

**BC<sub>2</sub>N NANO TÜPLER**

**İlknur BABAYİĞİT**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2008  
ANKARA**

İlknur BABAYİĞİT tarafından hazırlanan BC<sub>2</sub>N NANO TÜPLER adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Tez Danışmanı, Atom ve Molekül Fiziği Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Atom ve Molekül Fiziği Anabilim Dalı Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Bora ALKAN

Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Atom ve Molekül Fiziği Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Bülent KUTLU

Genel Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Tarih

23.01.2008

Bu tez ile Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Nermin ERTAN

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.

İlknur Babayigit

**BC<sub>2</sub>N NANO TÜPLER****(Yüksek Lisans Tezi)****İlknur BABAYİĞİT****GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ****Ocak 2008****ÖZET**

Nano tüpler, pek çok farklı malzemenin gösterdikleri özellikleri tek başına bünyesinde toplamaktadır. Bu tezde, BC<sub>2</sub>N nanotüplerin geometrik yapıları elde edildi. Bütün hesaplamalar, Castep paket programı ile GGA- PBE ve 300 kesilim enerjisi kullanılarak yapıldı. Geometri optimizasyonu sonrası oluşan yapıların enerji bant yapısı ve elektron durum yoğunluğu incelendi.

**Bilim Kodu : 202.1.019****Anahtar Kelimeler : BCN nano tüpler, DFT, Castep****Sayfa Adedi : 48****Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK**

**BC<sub>2</sub>N NANOTUBES****(M.Sc. Thesis)****İlknur BABAYİĞİT****GAZI UNIVERSITY****INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY****January 2008****ABSTRACT**

**Nanotubes involve characteristics of many different materials in their structures by themselves. In this thesis the geometry of empty BC<sub>2</sub>N nanotubes has been constructed. All computations have been done with GGA-PBE and 300 cut-off energy using Castep package program. Geometric structure, energy band diagrams and density of states properties had been examined after a geometry optimization calculations.**

**Science Code : 202.1.019****Key Words : BCN nanotubes, DFT, Castep****Page Number : 48****Adviser : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK**

## TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince değerli yardım ve katkılarıyla, engin tecrübesi ve yorumlarıyla, gösterdiği büyük sabırla beni yönlendiren danışman hocam Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK' e teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans eğitimim boyunca hiç bir zaman desteğini, yardımını, maddi-manevi emeğini hiçbir zaman esirgemeyen hocam Yrd. Doç. Dr. Mehmet Bahat' ta teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her an maddi manevi desteklerini hissettiğim, her durumda yanımda olan, destekleyen, üzüntümü ve mutluluğumu her zaman paylaşan kız kardeşim Sonnur Babayiğit'e sonsuz teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca yardımlarını ve manevi desteklerini her zaman hissettiğim arkadaşlarıma özellikle Pınar ÇABUK'a ve diğer arkadaşlarıma teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

	<b>Sayfa</b>
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	viii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
2. TEMEL BİLGİLER.....	2
2.1. Moleküler Modelleme.....	2
2.1.1. Moleküler mekanik metotlar.....	2
2.1.2. Elektronik yapı metotları.....	2
2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT).....	4
2.3. Nano teknoloji.....	7
2.3.1. Nano tüpler.....	10
2.3.2. BCN nano tüpler.....	15
2.4. Castep.....	16
3. HESAPLAMALAR.....	18
3.1. BC <sub>2</sub> N Nano tüpler.....	18
3.1.1. BC <sub>2</sub> N (n,0), n=5-10 zigzag nano tüpler.....	21
3.1.2. BC <sub>2</sub> N (n,m), n=m=5-10 armchair nano tüpler.....	31
4. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	43
KAYNAKLAR.....	44
ÖZGEÇMİŞ.....	48

## ÇİZELGELERİN LİSTESİ

<b>Çizelge</b>	<b>Sayfa</b>
Çizelge 3.1. k nokta sayısı değerleri ve kesilim enerjilerine göre elde ettiğimiz enerji değerlerinin grafiği.....	19
Çizelge 3.2. Hesaplamalarda kullanılan parametrelerin gösterimi.....	20
Çizelge 3.3. BC <sub>2</sub> N (5-10) zigzag nanotüplerin birim örgü parametreleri.....	24
Çizelge 3.4. BC <sub>2</sub> N (5-10) zigzag nanotüplerin bağ uzunlukları (C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları).....	24
Çizelge 3.5. BC <sub>2</sub> N (5-10) zigzag nanotüplerin toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjisi.....	25
Çizelge 3.6. BC <sub>2</sub> N (5-10) armchair nanotüplerin birim örgü parametreleri.....	35
Çizelge 3.7. BC <sub>2</sub> N (5-10) armchair nanotüplerin bağ uzunlukları(C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları).....	35
Çizelge 3.8. BC <sub>2</sub> N (5-10) zigzag nanotüplerin toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjisi.....	36



## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.3.1.1.Zigzag, chiral ve armchair yapıların gösterimi.....	11
Şekil 3.1. BC <sub>2</sub> N (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	21
Şekil 3.2. BC <sub>2</sub> N (6,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	21
Şekil 3.3. BC <sub>2</sub> N (7,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	22
Şekil 3.4. BC <sub>2</sub> N (8,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	22
Şekil 3.5. BC <sub>2</sub> N (9,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	23
Şekil 3.6. BC <sub>2</sub> N (10,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	23
Şekil 3.7. BC <sub>2</sub> N (5,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	25
Şekil 3.8. BC <sub>2</sub> N (6,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	26
Şekil 3.9. BC <sub>2</sub> N (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	26
Şekil 3.10. BC <sub>2</sub> N (8,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	27
Şekil 3.11. BC <sub>2</sub> N (9,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	27
Şekil 3.12. BC <sub>2</sub> N (10,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	28
Şekil 3.13. BC <sub>2</sub> N (5,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	28
Şekil 3.14. BC <sub>2</sub> N (6,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	29
Şekil 3.15. BC <sub>2</sub> N (7,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	29
Şekil 3.16. BC <sub>2</sub> N (8,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	30
Şekil 3.17. BC <sub>2</sub> N (9,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	30
Şekil 3.18. BC <sub>2</sub> N (10,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	31

<b>Şekil</b>	<b>Sayfa</b>
Şekil 3.19. BC <sub>2</sub> N (5,5) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	32
Şekil 3.20. BC <sub>2</sub> N (6,6) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	32
Şekil 3.21. BC <sub>2</sub> N (7,7) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	33
Şekil 3.22. BC <sub>2</sub> N (8,8) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	33
Şekil 3.23. BC <sub>2</sub> N (9,9) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	34
Şekil 3.24. BC <sub>2</sub> N (10,10) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a)üstten, (b) yandan ve c) süper hücre olarak gösterimleri.....	34
Şekil 3.25. BC <sub>2</sub> N (5,5) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	37
Şekil 3.26. BC <sub>2</sub> N (6,6) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	37
Şekil 3.27. BC <sub>2</sub> N (7,7) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	38
Şekil 3.28. BC <sub>2</sub> N (8,8) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	38
Şekil 3.29. BC <sub>2</sub> N (9,9) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	39
Şekil 3.30. BC <sub>2</sub> N (10,10) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	39
Şekil 3.31. BC <sub>2</sub> N (5,5) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	40
Şekil 3.32. BC <sub>2</sub> N (6,6) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	40
Şekil 3.33. BC <sub>2</sub> N (7,7) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	41
Şekil 3.34. BC <sub>2</sub> N (8,8) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	41
Şekil 3.35. BC <sub>2</sub> N (9,9) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	42
Şekil 3.36. BC <sub>2</sub> N (10,10) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	42

## SİMGELER VE KISALTMALAR

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

<b>Simgeler</b>	<b>Açıklama</b>
Å	Angstrom
BCN	Boron Karbon Nitrit
eV	Elektron volt
GPa	Giga Pascal
P	Elektron yoğunluğu
<b>Kısaltmalar</b>	<b>Açıklama</b>
BPE	Perdew-Burke-Ernzerhof
CASTEP	Cambridge Serial Total Energy Package
DFT	Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi
E	Molekülün toplam enerjisi
GGA	Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı
H	Moleküler Hamiltoniyen
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
V	Potansiyel enerji
V <sub>C</sub>	Korelasyon enerjisi
V <sub>dis</sub>	Potansiyel enerji
V <sub>H</sub>	Coulomb enerjisi
V <sub>X</sub>	Değiş tokuş enerjisi
V <sub>XC</sub>	Değiş tokuş ve korelasyon enerjisi

**Kısaltmalar** **$\Psi$**  **$\epsilon$** **Açıklama**

Moleküler orbital, dalga fonksiyonu

Kinetik enerji

## 1. GİRİŞ

1980’li yılların başından itibaren “mikro-teknoloji” olarak adlandırılan teknolojiler günlük hayatımızın vazgeçilmez unsurları haline gelmiştir. Boyutları giderek küçülen güçlü bilgisayarlar, cep telefonları, kameralar vs. ticari hayatta umulmadık boyutlara ulaşmıştır [1]. Yapılan araştırmalar sayesinde teknolojiye yenilikler her geçen gün artış göstermektedir. Gündelik olarak kullandığımız birçok elektronik eşyanın kullanım fonksiyonları gelişirken, boyutları ise küçülmektedir. Teknolojideki bu gelişme, boyutlardaki küçülmeyi de beraberinde getirdiğinden nano teknoloji adını almