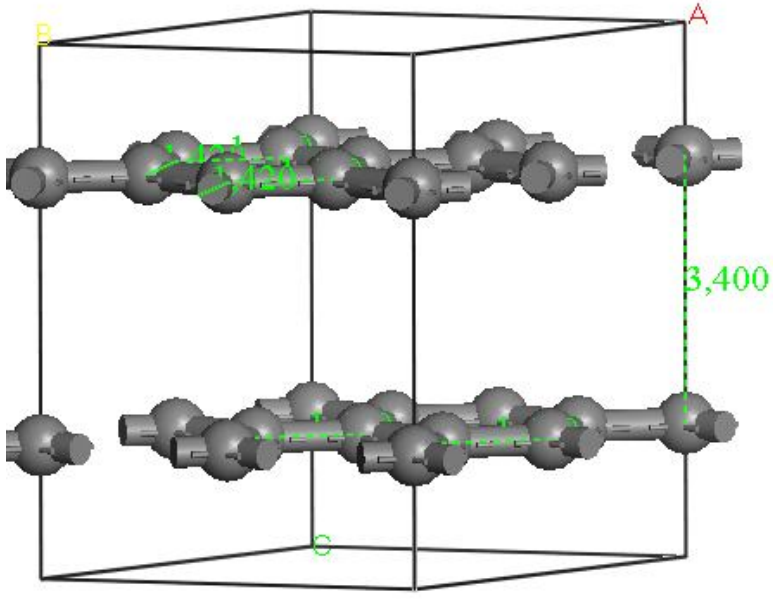
4.3. Grafit (C₁₆)-(2×2×1) Kristal Yapısının İncelenmesi

16 karbon atomu içeren grafit (C₁₆) yapısı optimize edildi. 8 C atomu alt tabakada 8 C atomu üst tabakada (2 Layers). Brillouin bölge örnekleme 6×6×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Kristal sistemi ise triklinik. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen C₁₆ (grafit) kristal yapısının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C), durum yoğunluğu, elektron yoğunluğu, toplam enerjisi hesaplandı.

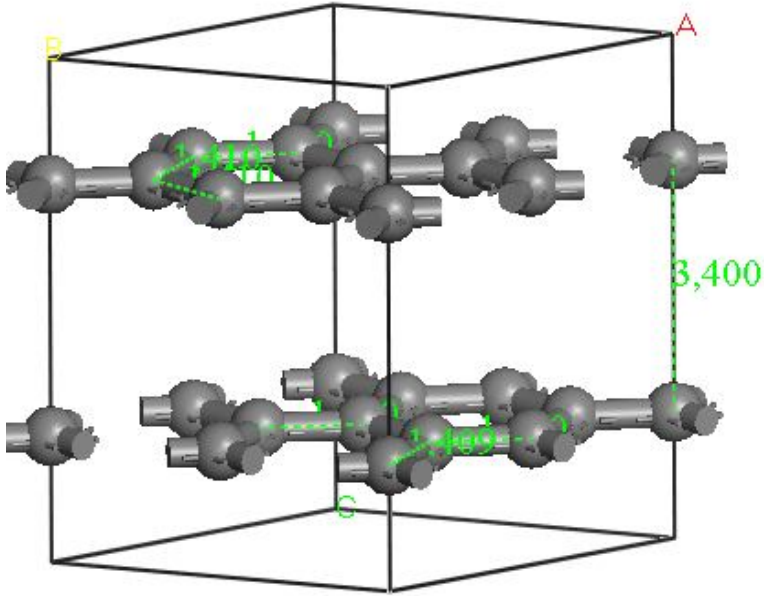
Grafit (C₁₆) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.8'de, optimize öncesi ve sonrası gösterimi, elektron yoğunluğu gösterimi ise Şekil 4.13'da verildi.

Çizelge 4.8. Grafit (C₁₆) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri

Grafit(C ₁₆)	a (Å)	b(Å)	c(Å)	α	β	γ
Optimizasyon öncesi	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
Optimizasyon sonrası	4,88	4,88	6,80	90,0	90,0	120,0

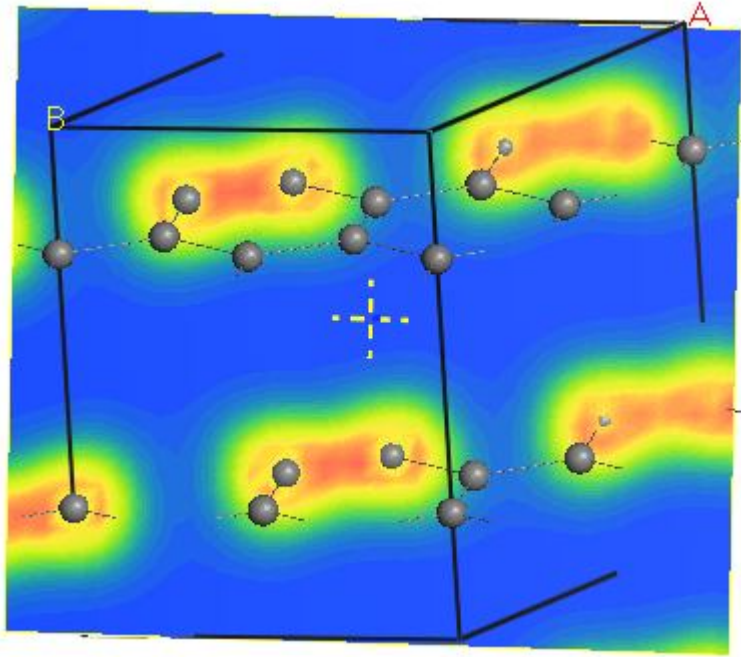


(a)



(b)

Şekil 4.13. Grafit (C_{16}) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



(c)

Şekil 4.13. (Devam) Grafit (C_{16}) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

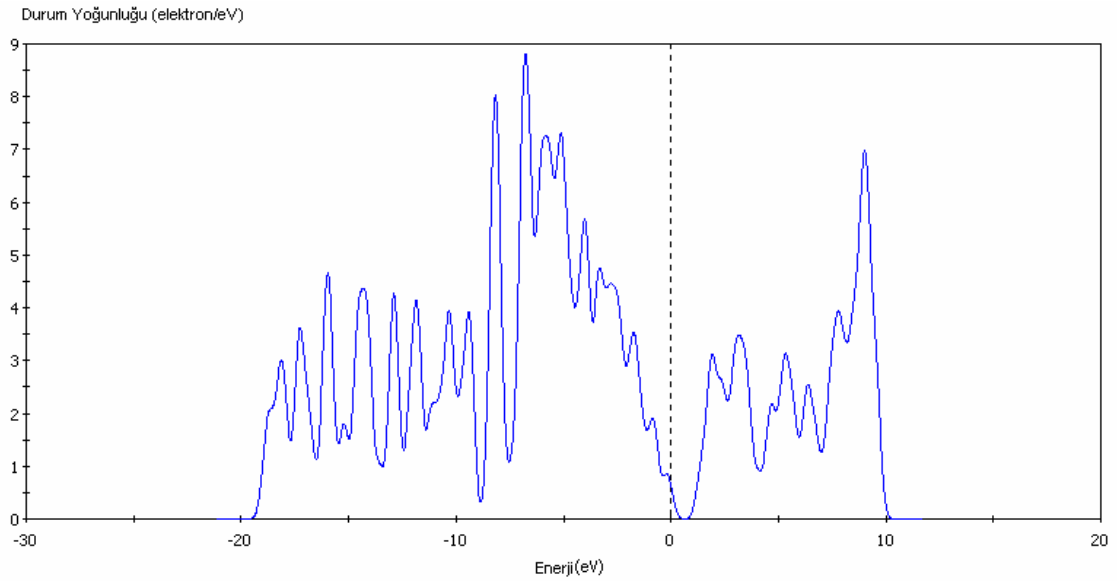
Şekil 4.13’de elektron yoğunluk haritasında kırmızı bölgelerde C-C bağları arasında yüksek elektron yoğunluğunu görülmektedir ve kovalent bağlar oluşmaktadır, mavi bölgeler ise elektron yoğunluğunun az veya olmadığını gösterir.

Grafit (C_{16}) kristal yapısının C-C atomları arasındaki bağ uzunlukları, iki tabaka arasındaki (L1-L2) uzaklık hesaplandı ve Çizelge 4.9’da verildi. (Tüm C-C atomları arasındaki mesafeler aynı olduğu için çizelgede yalnızca bir tanesi verildi).

Çizelge 4.9. Grafit (C_{16}) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve optimizasyon sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Grafit(C_4)	C-C (Å)	L1-L2 (Å)
Optimizasyon öncesi	1,42	3,40
Optimizasyon sonrası	1,41	3,40

Grafit (C_{16}) kristal yapısının toplam durum yoğunluğu Şekil 4.14’de verildi. Geometrik optimize edilen Grafit (C_{16}) kristal yapısının toplam enerjisi, oluşum enerjisi hesaplandı ve Çizelge 4.10’da toplam enerjisi, oluşum enerjisi verildi.



Şekil 4.14. Grafit (C_{16}) kristal yapısının durum yoğunluğu

Çizelge 4.10. Grafit (C_{16}) kristal yapısının toplam enerjisi (E_n) ve oluşum enerjisi(E_f)

Kristal yapı	E_n (eV)	E_f (eV)
Grafit(C_{16})	-2488,558	-162,567

4.4. Grafit (C_{16})-(2×2×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan BC_{16} Yapısının Farklı Formlarının ve C Atomu Tutunmasıyla Oluşan Formunun İncelenmesi

Benzer şekilde Grafit (C_{16})-(2×2×1) yapısı içinde bor (B) atomunun farklı yerlerde tutunmasıyla oluşan B1 (BC_{16}), B2 (BC_{16}), B3 (BC_{16}), B4 (BC_{16}), B5 (BC_{16}), B6 (B_2C_{14}) yapıları optimize edildi. Karbon atomunun yerleştirilmesiyle oluşan B7 (C_{17}) yapısı da optimize edildi. Brillouin bölge örnekleme 6×6×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen BC_{16} yapısının ve formlarının, C_{17} yapısının, birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C, B-C), durum yoğunlukları, elektron yoğunlukları ve toplam enerjileri hesaplandı.

Şekillerde koyu (gri) renk ile gösterilen elementler karbon, açık (pembe) renk ile gösterilenler ise bor elementidir.

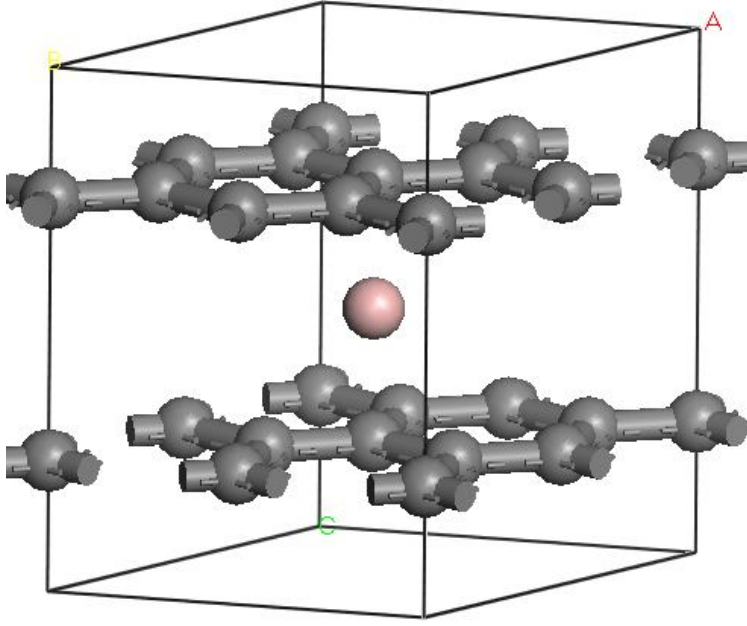
BC_{16} yapısının farklı formlarının B1 (BC_{16}), B2 (BC_{16}), B3 (BC_{16}), B4 (BC_{16}), B5 (BC_{16}), B6 (B_2C_{14}), B7 (C_{17}) yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.11 ve Çizelge 4.12’de verildi. Şekil 4.14-Şekil 4.20’de ise sırasıyla optimize öncesi ve sonrası birim hücre, elektron yoğunluğu gösterimi verildi.

Çizelge 4.11. B1 (BC₁₆), B2 (BC₁₆), B3 (BC₁₆), B4 (BC₁₆), B5 (BC₁₆), B6 (B₂C₁₄), B7 (C₁₇) yapılarının geometri optimizasyon öncesi birim örgü parametreleri

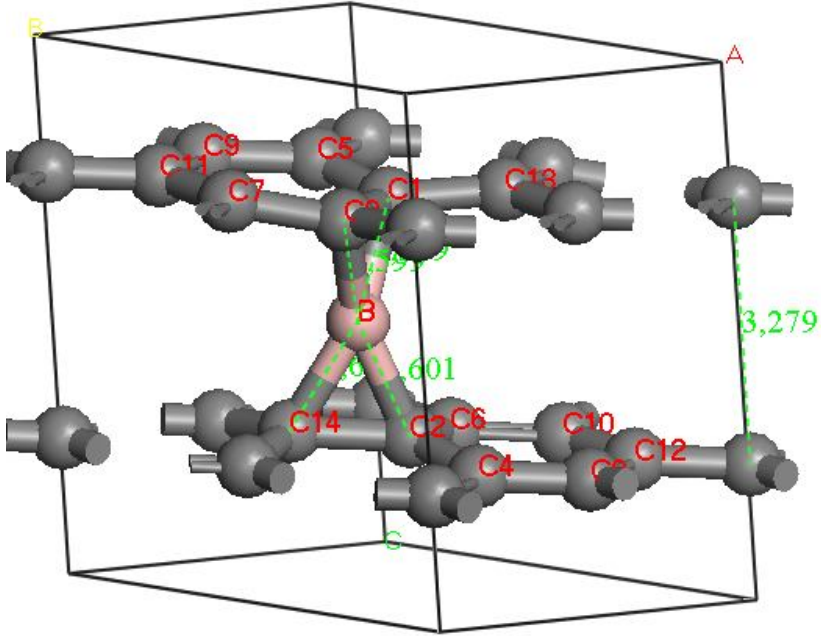
Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
B1 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B2 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B3 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B4 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B5 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B6 (B ₂ C ₁₄)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0
B7 (C ₁₇)	4,92	4,92	6,80	90,0	90,0	120,0

Çizelge 4.12. B1 (BC₁₆), B2 (BC₁₆), B3 (BC₁₆), B4 (BC₁₆), B5 (BC₁₆), B6 (B₂C₁₄), B7 (C₁₇) yapılarının geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri

Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
B1 (BC ₁₆)	4,94	4,92	6,63	90,62	79,50	119,89
B2 (BC ₁₆)	4,92	4,92	6,87	108,20	71,80	119,71
B3 (BC ₁₆)	4,94	4,94	6,56	82,15	97,92	120,19
B4 (BC ₁₆)	4,99	4,99	6,43	83,65	97,29	120,50
B5 (BC ₁₆)	4,94	4,93	6,46	89,16	87,24	119,90
B6 (B ₂ C ₁₄)	4,99	4,99	6,54	90,0	90,0	119,95
B7 (C ₁₇)	4,91	4,90	7,96	93,85	89,88	120,10

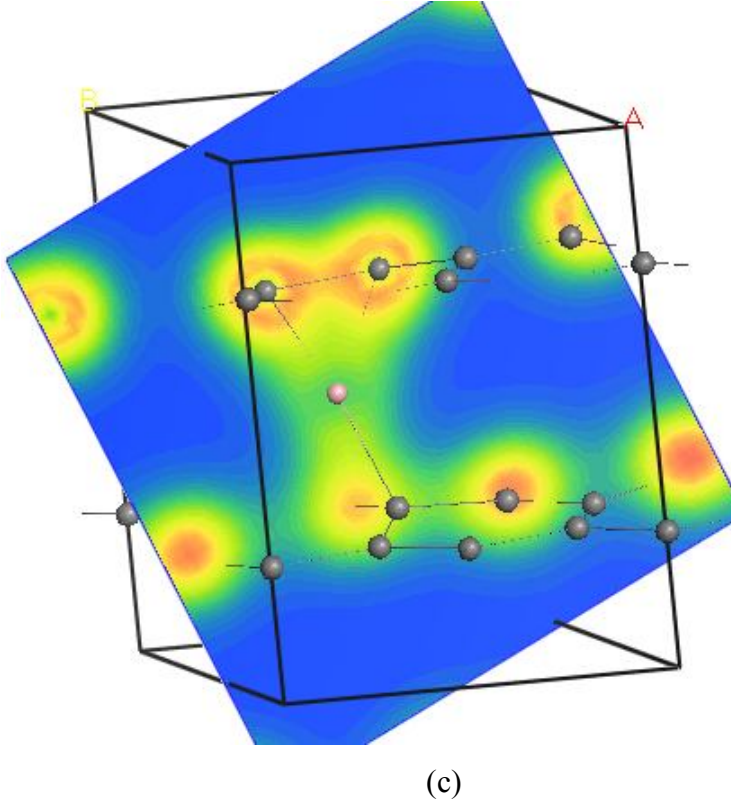


(a)

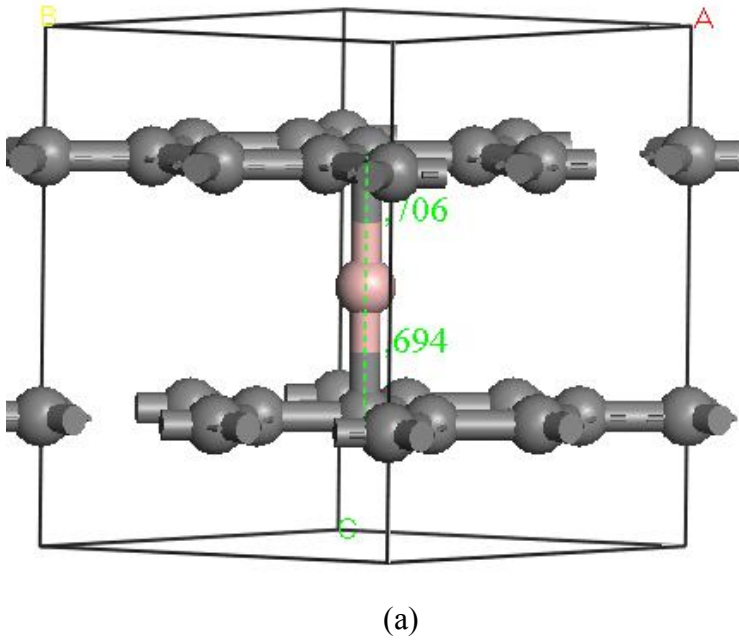


(b)

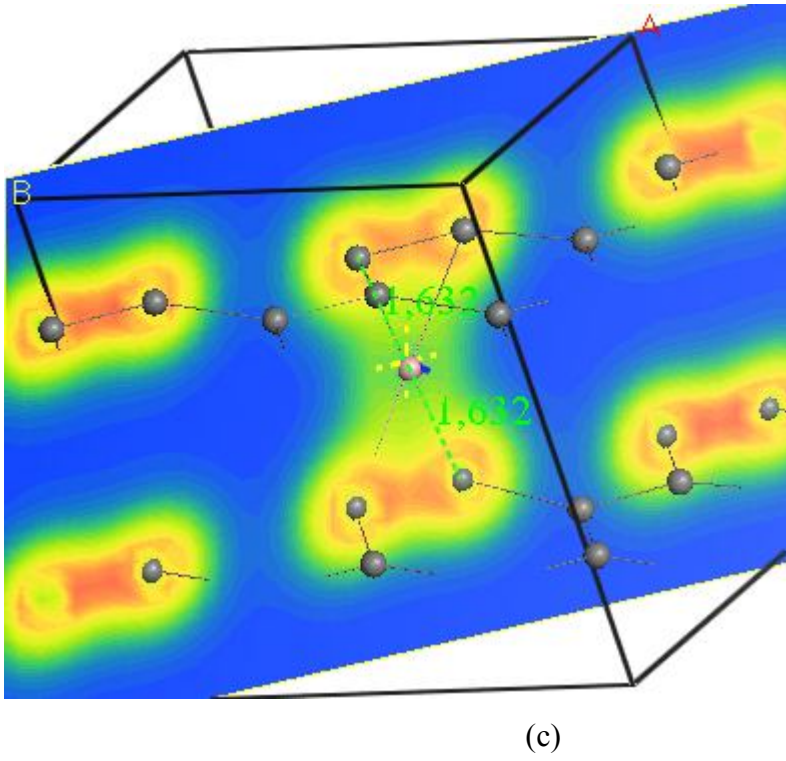
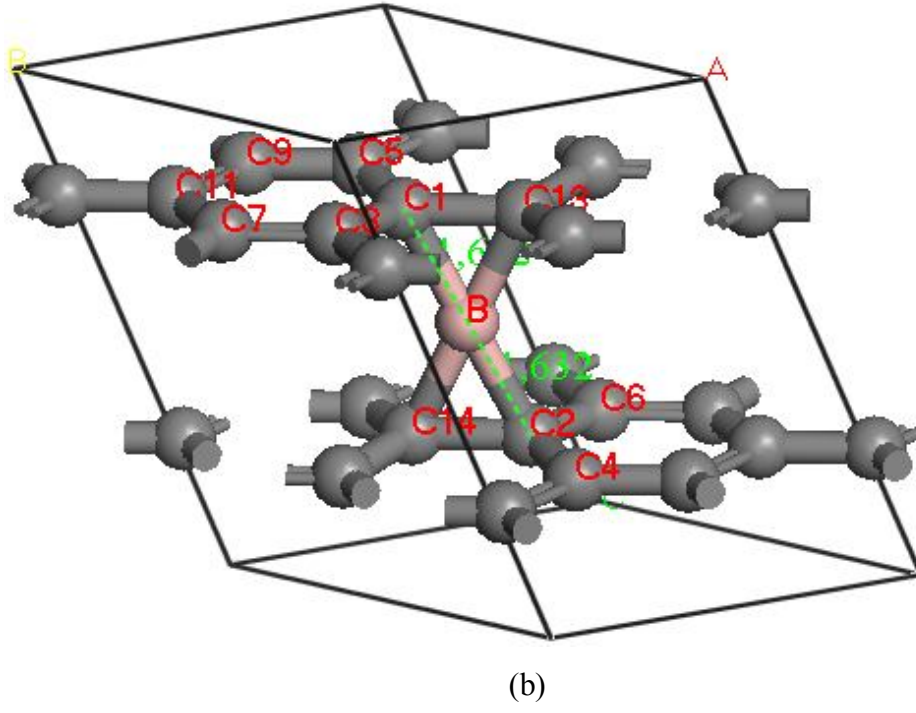
Şekil 4.15. B1 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



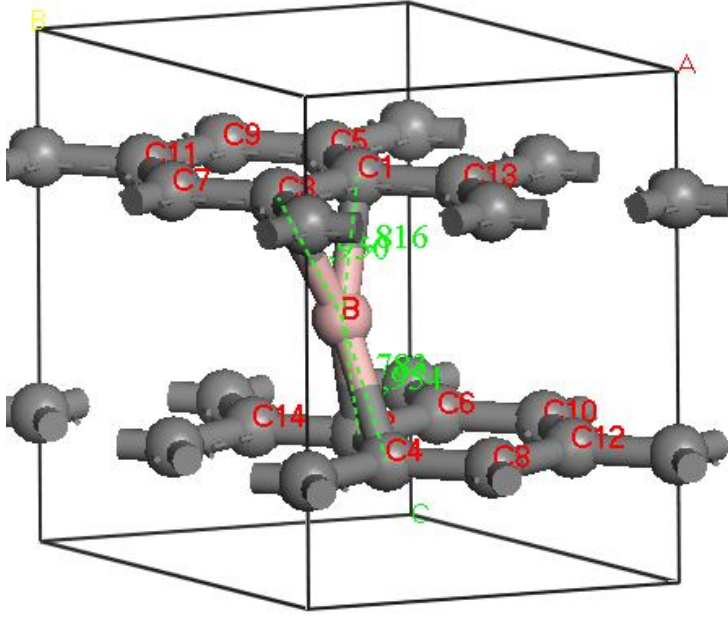
Şekil 4.15. (Devam) B1 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



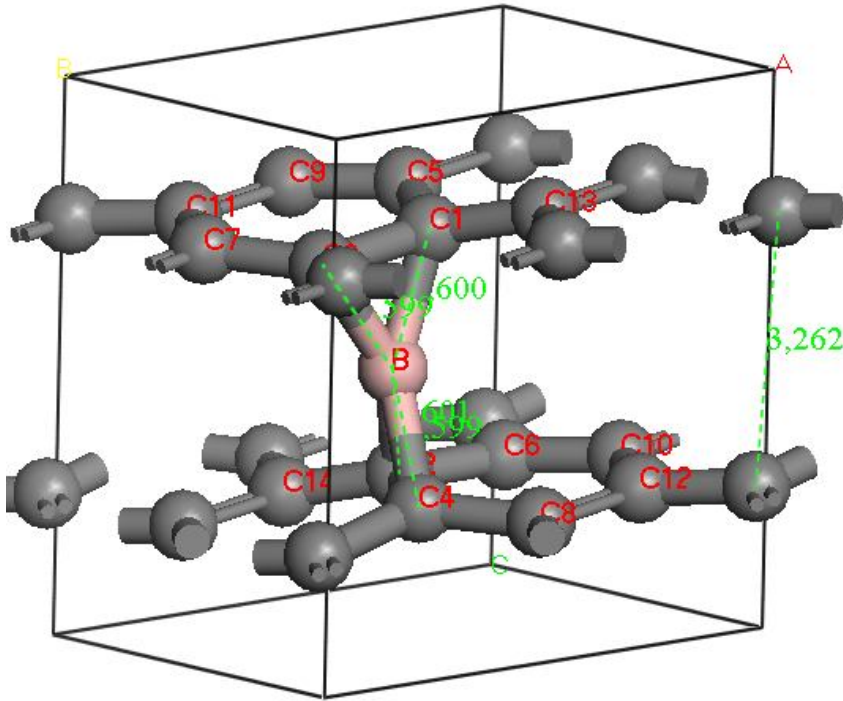
Şekil 4.16. B2 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.16. (Devam)B2 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

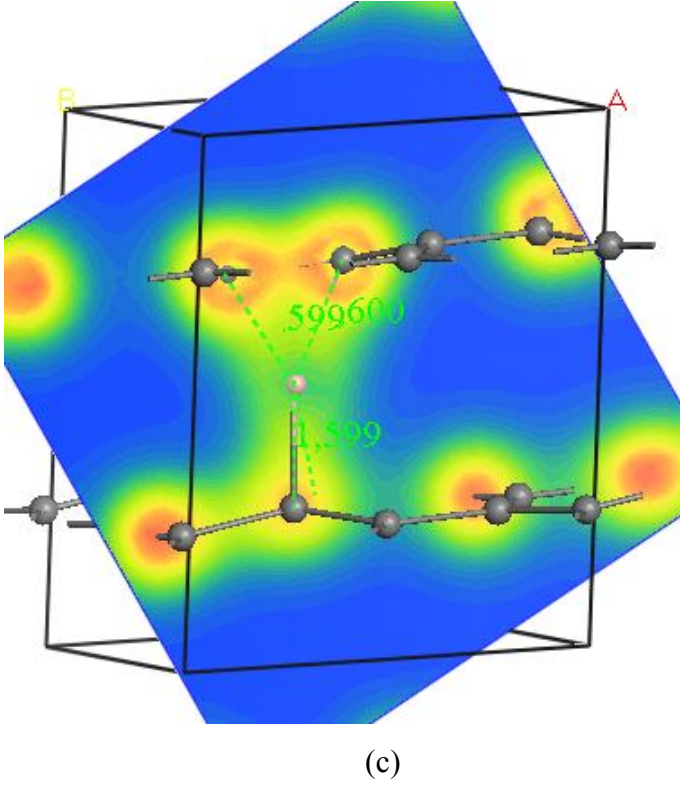


(a)

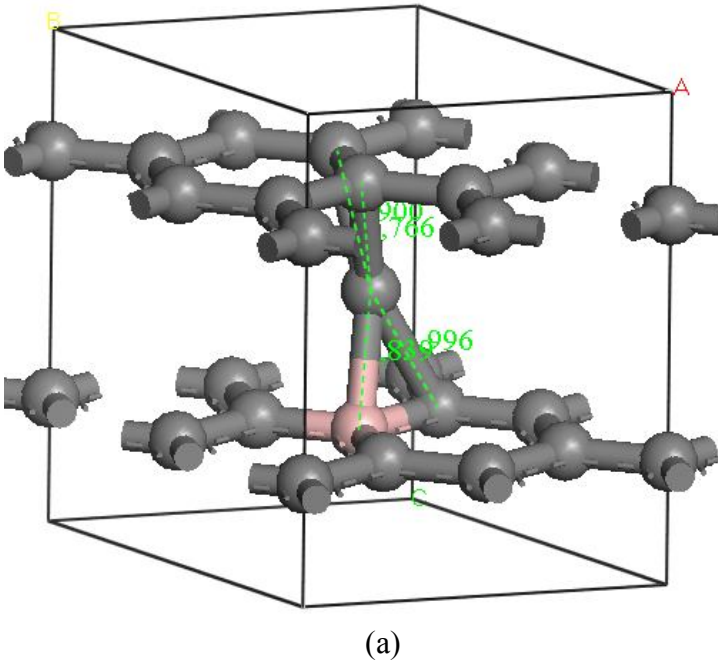


(b)

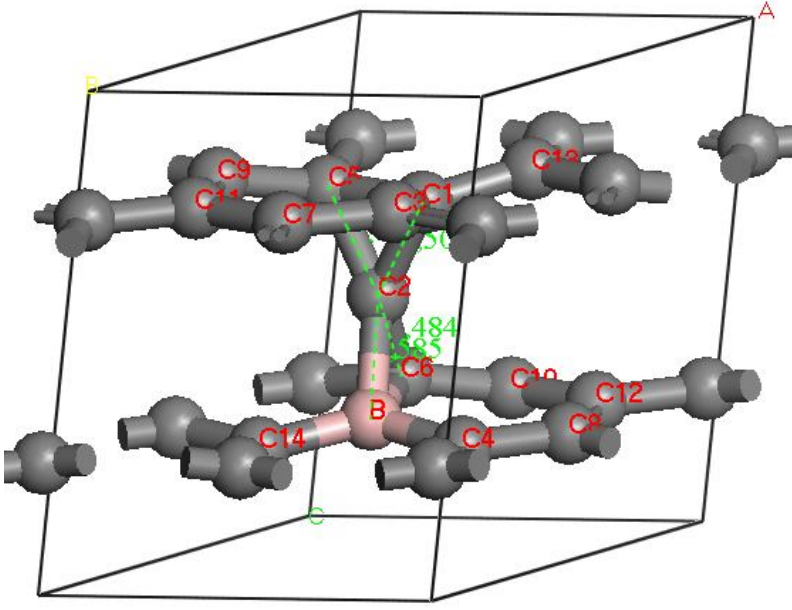
Şekil 4.17. B3 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



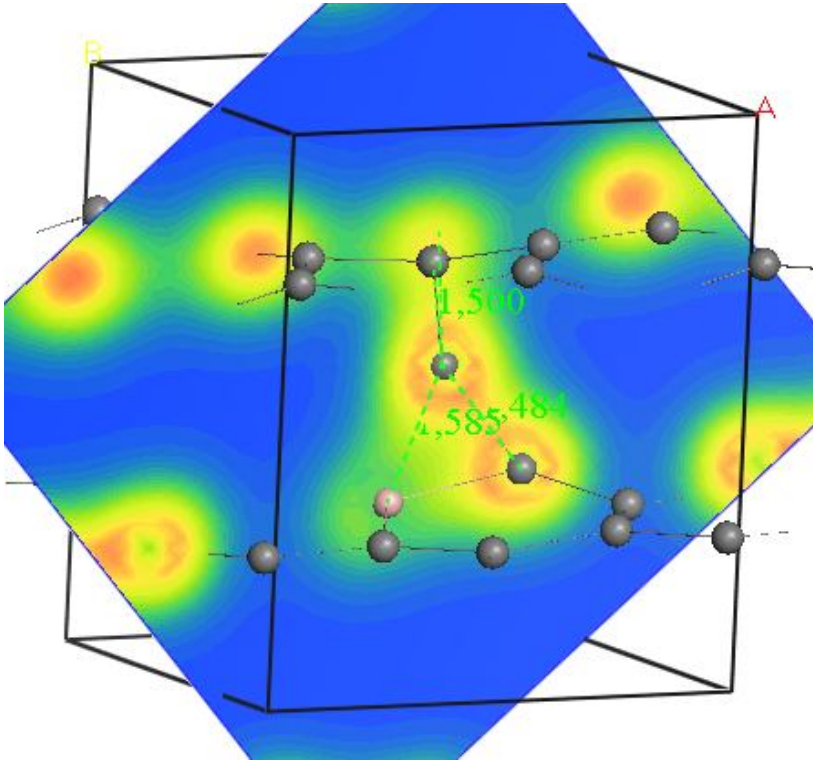
Şekil 4.17. (Devam) B3 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.18. B4 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

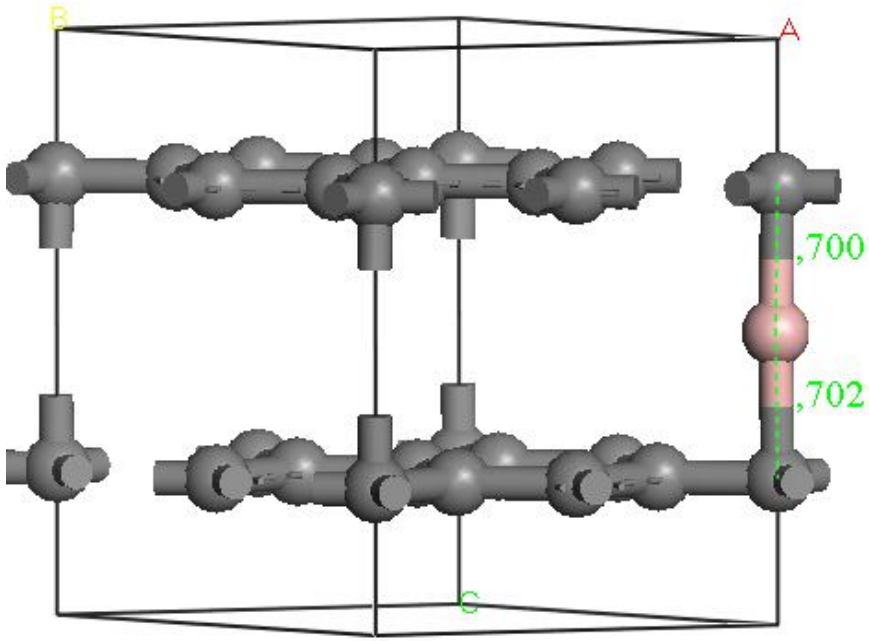


(b)

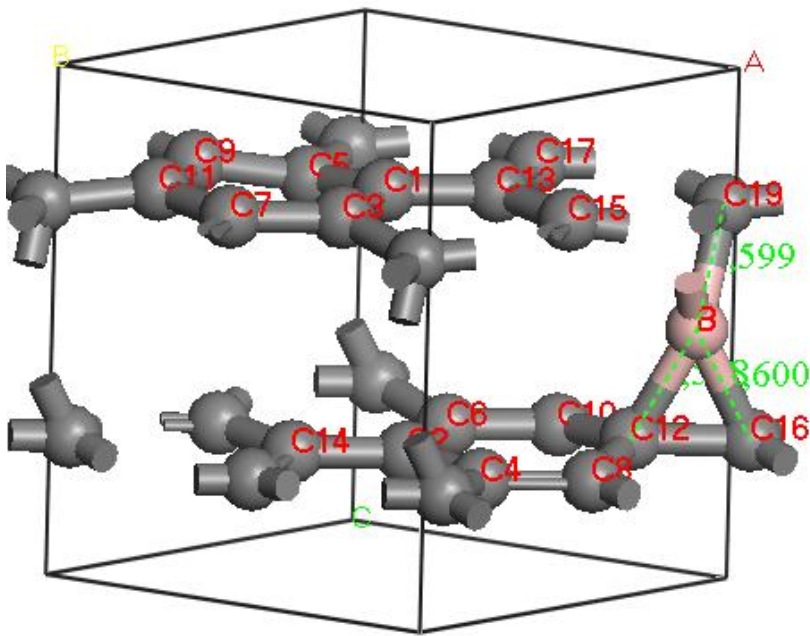


(c)

Şekil 4.18. (Devam) B4 (BC_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

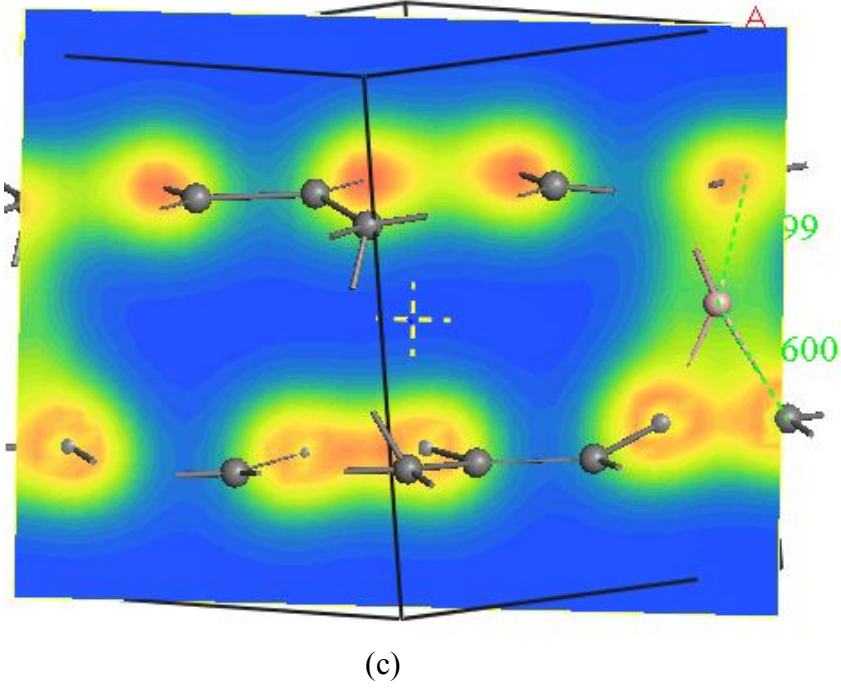


(a)

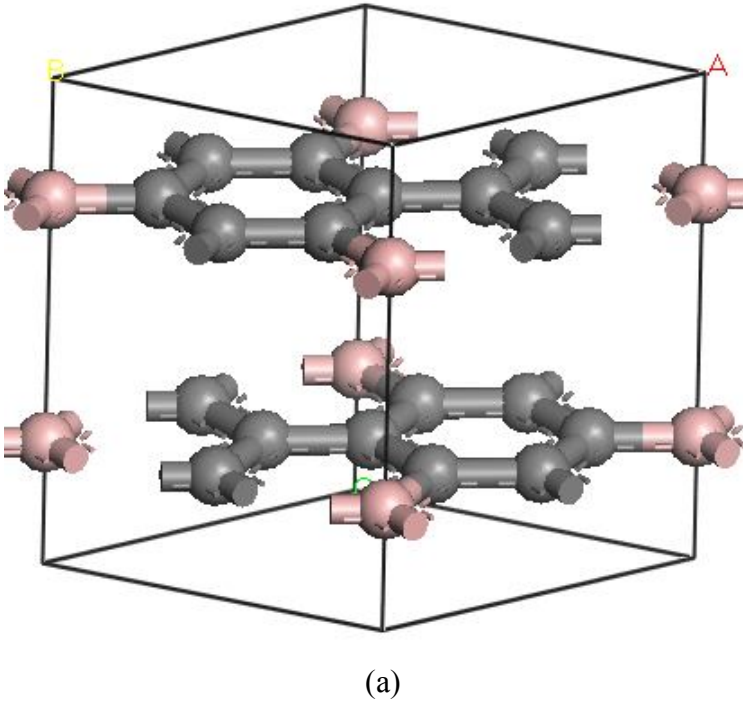


(b)

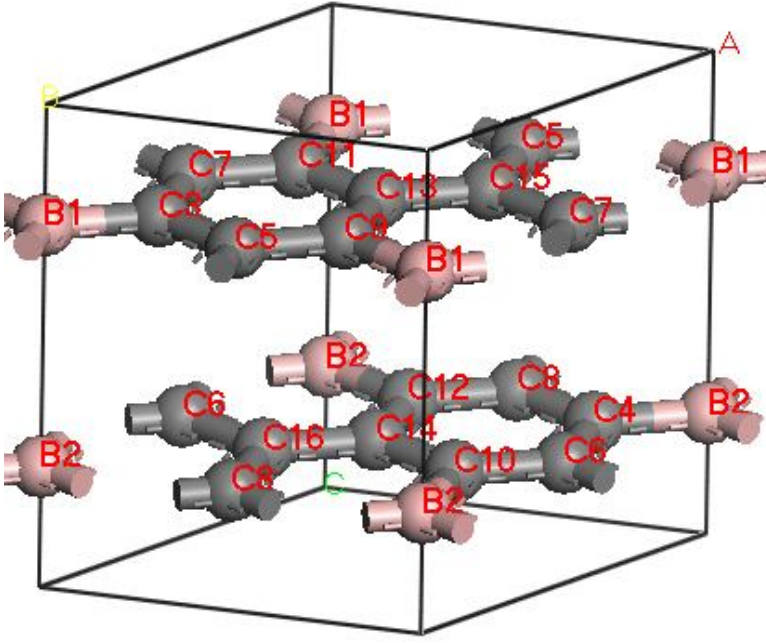
Şekil 4.19. B5 (B_2C_{16}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



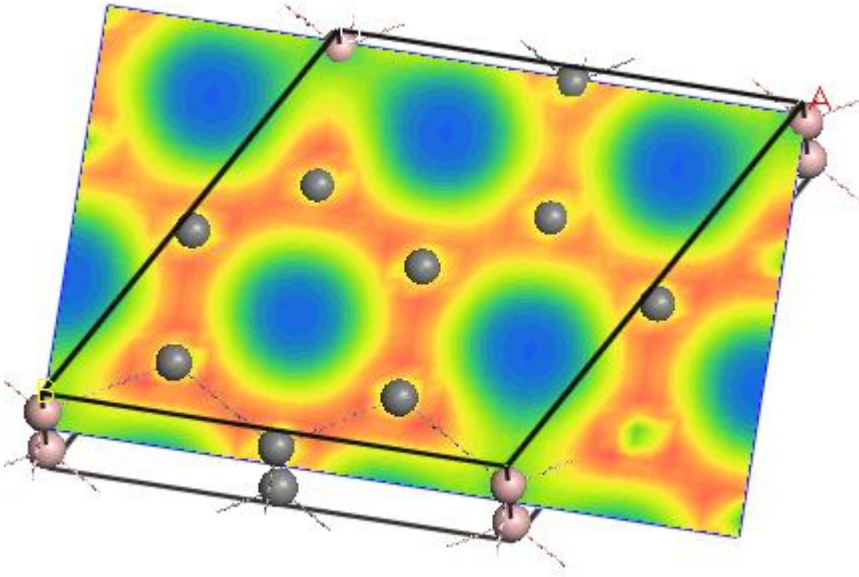
Şekil 4.19. (Devam) B5 (B₂C₁₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



Şekil 4.20. B6 (B₂C₁₄) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

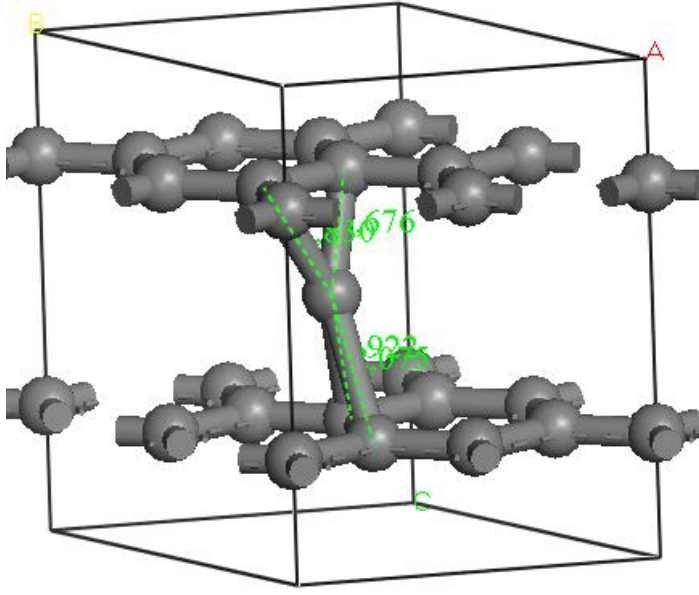


(b)

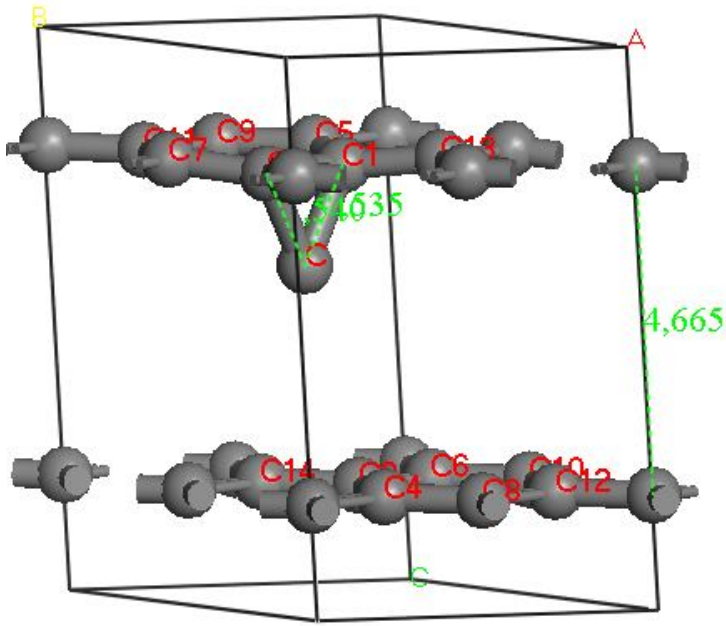


(c)

Şekil 4.20. (Devam) B6 (B_2C_{14}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

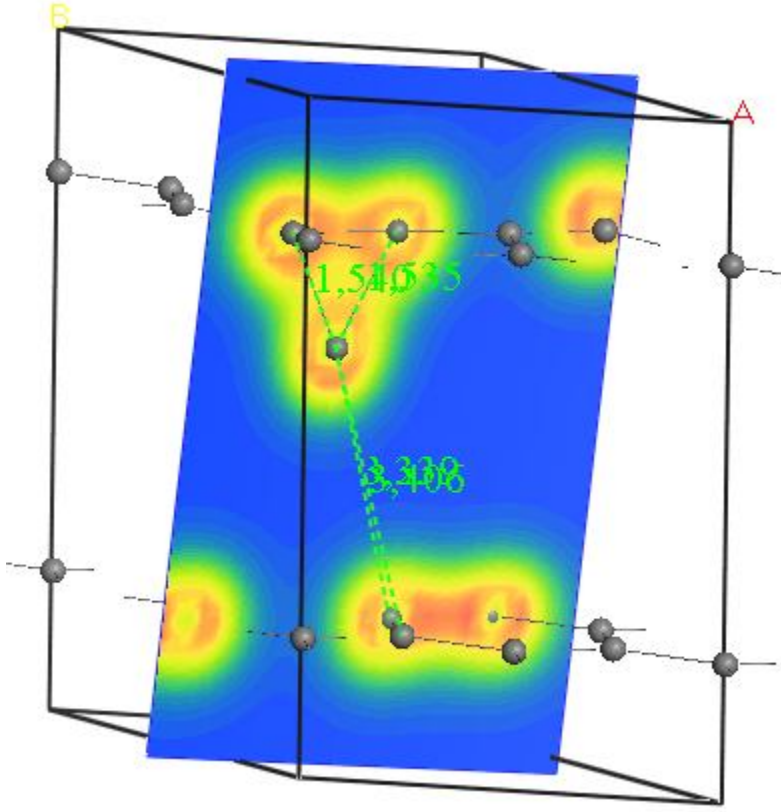


(a)



(b)

Şekil 4.21. B7 (C_{17}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



(c)

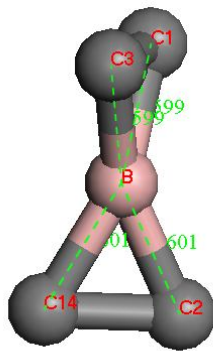
Şekil 4.21. (Devam) B7 (C_{17}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

Elektron yoğunluğu haritalarında kırmızı bölgelerde C-C atomları arasında yüksek elektron yoğunluğunu bulunmaktadır. Örneğin Şekil 4.21' de karbon bağları arasında oluşan bağlar elektron yoğunluğu haritasıyla net bir şekilde görülmektedir.

BC_{16} yapısının farklı formlarının B1 (BC_{16}), B2 (BC_{16}), B3 (BC_{16}), B4 (BC_{16}), B5 (BC_{16}), B6 (B_2C_{14}) ve B7 (C_{17}), bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları (C-C, C-B), tabakalar arasındaki (L1-L2) uzaklıkları hesaplandı ve Çizelge 4.13-Çizelge 4.19'da verildi. Bazı yapıların yakın komşulukları ile yaptığı bağlar Şekil 4.22-Şekil 4.27'de gösterilmiştir.

Çizelge 4.13. B1 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

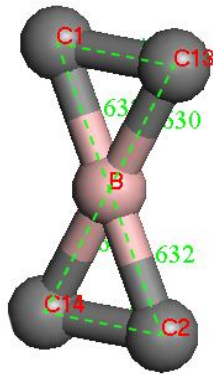
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B1 (BC_{16})	C1-B	1,599	3,279
	C3-B	1,599	
	C2-B	1,601	
	C14-B	1,601	
	C1-C3	1,497	
	C2-C14	1,495	



Şekil 4.22. B1, yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.14. B2 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

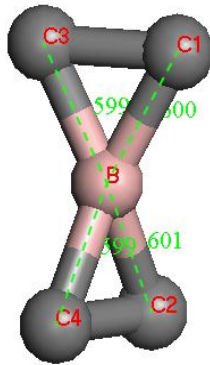
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B2 (BC_{16})	C1-B	1,632	3,446
	C13-B	1,630	
	C2-B	1,632	
	C14-B	1,630	
	C1-C13	1,467	
	C2-C14	1,668	



Şekil 4.23. B2 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.15. B3 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

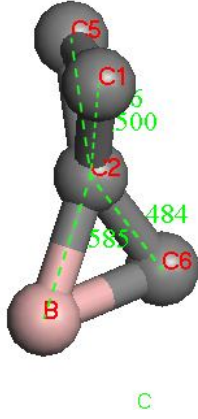
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B3 (BC_{16})	C1-B	1,600	3,262
	C3-B	1,599	
	C2-B	1,601	
	C4-B	1,599	
	C1-C3	1,497	
	C2-C4	1,497	



Şekil 4.24. B3 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.16. B4 (BC₁₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

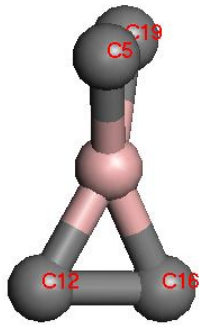
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B4 (BC ₁₆)	C2-B	1,585	3,097
	C2-C6	1,484	
	C2-C1	1,496	
	C2-C5	1,500	
	C1-C5	1,532	
	C6-B	1,576	
	C4-B	1,484	
	C14-B	1,473	



Şekil 4.25. B4 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.17. B5 (BC_{16}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

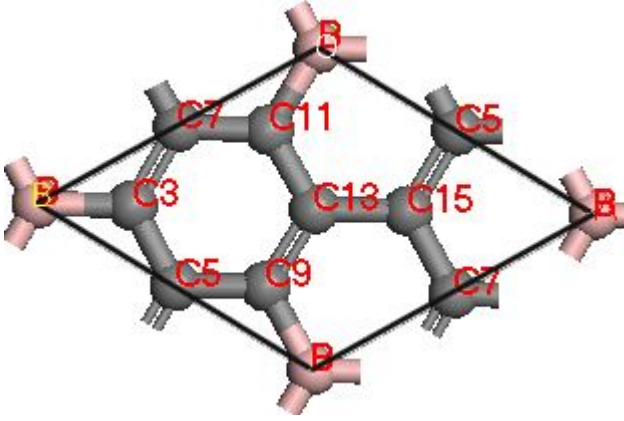
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B5 (BC_{16})	C5-B	1,598	3,241
	C19-B	1,599	
	C12-B	1,598	
	C16-B	1,699	
	C5-C19	1,499	
	C12-C16	1,498	



Şekil 4.26. B5 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.18. B6 (B_2C_{14}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B6 (B_2C_{14})	B1-C3	1,482	3,270
	B1-C9	1,483	
	B1-C11	1,483	
	C5-C15	1,458	
	C3-C7	1,411	
	C7-C11	1,409	
	B2-C4	1,482	
	B2-C10	1,483	
	B2-C12	1,483	
	C4-C6	1,411	
	C8-C12	1,409	
	C6-C16	1,458	

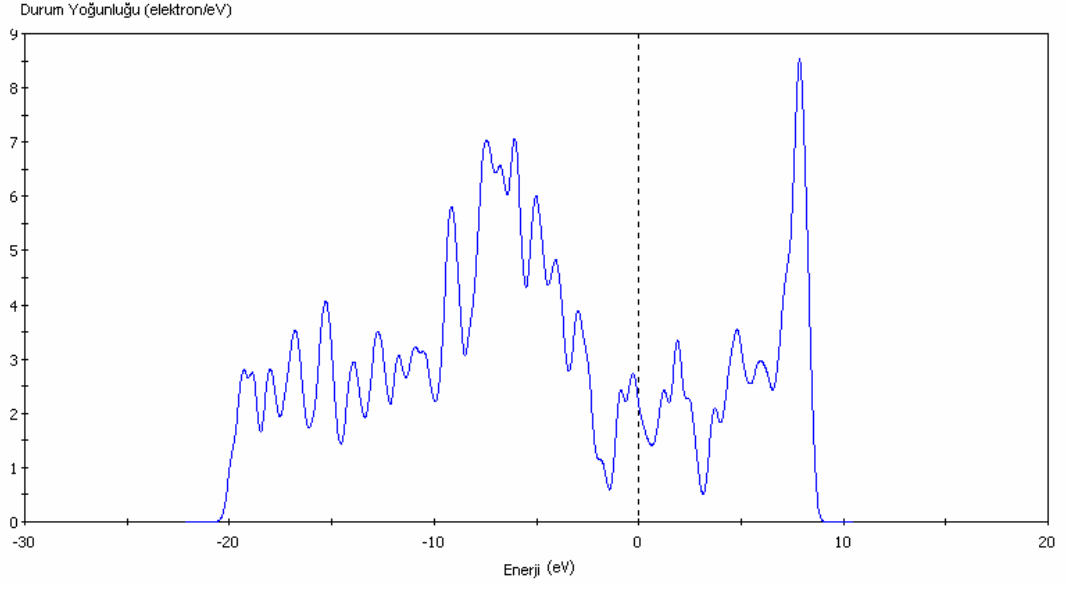


Şekil 4.27. B6 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

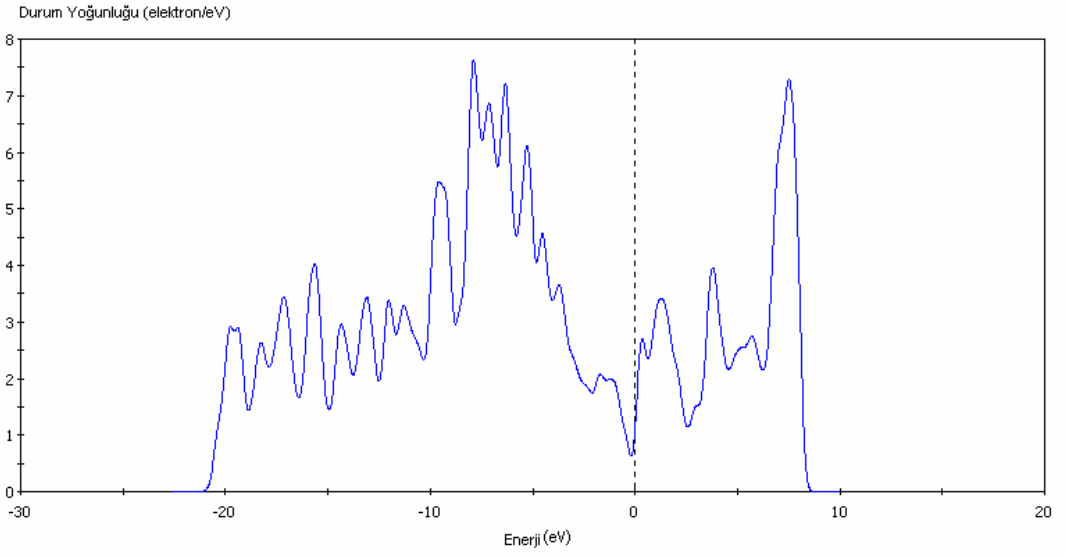
Çizelge 4.19. B7 (C₁₇) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
B7 (C ₁₇)	C-C1	1,535	
	C-C3	1,540	
	C1-C3	1,473	
	C-C2	3,339	
	C-C6	3,406	
	C-C14	3,414	

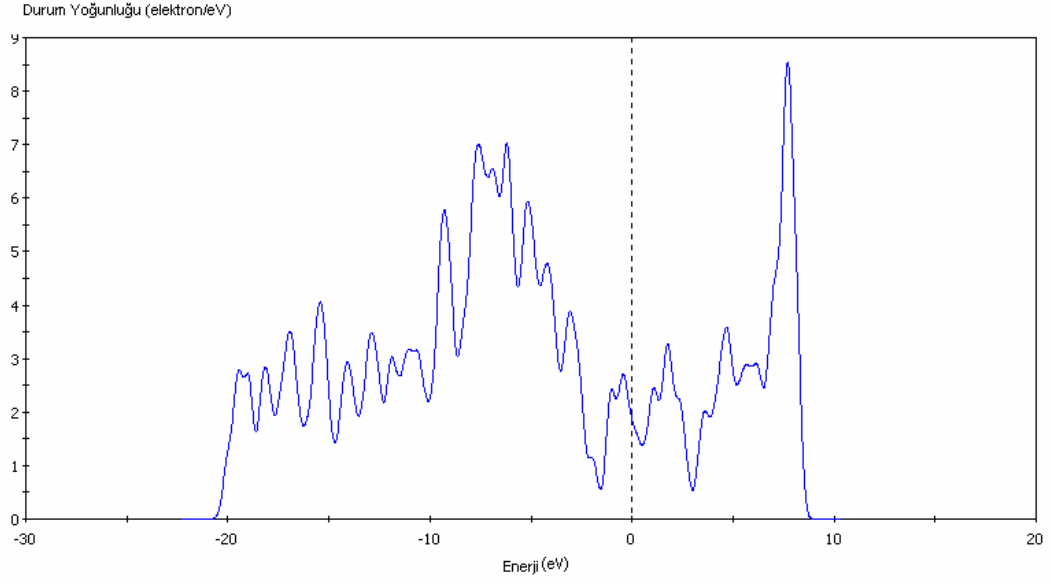
BC₁₆ yapısının farklı formlarının B1 (BC₄), B2 (BC₄), B3 (BC₄), B4 (BC₄), B5 (B₂C₁₄) ve B7 (C₁₇) yapısının toplam durum yoğunluğu hesaplandı. Farklı formlar için hesaplanmış toplam durum yoğunluğu Şekil 4.28-Şekil 4.34’de verildi.



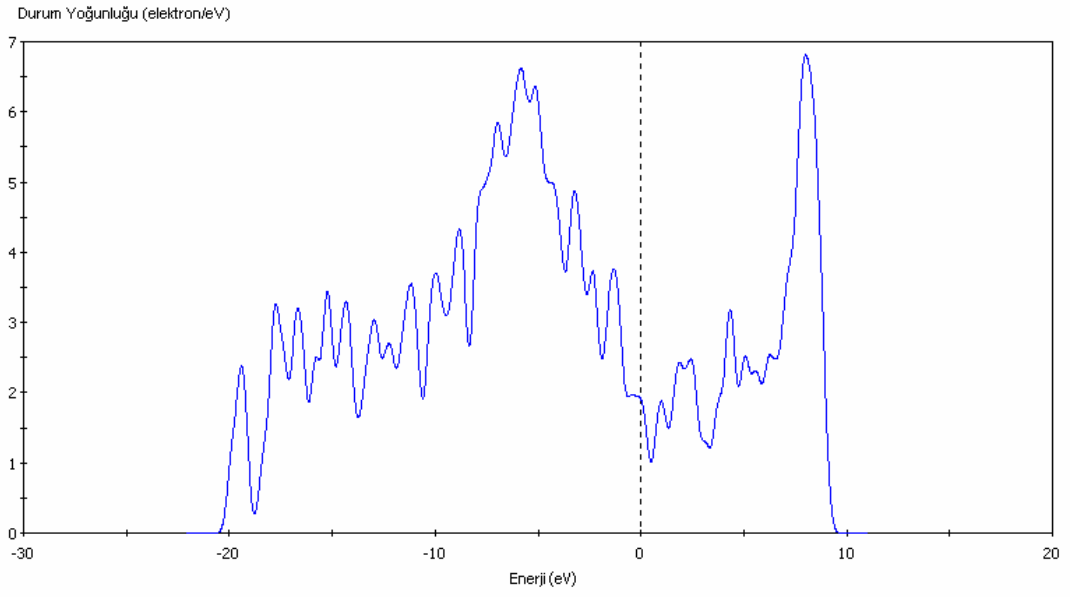
Şekil 4.28. B1 (BC₁₆) yapısının durum yoğunluğu



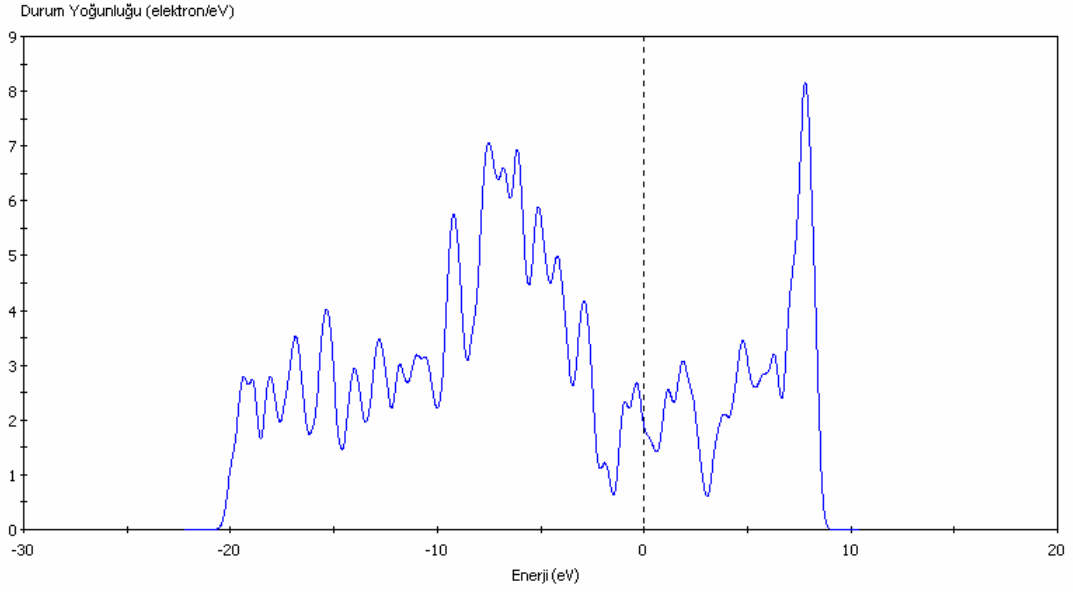
Şekil 4.29. B2 (BC₁₆) yapısının durum yoğunluğu



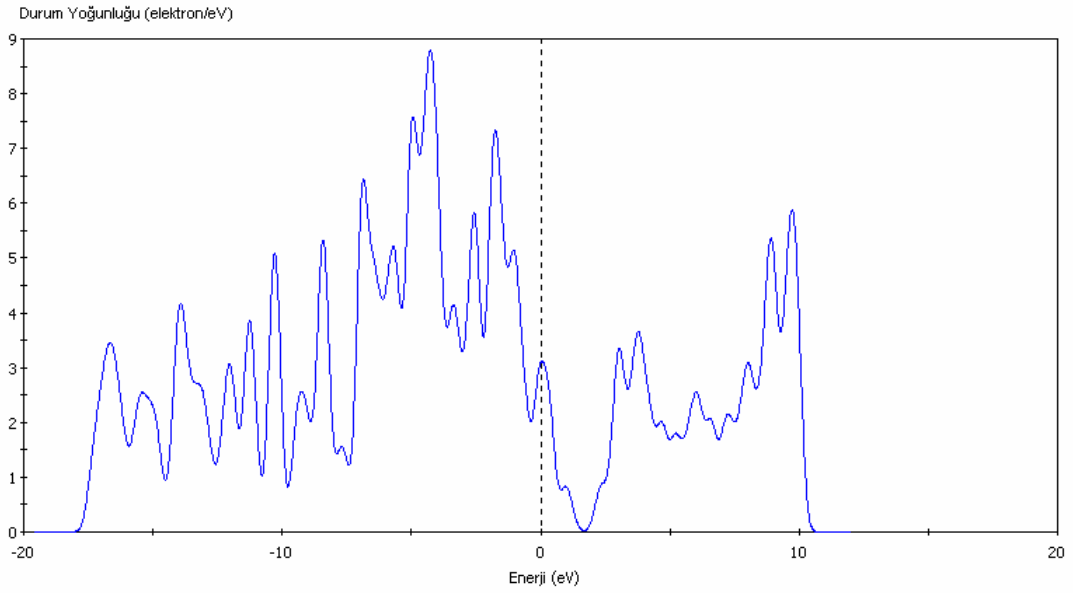
Şekil 4.30. B3 (BC₁₆) yapısının durum yoğunluğu



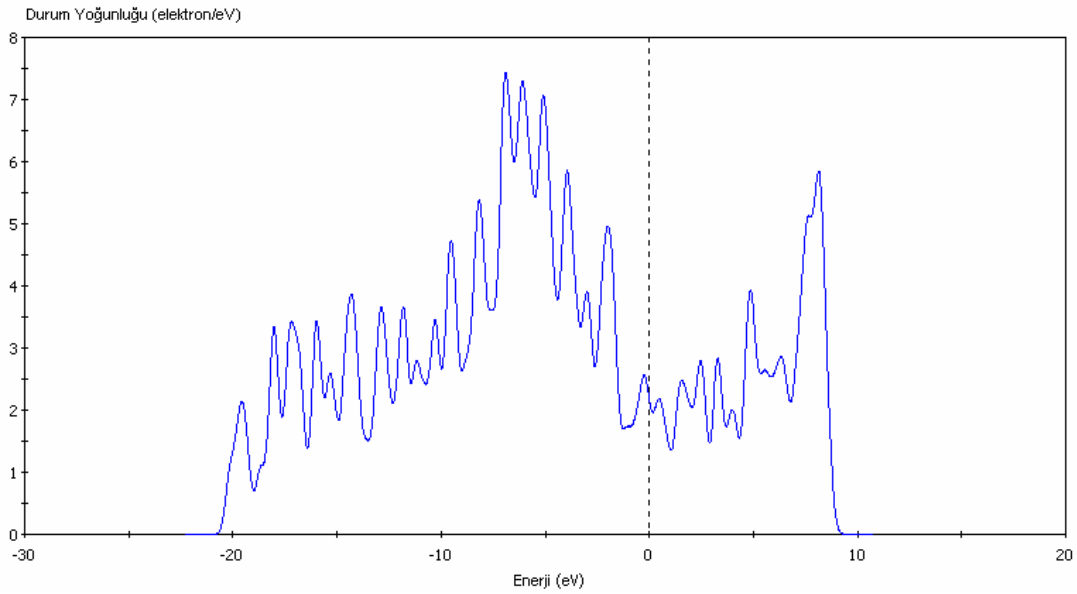
Şekil 4.31. B4 (BC₁₆) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.32. B5 (BC₁₆) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.33. B6 (B₂C₁₄) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.34. B7 (C_{17}) yapısının durum yoğunluğu

Şekil 4.28-Şekil 4.34’de durum yoğunluklarından oluşan yapıların iletken özellikte oldukları görülmektedir. Yapıların toplam enerjileri incelendiğinde düşük enerjili formlar daha kararlı yapıdadır. Geometrik optimize edilen BC_{16} yapısının farklı formlarının B1 (BC_4), B2 (BC_4), B3 (BC_4), B4 (BC_4), B5 (B_2C_{14}) ve B7 (C_{17}) yapısının toplam enerjisi, oluşum (formation) enerjisi hesaplanmış, Çizelge 4.20’de toplam enerji (E_n) ve oluşum (formation) enerjisi (E_f) verilmiştir.

Çizelge 4.20. B1 (BC_4), B2 (BC_4), B3 (BC_4), B4 (BC_4), B5 (B_2C_{14}) formlarının ve B7 (C_{17}) yapısının toplam enerjisi (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f)

Farklı Formlar	$E_n(\text{eV})$	$E_f(\text{eV})$
B1 (BC_{16})	-2562,006	-165,796
B2 (BC_{16})	-2561,763	-165,553
B3 (BC_{16})	-2562,021	-165,811

B4 (BC ₁₆)	-2560,569	-164,359
B5 (BC ₁₆)	-2562,027	-165,816
B6 (B ₂ C ₁₄)	-2330,035	-154,355
B7 (C ₁₇)	-2637,463	-166,097

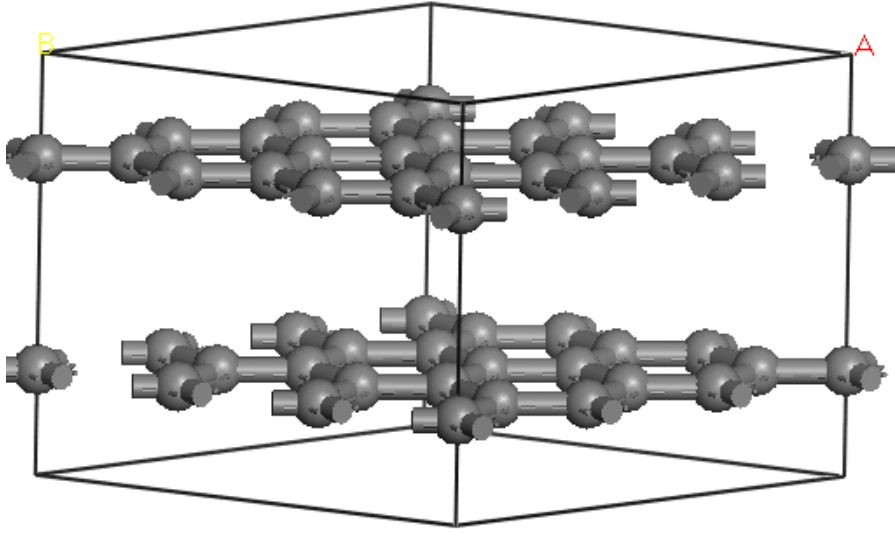
4.5. Grafit (C₃₆)-(3×3×1) Kristal Yapısının İncelenmesi

36 karbon atomu içeren grafit (C₃₆) yapısı optimize edildi. 18 C atomu alt tabakada 18 C atomu üst tabakada (2 Layers). Brillouin bölge örnekleme 4×4×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen C₃₆ (grafit) kristal yapısının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C), durum yoğunluğu, elektron yoğunluğu, toplam enerjisi ve oluşum (formation) enerjisi hesaplandı.

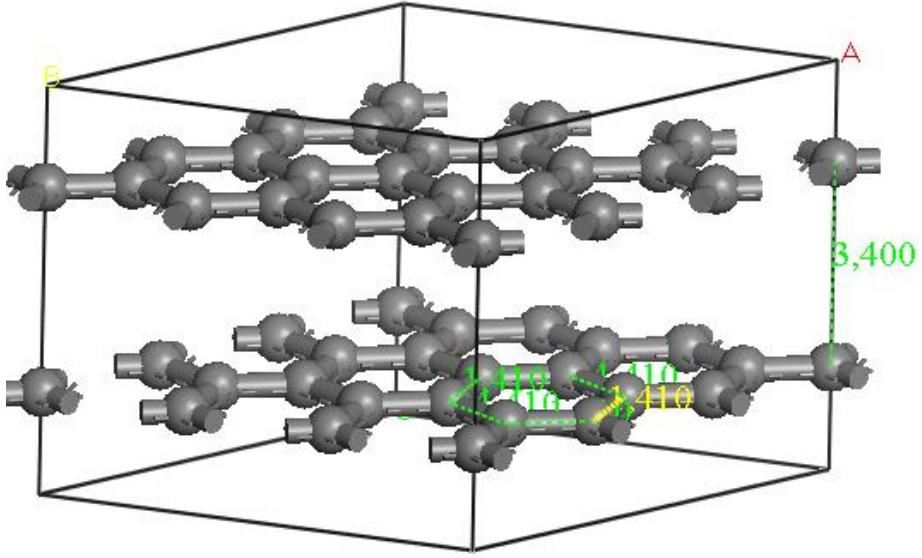
Grafit (C₃₆) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.21’de, optimize öncesi ve sonrası gösterimi, elektron yoğunluğu gösterimi Şekil 4.35’de verildi.

Çizelge 4.21. Grafit (C₃₆) kristal yapısının geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri

Grafit(C ₁₆)	a (Å)	b(Å)	c(Å)	α	B	Γ
Optimizasyon öncesi	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
Optimizasyon sonrası	7,33	7,33	6,80	90,0	90,0	120,0

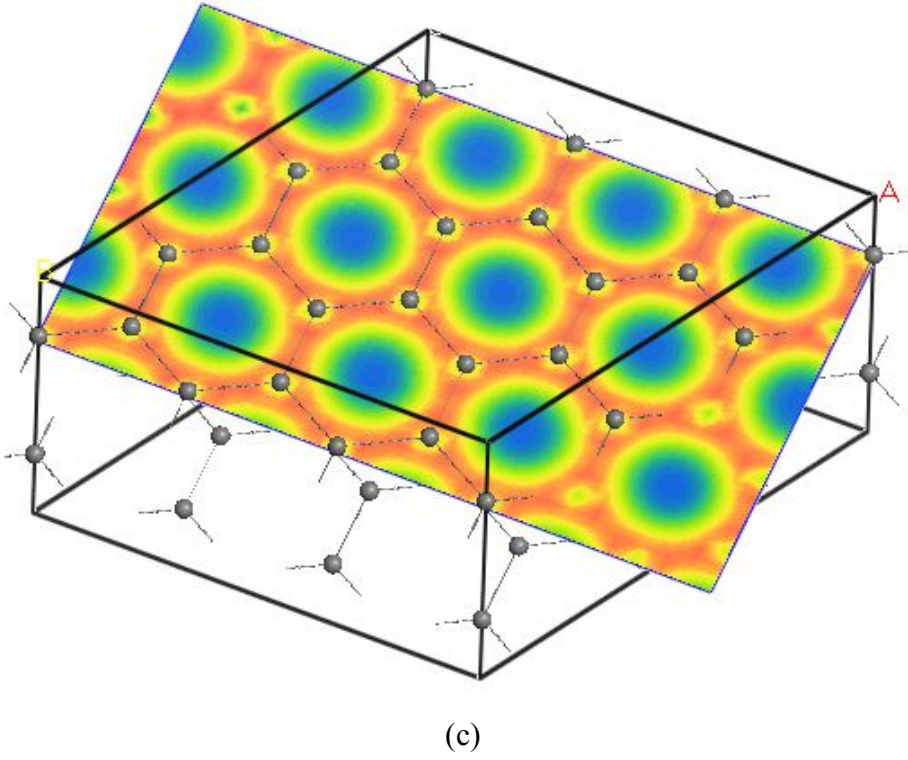


(a)



(b)

Şekil 4.35. Grafit (C_{36}) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



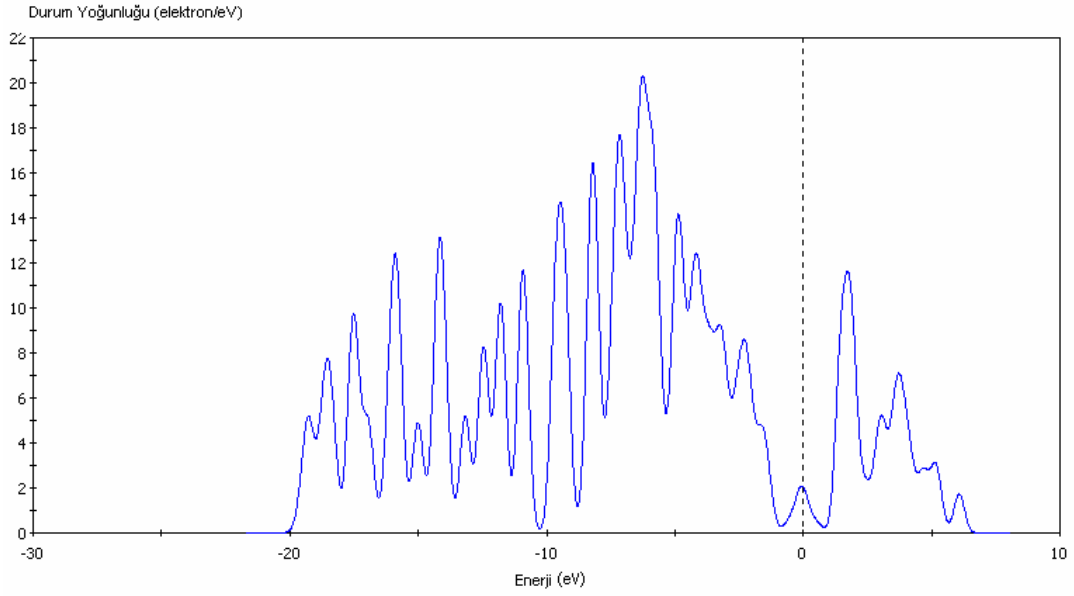
Şekil 4.35. (Devam) Grafit (C_{36}) kristal yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

Karbon bağları arasındaki yüksek elektron yoğunluğu kırmızı bölgeler şeklinde Şekil 4.35’de görülmektedir. Oluşan bağlar ise kovalent bağlardır.Grafit (C_{36}) kristal yapısının C-C atomları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arasındaki (L1-L2) uzaklık hesaplandı ve Çizelge 4.22’de verildi. (Tüm C-C atomları arasındaki mesafeler aynı olduğu için çizelgede yalnızca bir tanesi verildi)

Çizelge 4.22. Grafit (C_{36}) kristal yapısının optimizasyon öncesi ve sonrası atomlar arası bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Grafit(C_4)	C-C (Å)	L1-L2 (Å)
Optimizasyon öncesi	1,42	3,40
Optimizasyon sonrası	1,41	3,40

Grafit (C_{36}) kristal yapısının toplam durum yoğunluğu Şekil 6.36'da verildi. Geometrik optimize edilen Grafit (C_{36}) kristal yapısının toplam, oluşum enerjisi hesaplandı ve Çizelge 4.23'de toplam enerjisi ve oluşum enerjisi verildi.



Şekil 4.36. Grafit (C_{36}) kristal yapısının durum yoğunluğu

Çizelge 4.23. Grafit (C_{36}) kristal yapısının toplam enerjisi (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f)

Kristal yapı	E_n (eV)	E_f (eV)
Grafit(C_{36})	-5599,257	-365,776

4.6. Grafit (C_{36})-(3×3×1) Kristal Yapısının İçinde B Atomunun Tutunmasıyla Oluşan BC_{36} Yapısının Farklı Formlarının ve C, N Atomlarının Tutunmasıyla Oluşan Formların İncelenmesi

Grafit (C_{36})-(3×3×1) yapısı içinde bor (B) atomunun farklı yerlerde tutunmasıyla oluşan C1 (BC_{36}), C2 (BC_{36}), C3 (BC_{36}), C4 (BC_{36}), C5 (BC_{36}), C6 (B_2C_{34}) yapıları optimize edildi. Karbon ve Azot atomlarının yerleştirilmesiyle oluşan C7 (C_{37}), C8 (NC_{36}) yapıları optimize edildi. Brillouin bölge örnekleme 4×4×4 Monkhorst Pack şeması kullanılarak gerçekleştirildi. Yapılan çalışmalar sonucunda optimize edilen BC_{36} yapısının formlarının, C_{37} ve NC_{36} yapısının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C, B-C N-C), durum yoğunlukları, elektron yoğunlukları ve toplam enerjileri hesaplandı.

BC_{36} yapısının farklı formlarının C1 (BC_{36}), C2 (BC_{36}), C3 (BC_{36}), C4 (BC_{36}), C5 (BC_{36}), C6 (B_2C_{34}), C7 (C_{37}), C8 (NC_{36}) geometri optimizasyon öncesi ve sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.24 ve Çizelge 4.25’de verildi. Şekil 4.37-Şekil 4.44’de ise sırasıyla optimize öncesi ve sonrası birim hücre, elektron yoğunluğu gösterimi verildi.

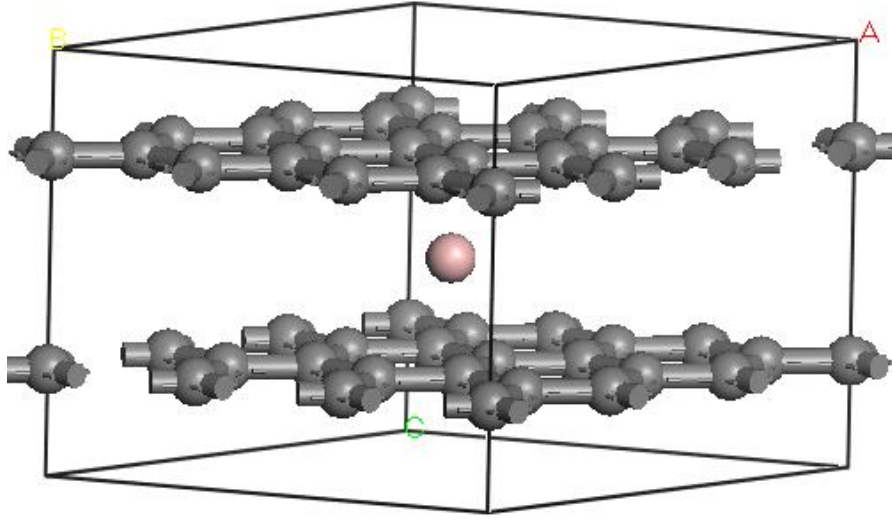
Çizelge 4.24. C1 (BC_{36}), C2 (BC_{36}), C3 (BC_{36}), C4 (BC_{36}), C5 (BC_{36}), C6 (B_2C_{34}), C7 (C_{37}), C8 (NC_{36}) yapılarının geometri optimizasyon öncesi birim örgü parametreleri

Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
C1 (BC_{36})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C2 (BC_{36})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C3 (BC_{36})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C4 (BC_{36})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C5 (BC_{36})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C6 (B_2C_{34})	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0

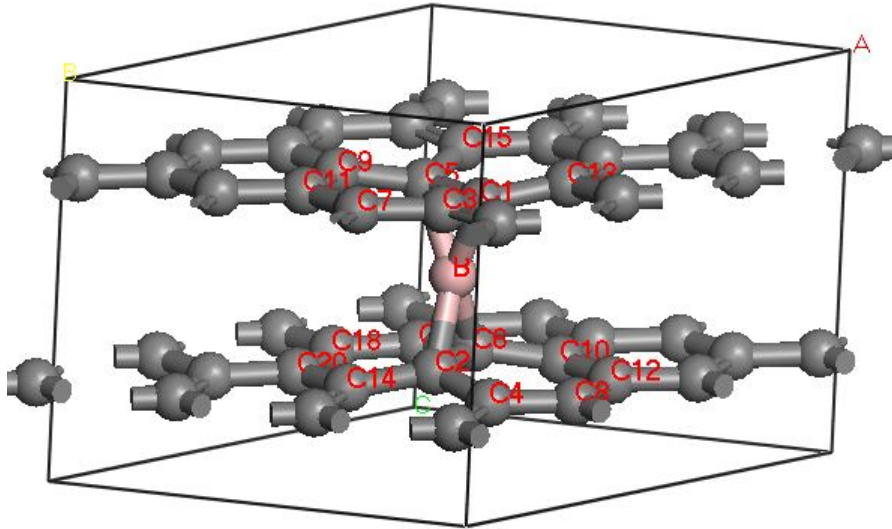
C7 (C ₃₇)	7,38	7,38	6,80	90,0	90,0	120,0
C8 (NC ₃₆)	7,38	7,38	7,38	90,0	90,0	120,0

Çizelge 4.25. C1 (BC₃₆), C2 (BC₃₆), C3 (BC₃₆), C4 (BC₃₆), C5 (BC₃₆), C6 (B₂C₃₄), C7 (C₃₇), C8 (NC₃₆) yapılarının geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri

Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
C1 (BC ₃₆)	7,36	7,36	6,72	87,49	92,51	120,04
C2 (BC ₃₆)	7,36	7,38	6,80	95,43	91,96	119,84
C3 (BC ₃₆)	7,36	7,36	6,72	87,51	92,51	120,04
C4 (BC ₃₆)	7,35	7,36	6,80	95,91	89,96	119,97
C5 (BC ₃₆)	7,39	7,39	6,70	90,0	90,0	119,97
C6 (B ₂ C ₃₄)	7,37	7,37	6,71	81,41	98,59	120,38
C7 (C ₃₇)	7,34	7,34	7,74	85,71	94,29	120,00
C8 (NC ₃₆)	7,34	7,34	7,62	92,37	89,97	120,01

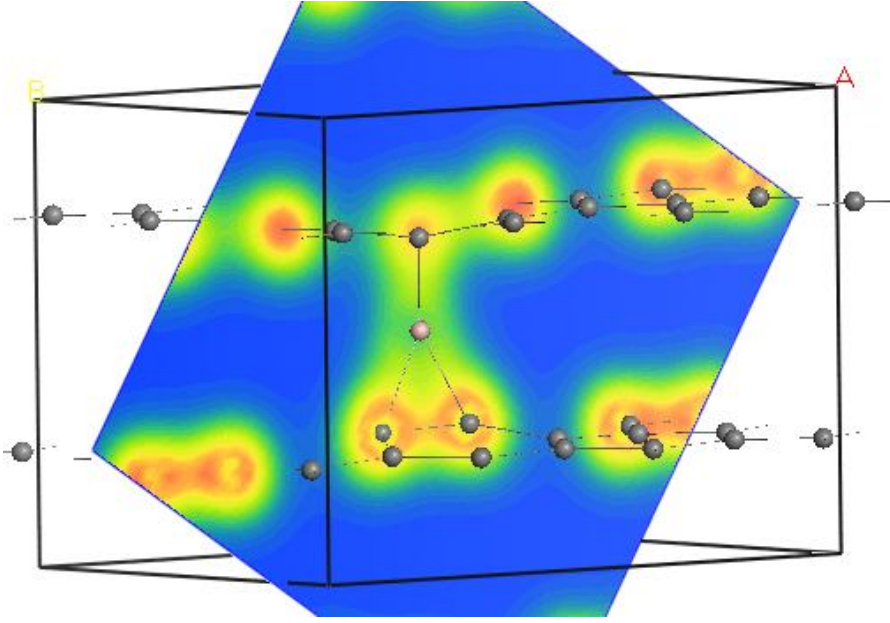


(a)



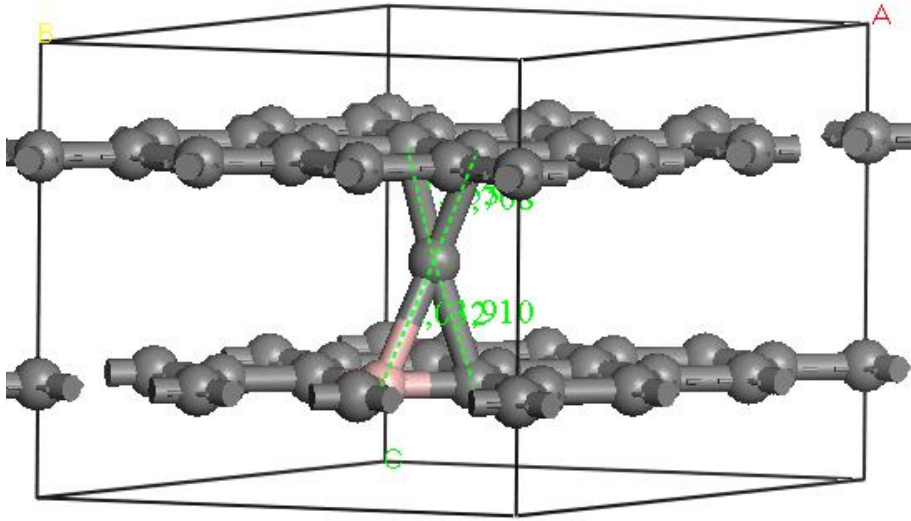
(b)

Şekil 4.37. C1 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



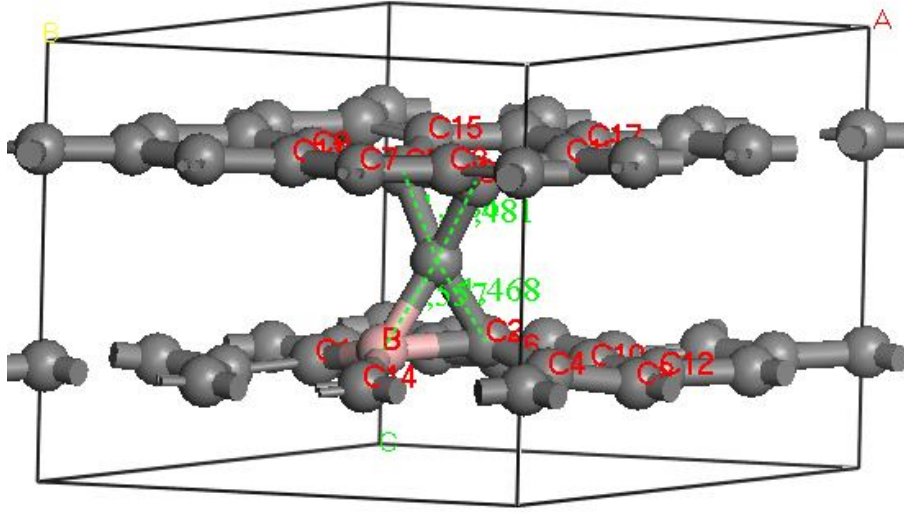
(c)

Şekil 4.37. (Devam) C1 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

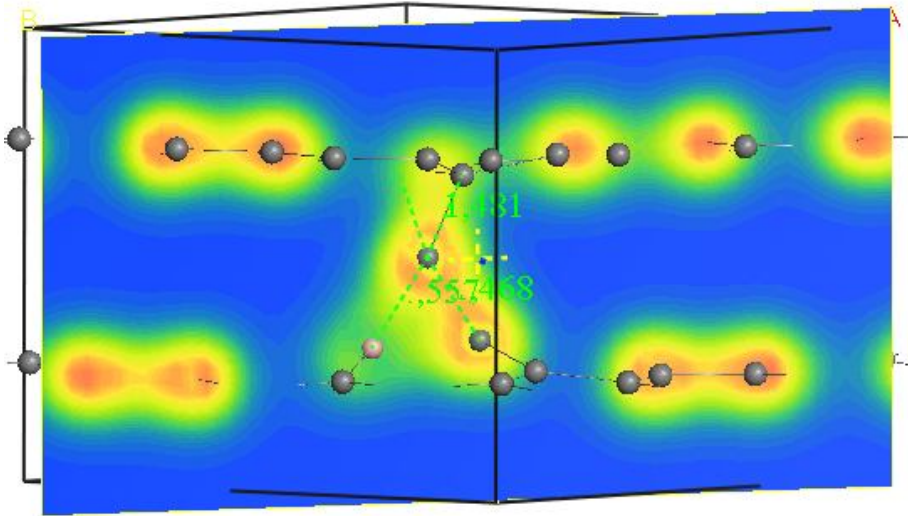


(a)

Şekil 4.38. C2 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

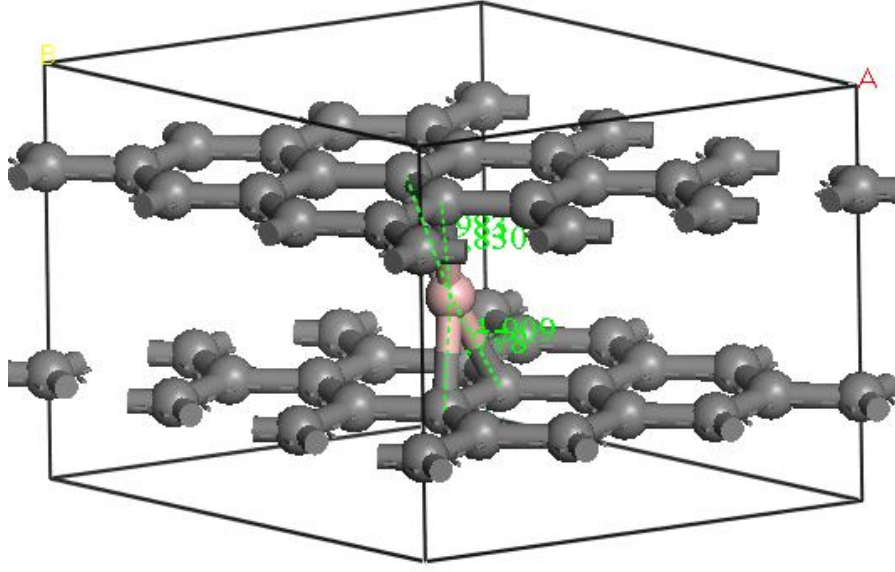


(b)

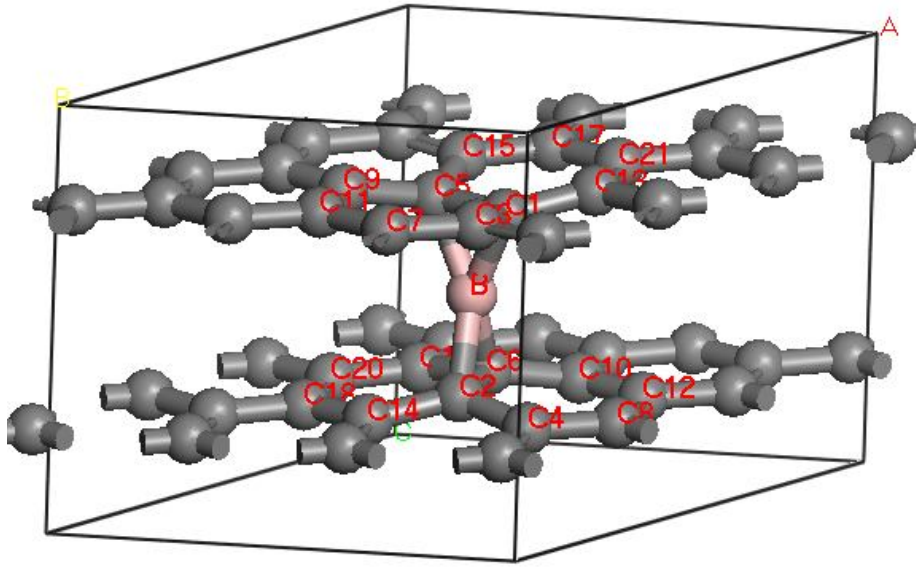


(c)

Şekil 4.38. (Devam) C2 (BC₃₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

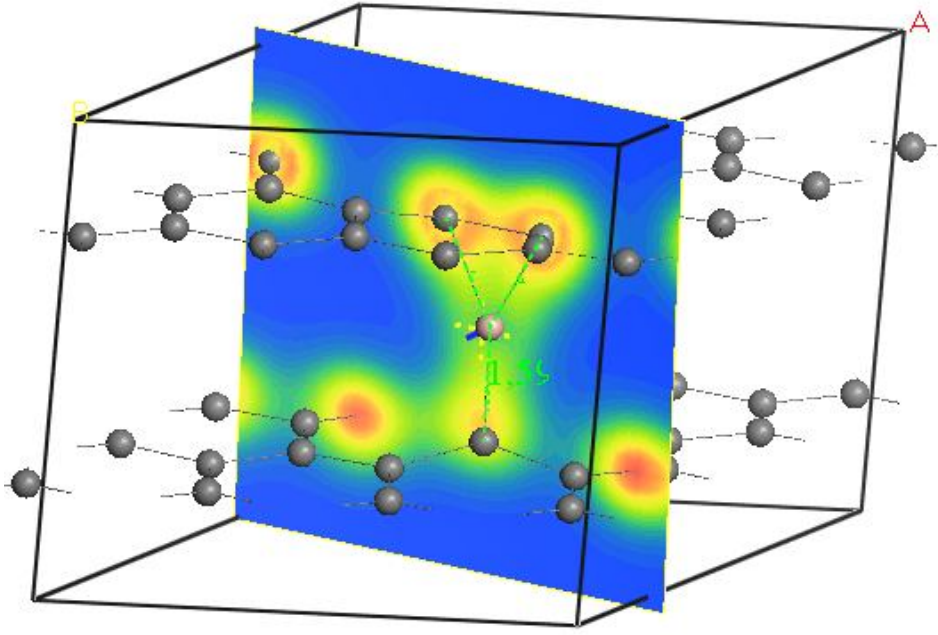


(a)



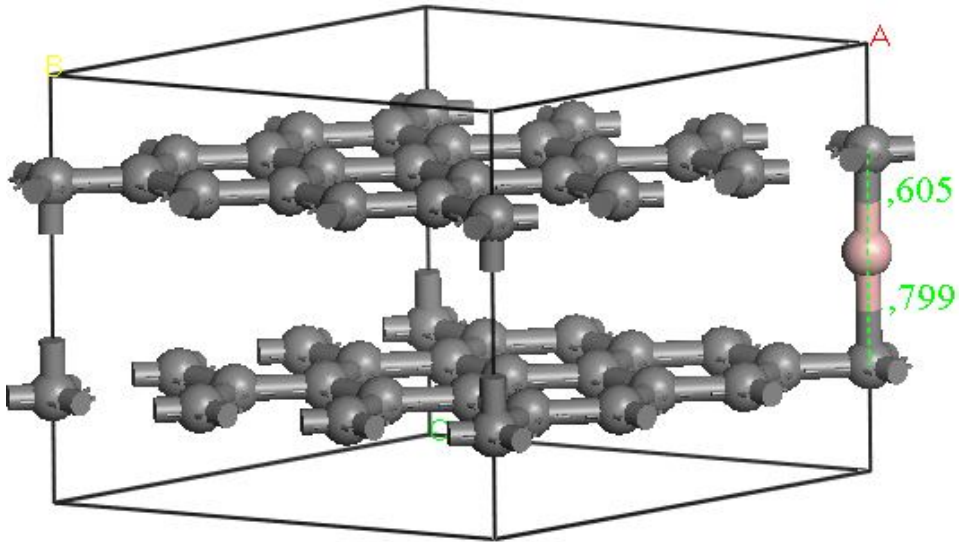
(b)

Şekil 4.39. C3 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



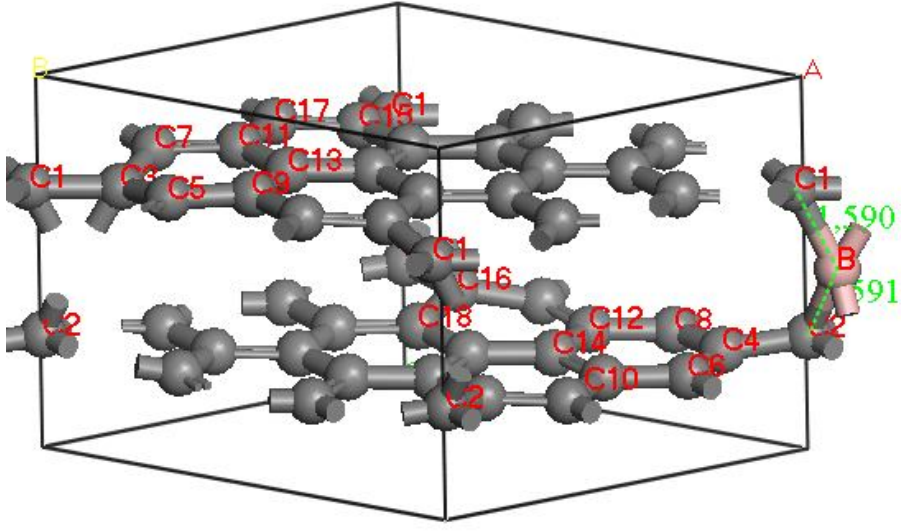
(c)

Şekil 4.39. (Devam) C3 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

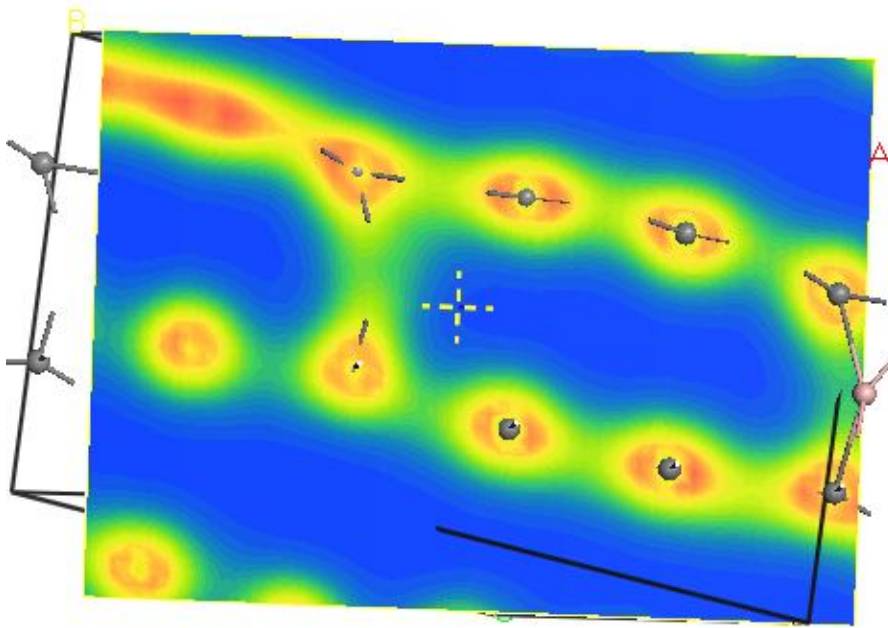


(a)

Şekil 4.40. C4 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

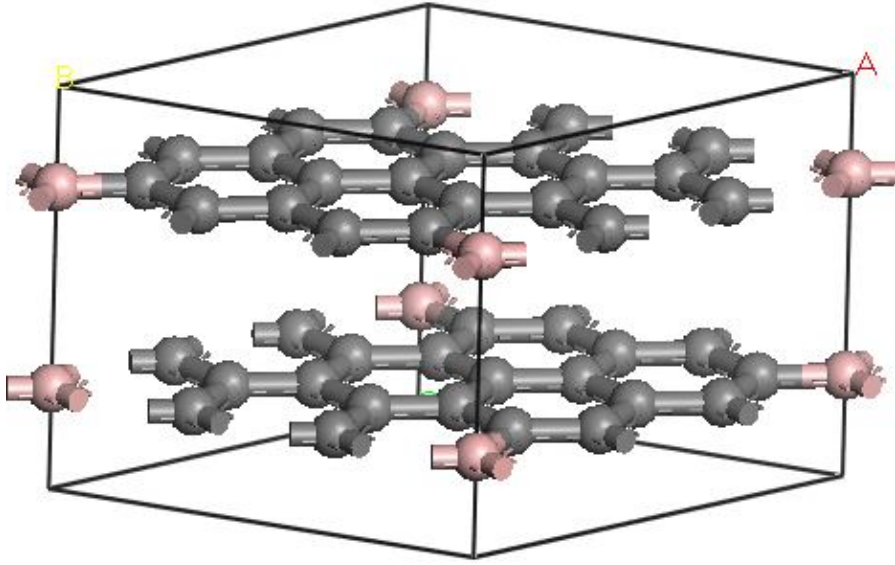


(b)

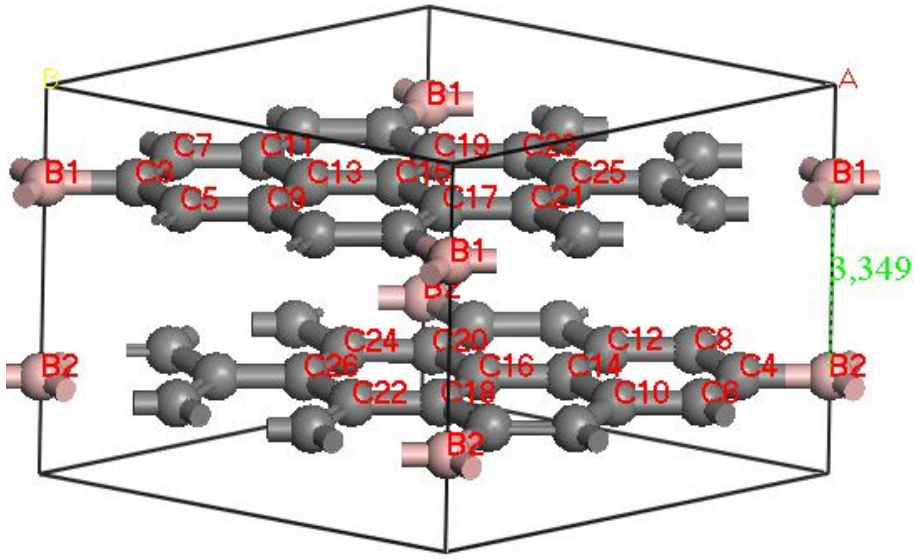


(c)

Şekil 4.40. (Devam) C4 (BC₃₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

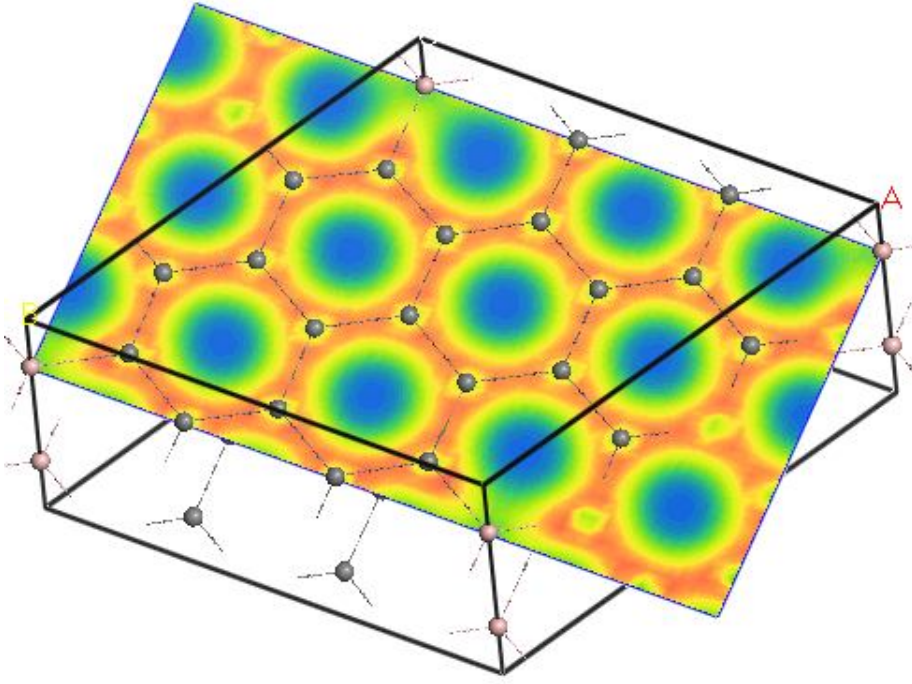


(a)



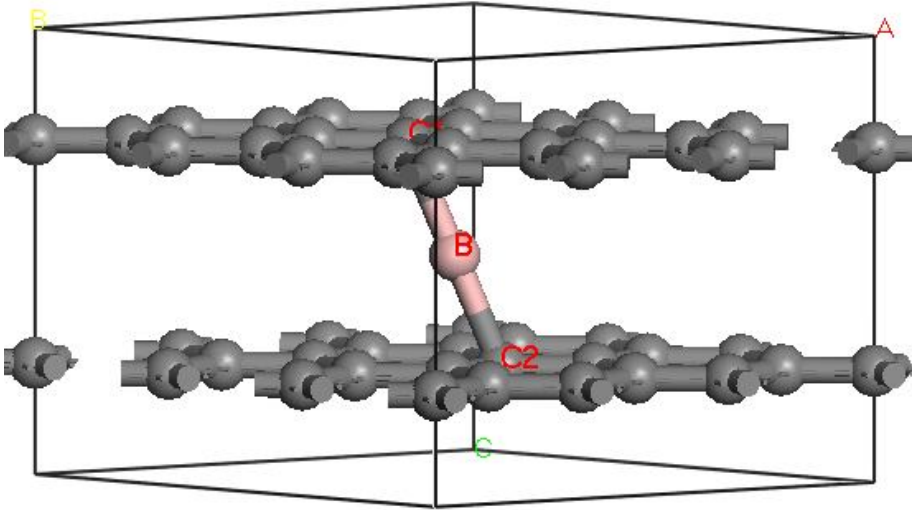
(b)

Şekil 4.41. C5 (B_2C_{34}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



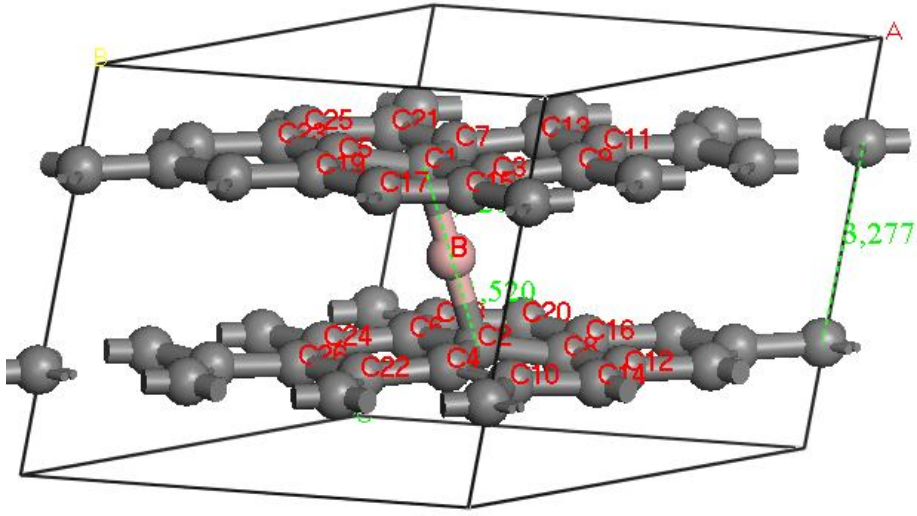
(c)

Şekil 4.41. (Devam) C5 (B_2C_{34}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c) elektron yoğunluğu gösterimi

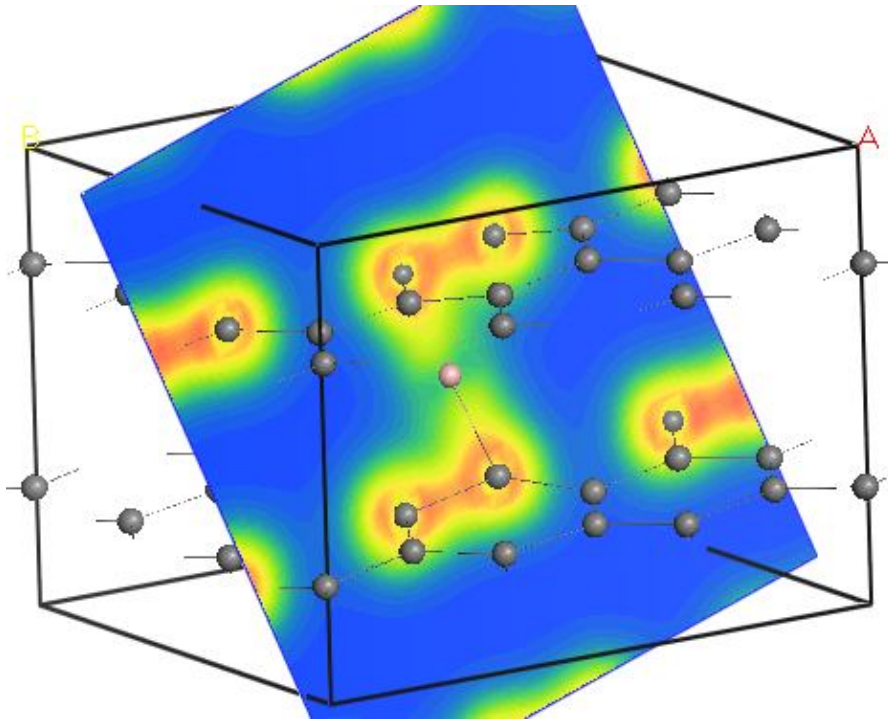


(a)

Şekil 4.42. C6 (BC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c) elektron yoğunluğu gösterimi

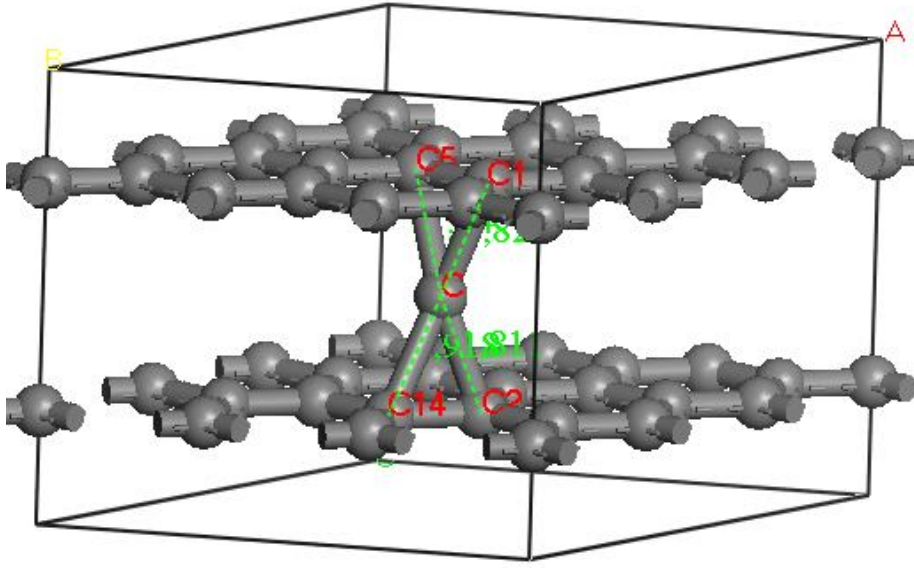


(b)

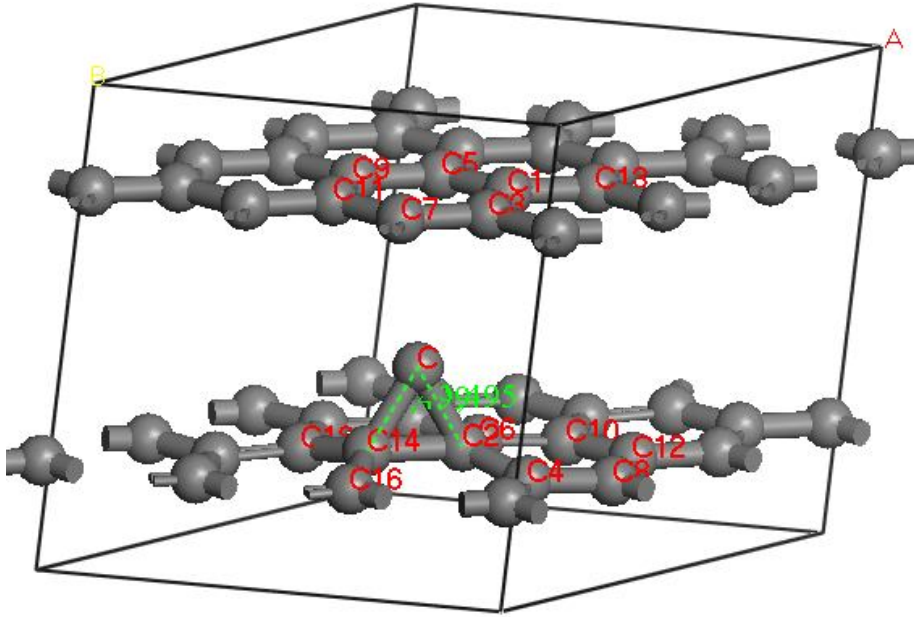


(c)

Şekil 4.42. (Devam) C6 (BC₃₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c) elektron yoğunluğu gösterimi

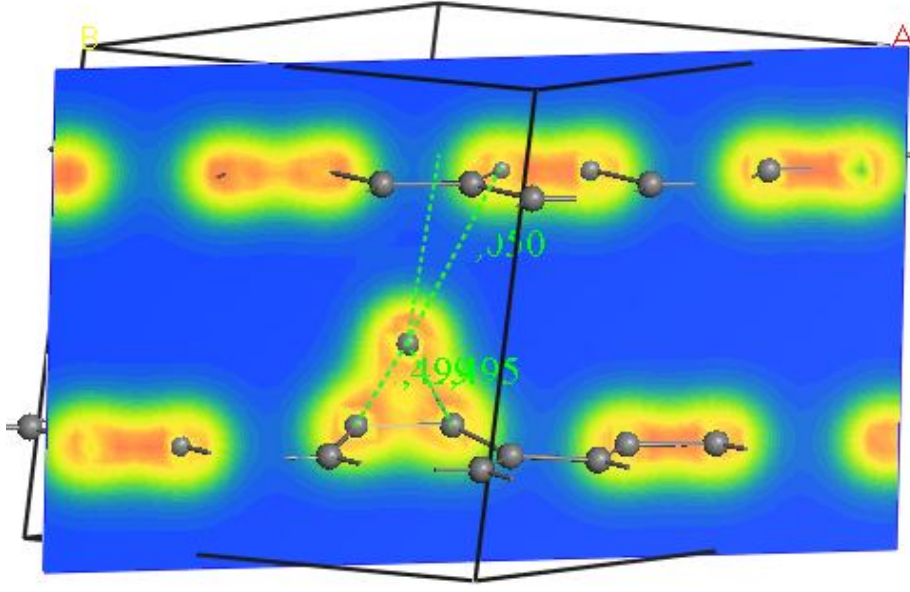


(a)



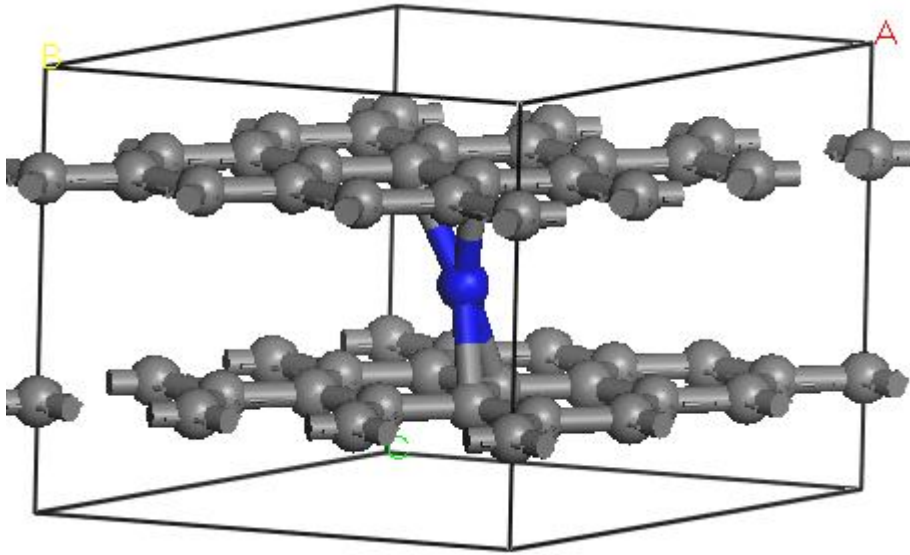
(b)

Şekil 4.43. C7 (C₃₇) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



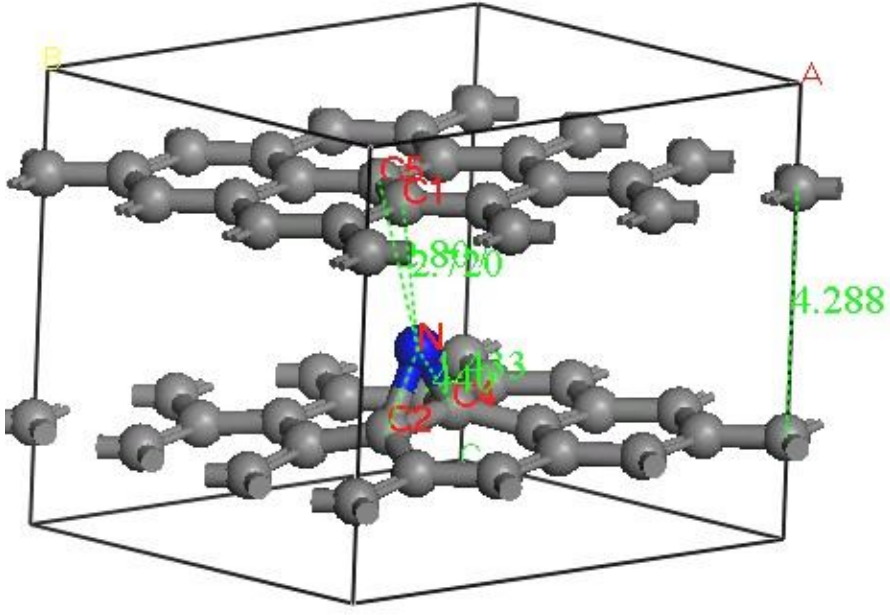
(c)

Şekil 4.43. (Devam) C7 (C_{37}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

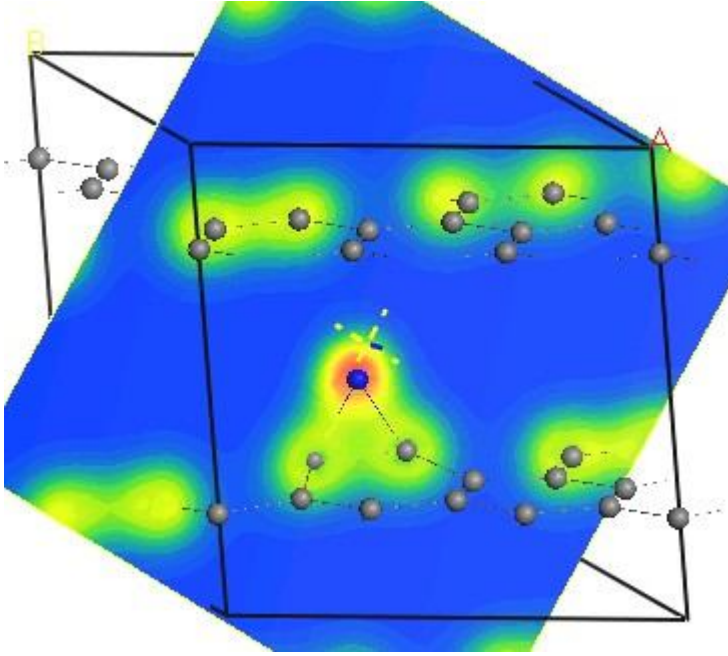


(a)

Şekil 4.44. C8 (NC_{36}) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi



(b)



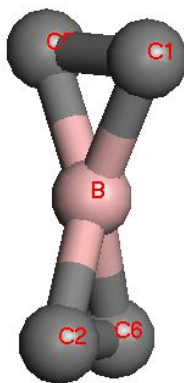
(c)

Şekil 4.44. (Devam) C8 (NC₃₆) yapısının optimize (a) öncesi, (b) sonrası birim hücre yapıları, (c)elektron yoğunluğu gösterimi

BC₃₆ yapısının farklı formlarının C1 (BC₃₆), C2 (BC₃₆), C3 (BC₃₆), C4 (BC₃₆), C5 (BC₃₆), C6 (B₂C₃₄), C7 (C₃₇) ve C8 (NC₃₆) yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları (C-C, C-B, N-C), tabakalar arasındaki (L1-L2) uzaklıkları hesaplandı ve Çizelge 4.26- Çizelge 4.33’de verildi. Bazı yapıların yakın komşulukları ile yaptığı bağlar Şekil 4.45-Şekil 4.50’de gösterilmiştir.

Çizelge 4.26. C1 (BC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

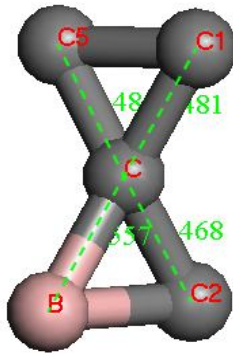
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C1 (BC ₃₆)	C1-B	1,591	3,467
	C5-B	1,589	
	C2-B	1,591	
	C6-B	1,589	
	C1-C5	1,510	
	C2-C6	1,510	



Şekil 4.45. C1 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.27. C2 (BC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

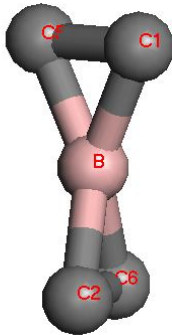
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C2 (BC ₃₆)	C-C1	1,481	3,420
	C-B	1,557	
	C-C5	1,486	
	C-C2	1,468	
	C1-C5	1,555	
	B-C2	1,627	
	B-C14	1,479	
	B-C16	1,496	



Şekil 4.46. C2 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.28. C3 (BC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

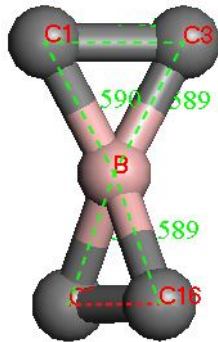
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C3 (BC ₃₆)	C1-B	1,591	3,465
	C5-B	1,590	
	C2-B	1,588	
	C6-B	1,590	
	C1-C5	1,510	
	C2-C6	1,511	



Şekil 4.47. C3 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.29. C4 (BC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

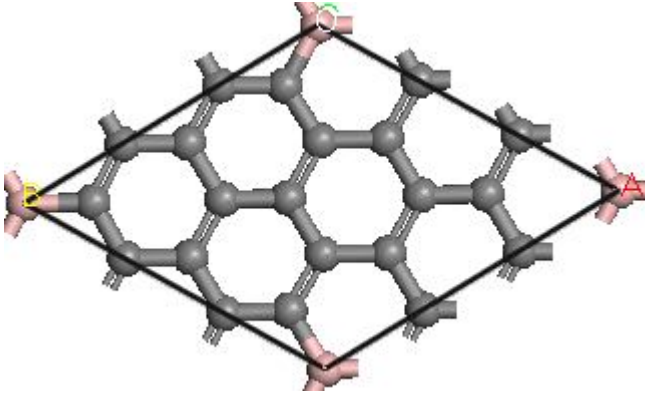
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C2 (BC ₃₆)	C1-B	1,590	2,903
	C3-B	1,589	
	C2-B	1,591	
	C16-B	1,589	
	C1-C3	1,511	
	C2-C16	1,509	



Şekil 4.48. C4 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.30. C5 (B_2C_{34}) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

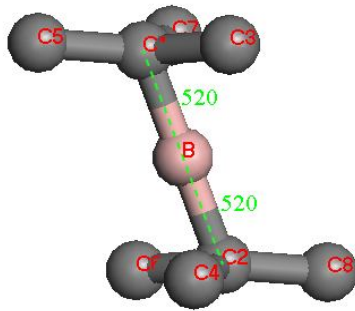
Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C5 (B_2C_{34})	B-C	1,478	3,349
	C3-C7	1,401	
	C7-C11	1,409	
	C13-C15	1,421	
	C4-C8	1,401	
	C8-C12	1,408	
	C14-C16	1,421	



Şekil 4.49. C5 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.31. C6 (BC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C6 (BC ₃₆)	C1-B	1,520	3,277
	C2-B	1,520	
	C1-C3	1,467	
	C1-C5	1,442	
	C1-C7	1,466	
	C2-C4	1,467	
	C2-C6	1,466	
	C2-C8	1,442	



Şekil 4.50. C6 yapısının yakın komşulukları ile yaptığı bağların gösterimi

Çizelge 4.32. C7 (C₃₇) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C7 (C ₃₇)	C-C1	3,050	4,300
	C-C3	3,043	
	C-C5	3,060	
	C-C2	1,495	
	C-C14	1,499	
	C14-C2	1,527	
	C1-C5	1,411	

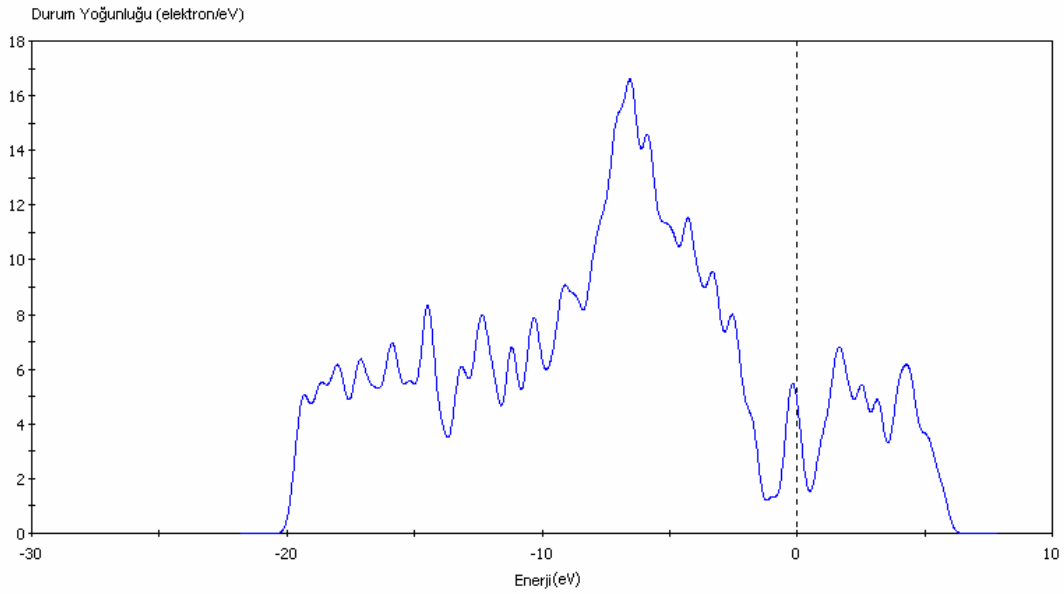
Çizelge 4.33. C8 (NC₃₆) yapısının optimizasyon sonrası bor atomu ile yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

Form	Bağlar	(Å)	L1-L2 (Å)
C8 (NC ₃₆)	C2-N	1,440	4,271
	C4-N	1,441	
	C1-N	2,817	
	C5-N	2,925	
	C2-C4	1,542	
	C1-C5	1,410	

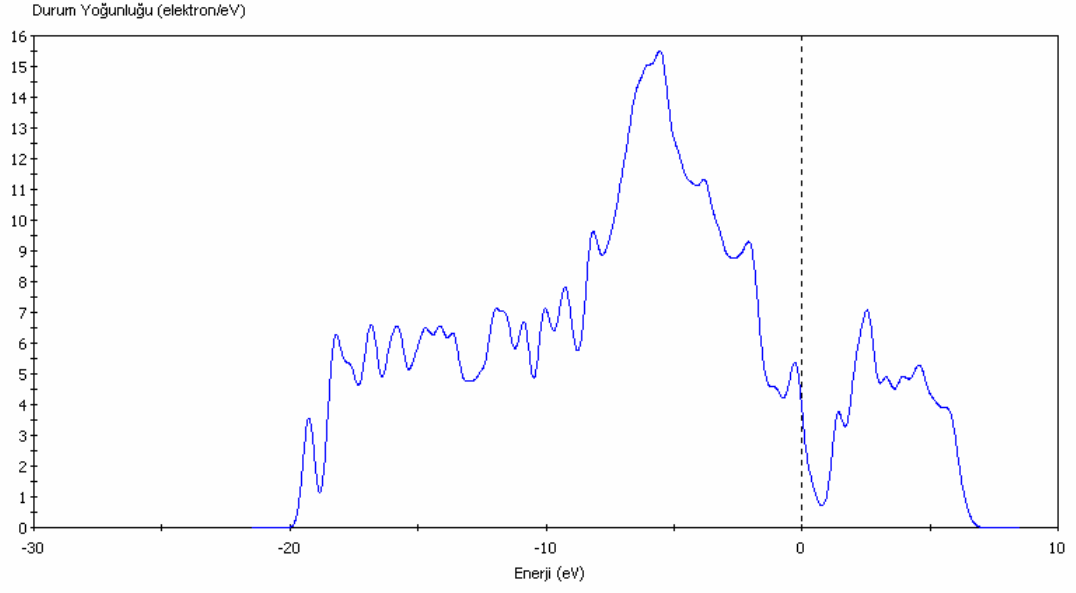
Genel olarak, grafit katkılanan atomun bor, karbon ve azot olması ile tabakalar arası mesafelerin değiştiği Çizelge 4.27- Çizelge 4.33'den görülmektedir. 36 karbon atomlu grafit yapılar arasına bir bor atomu yerleştirildiğinde tabakalar arası mesafe 3,400 Å iken 3,467 Å olmuş Çizelge 4.27'de mesafenin küçük oranda büyüdüğü,

yapının iki tabaka arasında bağ yaptığı elektron yoğunluğu haritasından görüldü (Şekil 4.37). Aynı yapıya karbon atomu yerleştirildiğinde tabakalar arası mesafe 4,300 Å olduğu, azot atomu yerleştirildiğinde de 4,271 Å olduğu, mesafenin büyüdüğü görüldü. Elektron yoğunluğu haritalarına bakıldığında (Şekil 4.43- Şekil 4.44) karbon ve azot atomlarının alt tabaka ile bağ yaptığı üst tabakayı iterek bağı kopardığı söylenebilir.

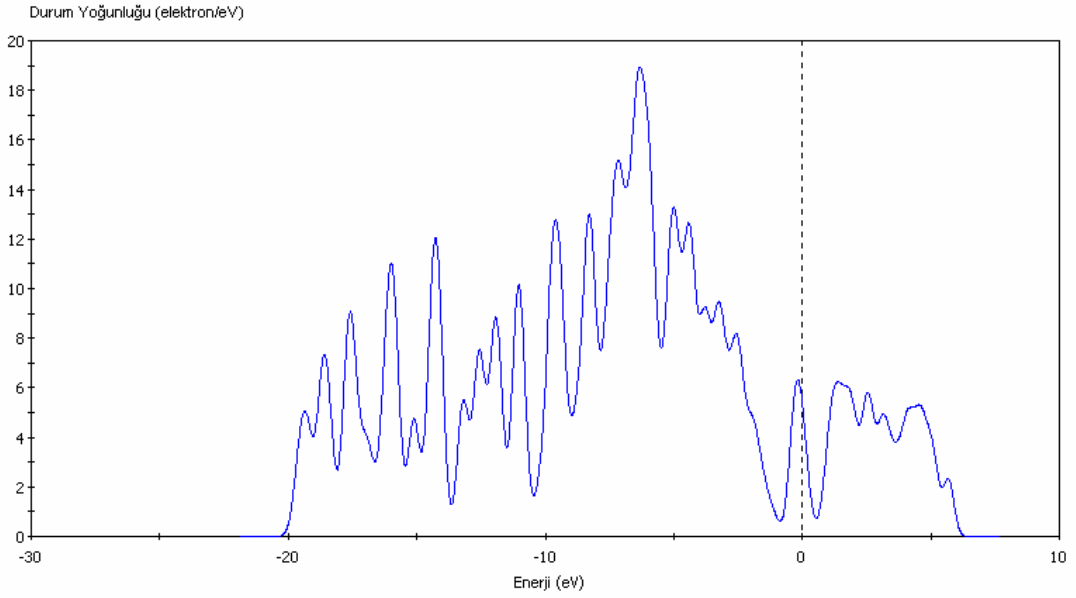
BC₃₆ yapısının farklı formlarının C1 (BC₃₆), C2 (BC₃₆), C3 (BC₃₆), C4 (BC₃₆), C5 (BC₃₆), C6 (B₂C₃₄), C7 (C₃₇) ve C8 (NC₃₆) yapısının toplam durum yoğunluğu hesaplandı. Farklı formlar için hesaplanmış toplam durum yoğunluğu Şekil 4.51- Şekil 4.58’de verildi.



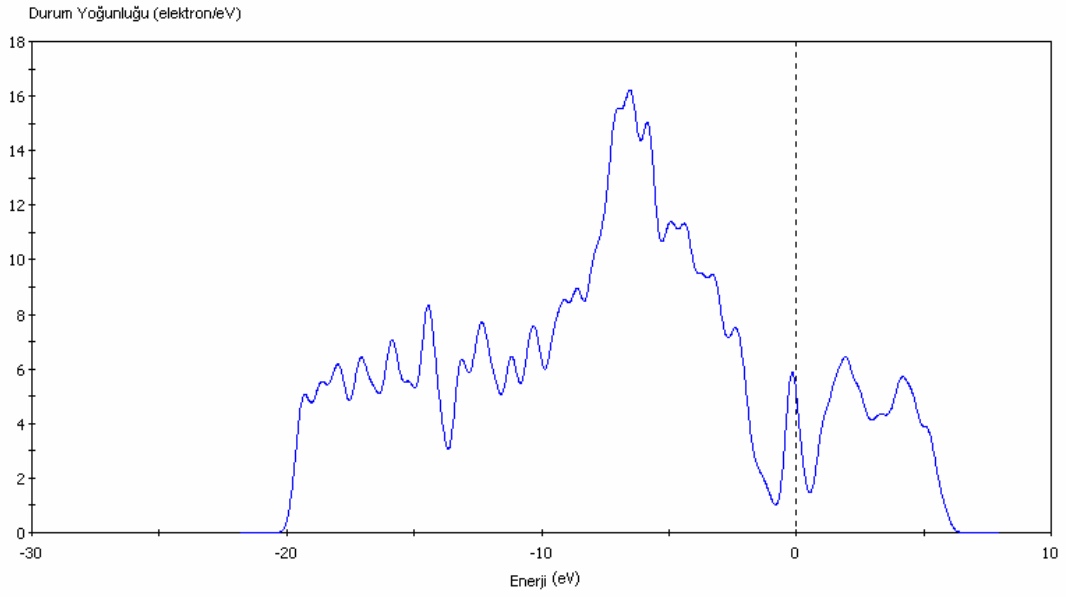
Şekil 4.51. C1 (BC₃₆) yapısının durum yoğunluğu



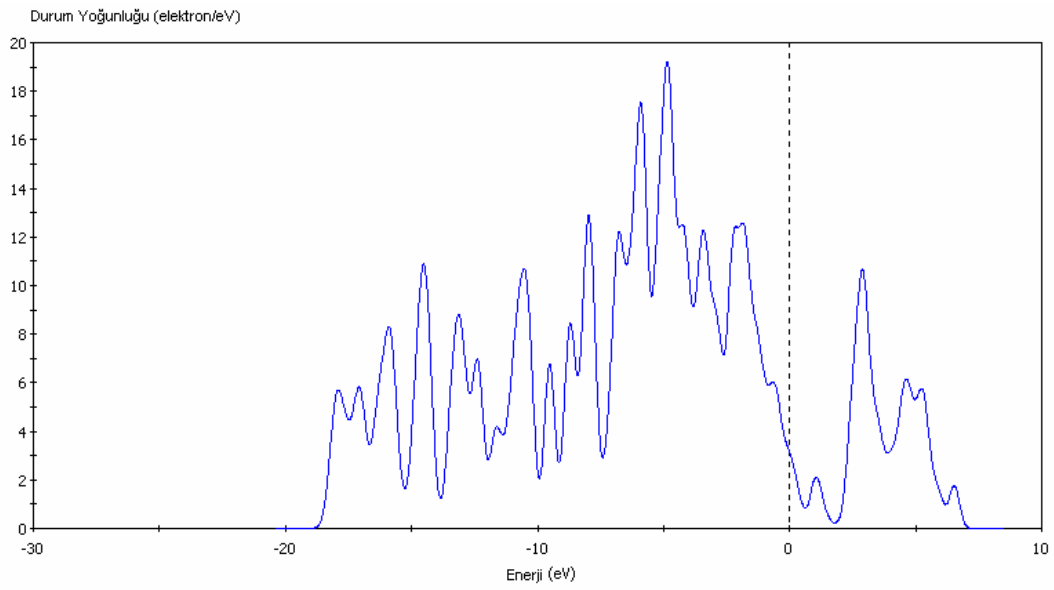
Şekil 4.52. C2 (BC₃₆) yapısının durum yoğunluğu



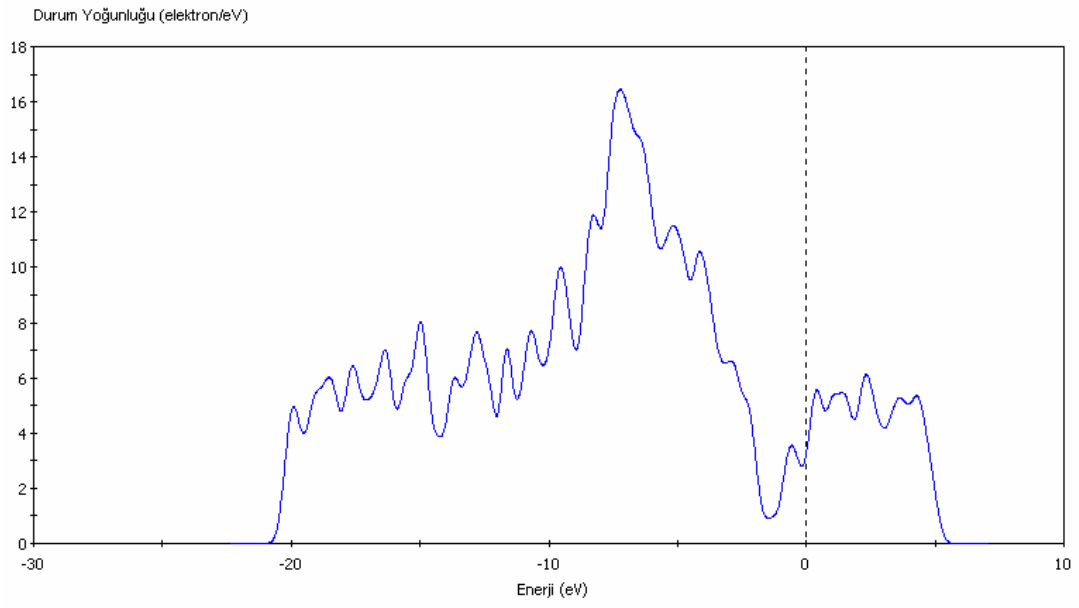
Şekil 4.53. C3 (BC₃₆) yapısının durum yoğunluğu



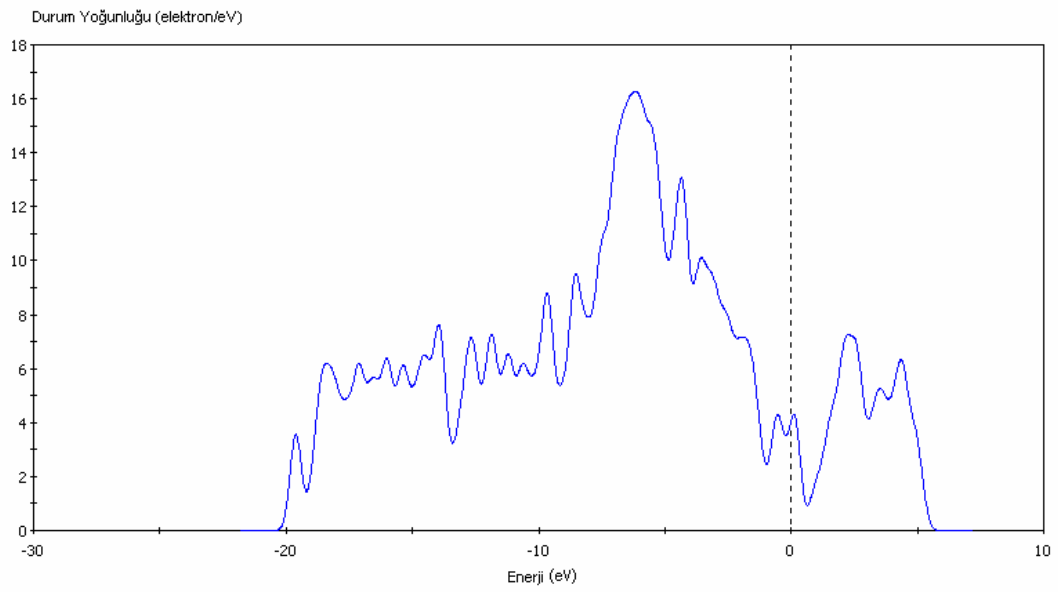
Şekil 4.54. C4 (BC₃₆) yapısının durum yoğunluğu



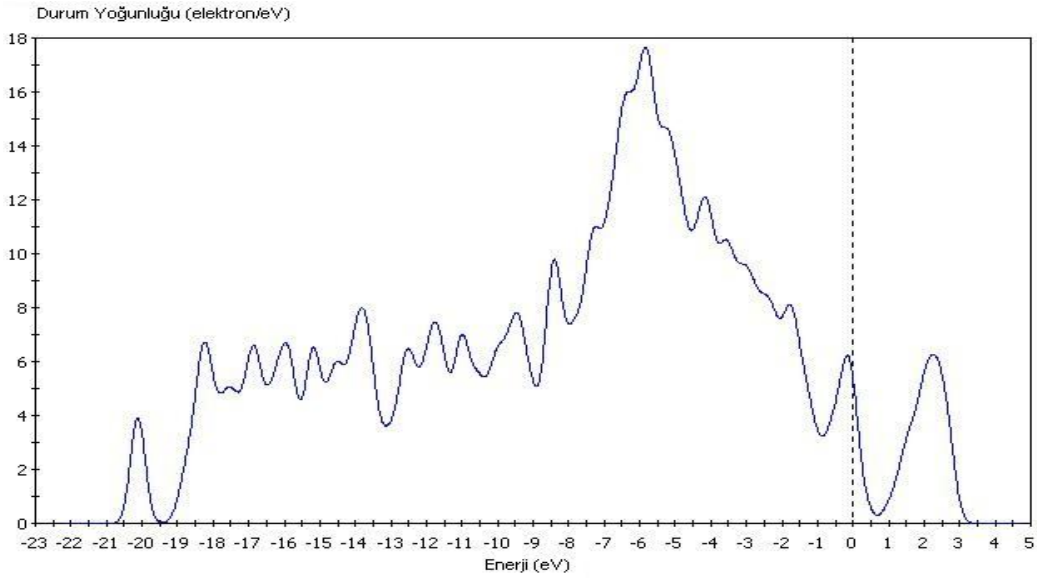
Şekil 4.55. C5 (BC₃₆) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.56. C6 (B₂C₃₄) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.57. C7 (C₃₇) yapısının durum yoğunluğu



Şekil 4.58. C8 (NC₃₆) yapısının durum yoğunluğu

Geometrik optimize edilen BC₃₆ yapısının farklı formlarının C1 (BC₃₆), C2 (BC₃₆), C3 (BC₃₆), C4 (BC₃₆), C5 (BC₃₆), C6 (B₂C₃₄), C7 (C₃₇) ve C8 (NC₃₆) toplam enerjisi, oluşum (formation) enerjisi hesaplanmış, Çizelge 4.19’da toplam enerji (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f) verilmiştir.

Çizelge 4.34. C1 (BC₃₆), C2 (BC₃₆), C3 (BC₃₆), C4 (BC₃₆), C5 (BC₃₆), C6 (B₂C₃₄), C7 (C₃₇) ve C8 (NC₃₆) yapılarının toplam enerji (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f)

Farklı Formlar	E_n (eV)	E_f (eV)
C1 (BC ₃₆)	-5672,330	-368,630
C2 (BC ₃₆)	-5671,203	-367,504
C3 (BC ₃₆)	-5672,330	-368,630
C4 (BC ₃₆)	-5672,328	-368,628

C5 (B_2C_{34})	-5440, 900	-357,731
C6 (BC_{36})	-5671,418	-367,717
C7 (C_{37})	-5747,8128	-368,958
C8 (NC_{36})	-5865,644	-370,099

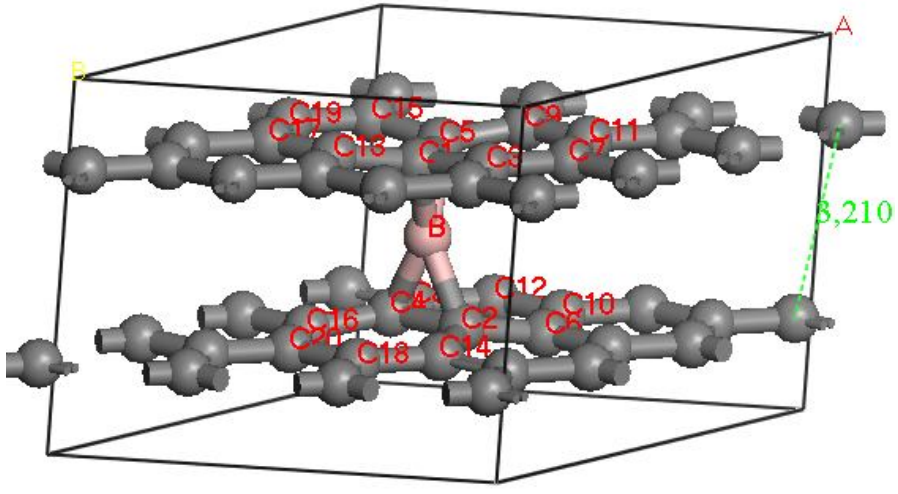
4.7. C1 Formunun Değişik Basınçlarda İncelenmesi (5GPa, 10GPa, 15GPa)

C1 (BC_{36}) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulanarak optimize edildi. Yapılan optimize sonucunda yapının birim örgü parametreleri, atomlar arası bağ uzunlukları (C-C, B-C), durum yoğunlukları, elektron yoğunlukları ve toplam enerjileri hesaplandı.

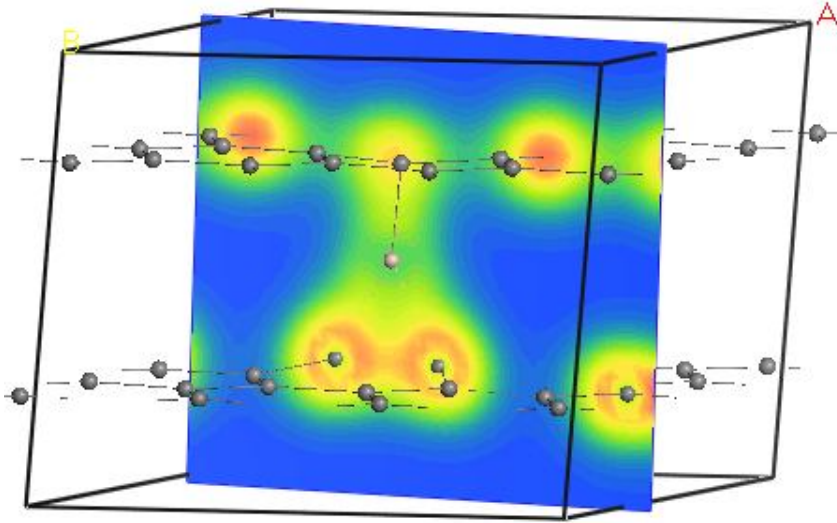
C1 (BC_{36}) yapısının geometri optimizasyon sonrasında birim örgü parametreleri Çizelge 4.35’de verildi. Şekil 4.58-Şekil 4.60’da ise sırasıyla birim hücre, elektron yoğunluğu gösterimi verildi.

Çizelge 4.35. C1 Formunun değişik basınçlarda geometri optimizasyon sonrası birim örgü parametreleri

Farklı Formlar	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
C1 (5GPa)	7,34	7,34	6,16	87,09	92,91	120,12
C1 (10GPa)	7,32	7,32	5,87	85,98	94,02	120,16
C1 (15GPa)	7,30	7,30	5,68	82,75	97,26	120,45

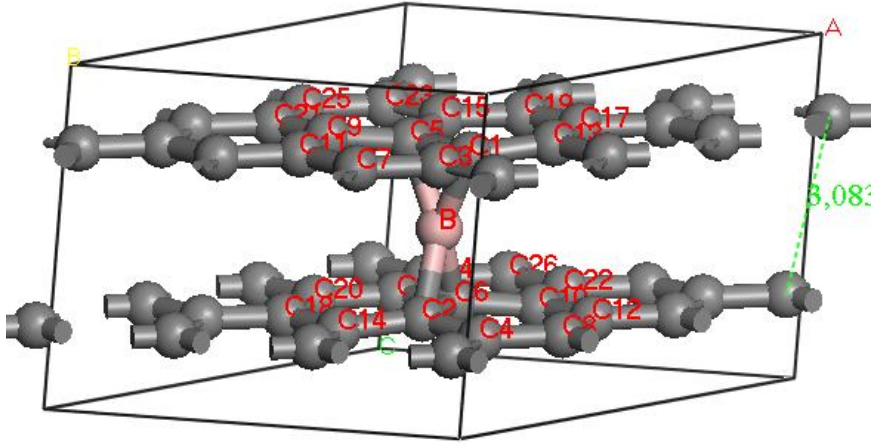


(a)

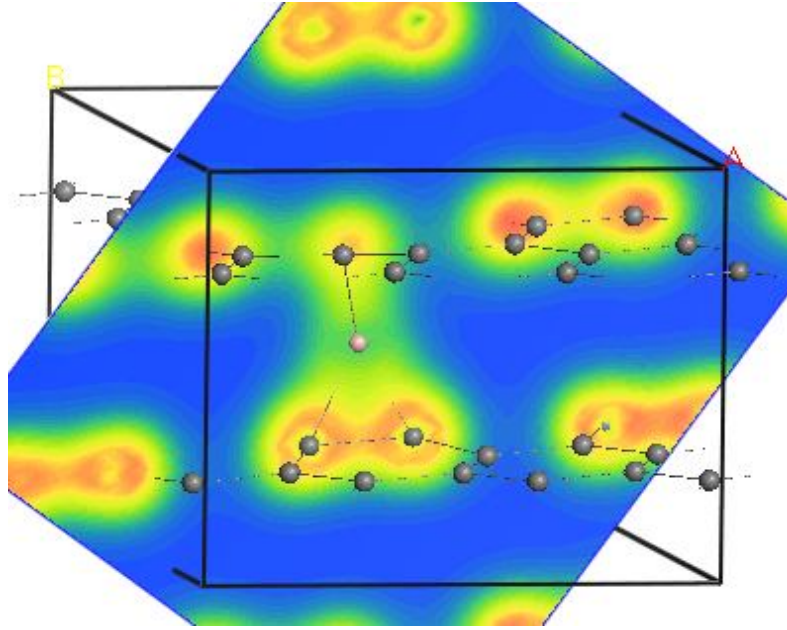


(b)

Şekil 4.59. C1 (5GPa) yapısının optimize (a) sonrası birim hücre yapıları, (b) elektron yoğunluğu gösterimi

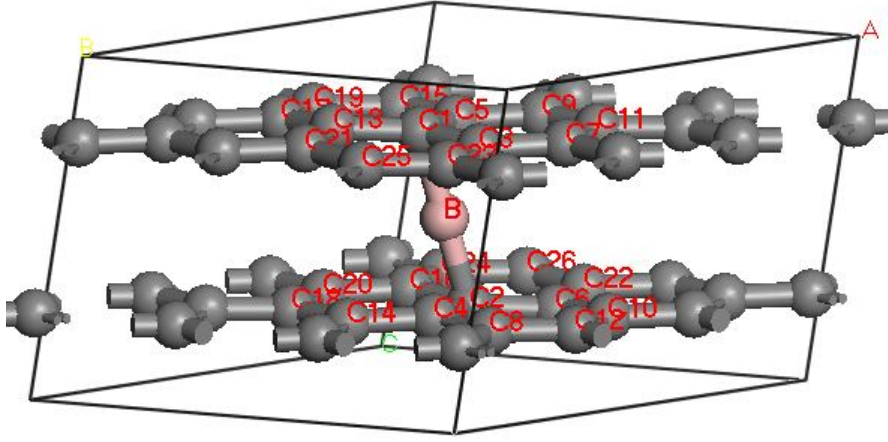


(a)

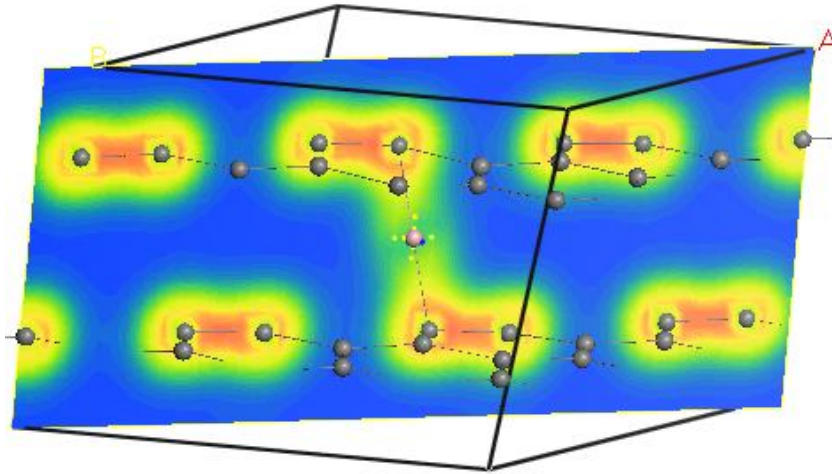


(b)

Şekil 4.60. C1 (10GPa) yapısının optimize (a) sonrası birim hücre yapıları, (b) elektron yoğunluğu gösterimi



(a)



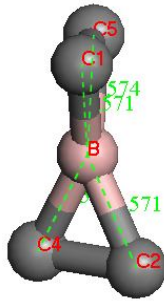
(b)

Şekil 4.61. C1 (15GPa) yapısının optimize (a) sonrası (birim hücre yapıları, b) elektron yoğunluğu gösterimi

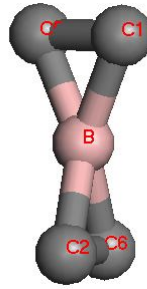
C1 (BC_{36}) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2) hesaplandı ve Çizelge 4.36'da verildi. Yapıların yakın komşulukları ile yaptığı bağlar Şekil 4.61'de verildi.

Çizelge 4.36. C1 (BC₃₆) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yakın komşulukları arasındaki bağ uzunlukları, tabakalar arası mesafe (L1-L2)

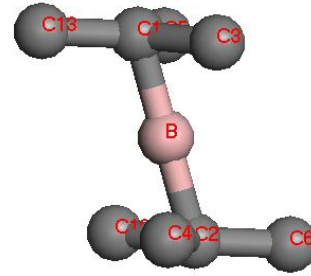
Form	Bağlar	5GPa (Å)	10GPa (Å)	15GPa (Å)	5GPa L1-L2 (Å)	10GPa L1-L2 (Å)	15GPa L1-L2 (Å)
C1 (BC ₃₆)	C1-B	1,571	1,568	1,513	3,210	3,083	2,867
	C2-B	1,571	1,568	1,513			
	C1-C5	1,498	1,488	1,442			
	C5-B	1,574	1,564	-			
	C4-B	1,574	-	-			
	C6-B	-	1,564	-			
	C2-C4	1,498	-	1,442			
	C2-C6	-	1,488	1,415			



(a)



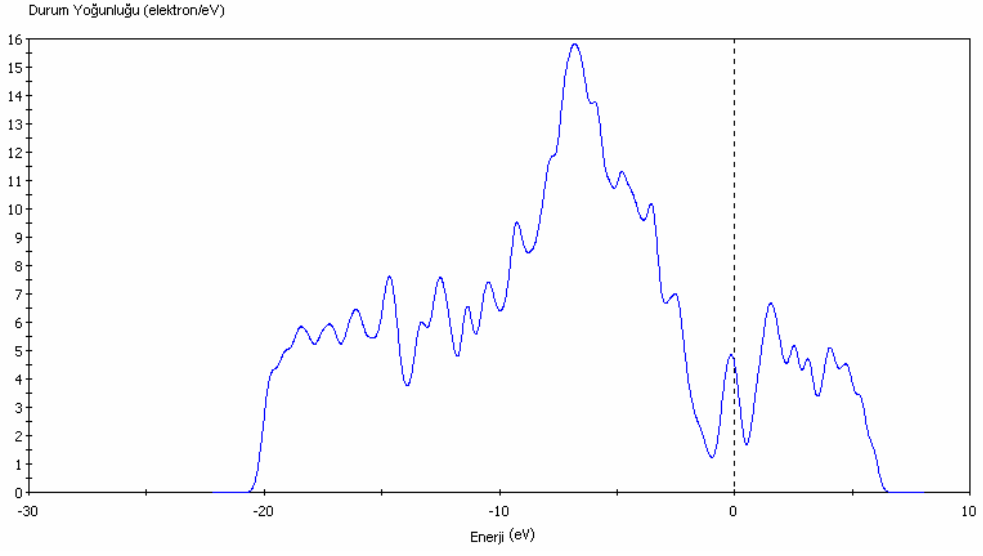
(b)



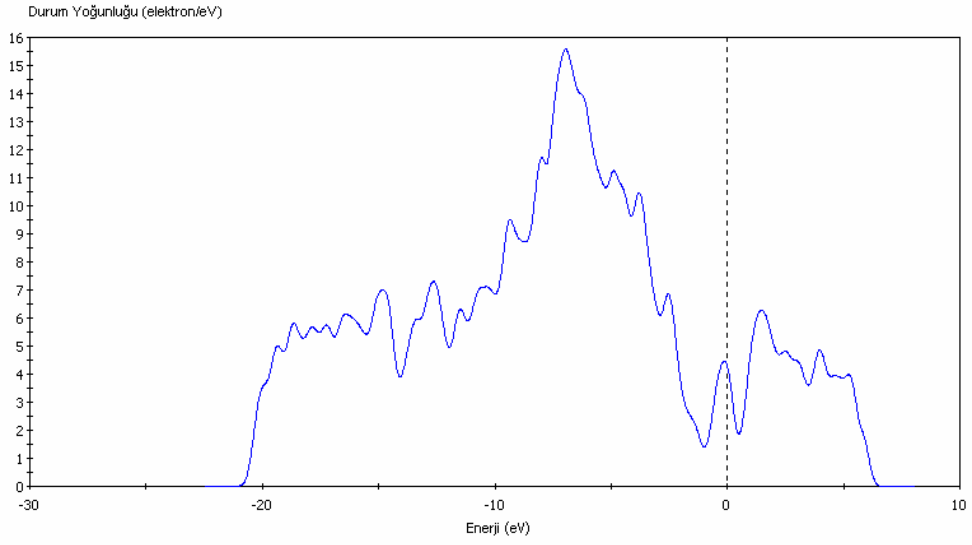
(c)

Şekil 4.62. Yapıların yakın komşulukları ile yaptığı bağlar (a) 5GPa (b) 10GPa (c) 15GPa

C1 (BC₃₆) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yapının toplam durum yoğunluğu hesaplandı ve Şekil 4.62’de verildi.

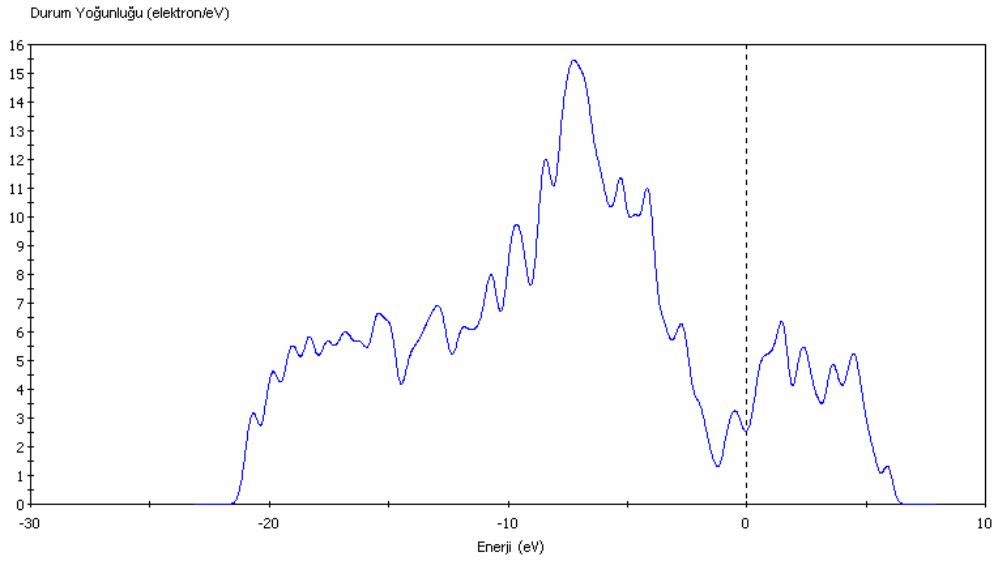


(a)



(b)

Şekil 4.63. C1 (BC_{36}) yapısına (a) 5GPa, (b) 10GPa, (c) 15GPa basınç uygulandığında yapıların toplam durum yoğunluğu



(c)

Şekil 4.63. (Devam) C1 (BC_{36}) yapısına (a) 5GPa, (b) 10GPa, (c) 15GPa basınç uygulandığında yapıların toplam durum yoğunluğu

C1 (BC_{36}) yapısına değişik basınç uygulandığında yapıların toplam durum yoğunluğunda önemli bir değişiklik görülmemektedir. Katmanlar arası mesafede ve atomlar arası bağ uzunluklarında azalma olmaktadır. C1 (BC_{36}) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yapının toplam enerjisi, oluşum (formation) enerjisi hesaplanmış, Çizelge 4.37’de verilmiştir.

Çizelge 4.37. C1 (BC_{36}) yapısına 5GPa, 10GPa, 15GPa basınç uygulandığında yapının toplam enerjisi (E_n), oluşum (formation) enerjisi (E_f)

Formlar	$E_n(\text{eV})$	$E_f(\text{eV})$
C1 (5GPa)	-5672,086	-375,386
C2 (10GPa)	-5671,443	-374,744
C3 (15GPa)	-5669,856	-375,157

4.8. BC₃₆ Yapısının Elastik Sabitlerinin Hesaplanması

Daha önce optimize yaptığımız BC₃₆ yapısının elastik sabitleri ve Bulk modülü hesaplandı. Bulunan elastik sabitler Çizelge 4.38’de ve bulk modülü ise Çizelge 4.39’da verildi.

Çizelge 4.38. BC₃₆ yapısının elastik sabitleri

id	i	j	C _{ij} (GPa)
1	1	1	984,2361
2	2	2	1007,24860
3	3	3	30,63340
4	4	4	12,91220
5	5	5	13,52495
6	6	6	396,32845
7	1	2	195,95745
8	1	3	10,72802
9	1	4	3,72135
10	1	5	-10,29123
11	1	6	-8,70292
12	2	3	16,37580
13	2	4	18,52972
14	2	5	-2,00250
15	2	6	4,41335
16	3	4	-2,32670
17	3	5	2,12338
18	3	6	-4,51110
19	4	5	2,24572
20	4	6	-4,09163
21	5	6	7,63250

Çizelge 4.39. BC₃₆ yapısının Bulk Modülü

Yapı	B (GPa)
BC ₃₆	29,30687

Çizelge 4.38. hesapladığımız elastik sabitleri kararlılık şartlarına uymaktadır. Elastik sabitleri kararlılık şartları Eş. 4.1’de verildi.

$$C_{12}>0, \quad C_{33}>0, \quad C_{66}=(C_{11}-C_{12})/2>0, \quad (C_{11}+C_{12})-2C_{13}^2/C_{33}>0, \quad C_{44}>0 \quad (4.1)$$

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada 4, 16 ve 36 karbon atomlu grafit yapılara bor, karbon ve azot atomlarının katkılanmasıyla oluşturulan 20 değişik kristal yapının yoğunluk fonksiyonu teorisi kullanılarak Castep paket programıyla optimizasyonu yapıldı.

Elde edilen hesaplamalarla değişik fazların yapısal parametreleri, toplam enerjileri, oluşum enerjileri ve katkılanan bor, karbon ve azot'un grafit tabakalarda oluşturduğu değişiklikler tablolar halinde verildi. Bütün yapıların metalik karakter gösterdikleri durum yoğunluğu grafiklerinden söylenebilir. Elde edilen elektron yoğunluk haritaları ile yapıdaki yeni oluşan ve/veya kırılan bağların hangileri olduğu tespit edildi ve sonuçlar tablolar halinde listelendi. 4, 16 ve 36 karbonlu grafit yapılara bor, karbon ve azot atomları yerleştirilerek çalışılan 20 değişik yapıda, bor atomu iki tabaka arasına yerleştirildiğinde bağ yaptığı elektron yoğunluğu haritalarından görüldü aynı şekilde karbon ve azot atomları yerleştirildiğinde tek tabaka ile bağ yaptığı diğer tabakayı ittiği görüldü. Karbon ve azot atomlarının katkılanmasıyla tabakalar arası mesafenin borun katkılanmasıyla oluşan mesafesine oranla arttığı gözlemlendi.

Ayrıca bor katkılı grafit yapıların basınç altındaki değişik oluşumlarını incelemek için 5GPa, 10GPa ve 15GPa basınç uygulanarak optimize yapıldı. Optimize sonucunda 5GPa, 10GPa ve 15GPa basınç uygulandığında C-B bağ uzunlukları 1,571 Å'dan 1,568 Å ve 1,513 Å azaldı benzer şekilde iki tabaka arası mesafede 3,210 Å'dan 3,083 Å ve 2,867 Å azaldı. Bu değişiklikten bağ mesafelerinin ve iki tabaka arası mesafenin kısaldığı daha sıkı paketlenmenin olduğu söylenebilir.

36 karbon atomlu grafit yapısına borun iki tabaka arasına yerleştirilmesiyle elde edilen BC₃₆ yapısının elastik sabitleri hesaplanarak, mekanik kararlılık şartlarını sağladığı görüldü. Ayrıca, elastik sabitleri kullanılarak bulk modülü hesaplandı ve 29,3 GPa olarak bulundu. Karbonun elmas fazının bulk modülü yaklaşık 440 GPa olduğu göz önüne alınırsa bu yapının bulk modülünün çok düşük olduğu söylenebilir.

KAYNAKLAR

1. Suarez-Martinez, I., Savini, G., El-Barbary, A. A., Heggie, M. I., “Simulations of Boron Diffusion in Graphite”, *Phys. Rev. Lett.*, 98: 15501-15504 (2006).
2. Endo, M., Kim, C., Karaki, T., “Structural analysis of the B-doped mesophase pitch based graphite fibers by Raman spectroscopy”, *Phys. Rev. Lett.*, 58: 8991-8996 (1998).
3. Brocklehurst, J. E., Kelly, B. T., Gilchrist, K. E., “Anisotropic lattice expansion and shrinkage of hexagonal TiAlN and CrAlN films”, *Chem. Phys.*, 17: 175-179 (1981).
4. Lowell, C. E., “Solid Solution of Boron in Graphite”, *J. Am. Ceram. Soc.*, 50: 142-144 (1967).
5. Endo, M., Kim, C., Nishimura, K., Fujino, T., Miyashita, K., “Recent development of carbon materials for Li ion batteries”, *Phys. Rev. Lett.*, Carbon 38: 183-197 (2000)
6. Nishimura, K., Endo, M., “Carbon fibers, production process therefor and electrode for batteries”, *U.S. Patent*, 1298: 6946110-6946111 (2005).
7. Segall, M. D., Lindan, P. J. D., Probert, M. J., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Clark, S. J., Payne, M. C., “First principles methods using Castep”, *J. Phys., Condens Matter*, 14: 2717-2743 (2002).
8. Ceperley, D. M., Alder, B. J., “Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method”, *Phys. Rev. Lett.*, 45: 566-569 (1980).
9. Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A., Joannopoulos, J. D., “Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations:molecular dynamics and conjugate gradients”, *Rev. Mod. Phys.*, 64: 1045-1097(1992).
10. Stewart, J., “Quantum chemistry program Exchange catalog”, *Indiana University, Blumington*, 14: 455-488 (1983).
11. Hohenberg, P., Kohn, W., “Inhomogeneous Electron Gas”, *Phys. Rev. Lett.*, 136: B8644-B871 (1964).
12. Jones, R. O., Gunnarsson, O., “The density functional formalism, its applications and prospects”, *Rev. Mod. Phys.*, 61 (3): 689-746 (1989).
13. Akıncı, Ü., “Yogunluk fonksiyonu teorisi”, Yüksek Lisans Tezi, *Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, 4-5 (2005).

14. Goedecker, S., Teter, M., Hutter, J., “Separable dual-space Gaussian pseudopotentials”, *Phys. Rev. B*, 54 (3): 1703–1710 (1996).
15. Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M., “Generalized Gradient Approximation Made Simple”, *Phys. Rev. Lett.*, 77 (18): 3865–3868 (1996).
16. İnternet: Clark, S., Universty of Durham, “Gradient corrections, other functionals”, Castep Workshop., http://cmt.dur.ac.uk/sjc/Castep_Lectures2/ (2001).
17. Öge, U., “Tek Duvarlı (8,0) Zig-Zag Karbon Nanotüpten Bor Nitrür Nanotüp Sentezlenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 2-24 (2006).
18. Greenwood, N.N., “Boron”, *Pergamon Press*, Oxford, (1975), p.327 ; also as Chap. 11, “Comphrehensive Inorganic Chemistry”, *Pergamon Press*, Oxford, Vol.1: 327-328 (1973).
19. Gmelin, "Handbook of Inorganic Chemistry, Boron Supplement", *Elemental Boron*, Boron Carbides, Vol.2: 242-243 (1981).
20. İnternet : Etibor A.Ş., “Bor”, <http://www.etiholding.gov.tr> (2009).
21. internet : Ulusal Bor Arastırma Enstitüsü (BOREN) “ Bor ve Özellikleri”, www.boren.gov.tr/borhk.htm (2007).
22. İnternet : Eti Maden işletmeleri Genel Müdürlüğü, “Bor ve Bor Rezervleri”, <http://www.etimaden.gov.tr> (2007).
23. İnternet : Türkiye Maden Mühendisleri Odası Birliği (TMMOB), “Bor Raporu”, www.maden.org.tr (2005).
24. internet : Wikipedia, “Carbon”, <http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon> (2009).
25. Gamaly, E.G., “TW Carbon nanotubes: preparation and properties”, *CRC Press*, Ebbesen, 52: 2083-2085 (1997).
26. Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G., “Carbon nanotubes: synthesis, structures, properties and applications”, *Applied Physics*, 80: 91-92 (2001).
27. internet: Wikipedia, “Graphene”, <http://en.wikipedia.org/wiki/Graphene> (2009).
28. İnternet: Webelements, “Elements”, <http://www.webelements.com/> (2009).
29. Imai, Y., Watanabe, A., “Energetic evaluation of possible stacking structures of Li-intercalation in graphite using a first-principle pseudopotential calculation”, *Journal of Alloys, Compounds* 439: 258-267 (2007).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ABADAN, Erkan
Uyruğu : T.C.
Doğum Tarihi ve Yeri : 01.01.1983/Polatlı
Medeni Hali : Bekar
Telefon : 05058426656
e-mail : erkanabadan@mynet.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Lisans	Abant İzzet Baysal Üniversitesi Fizik-İngilizce	2006
Lise	Polatlı Lisesi	2001

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Tenis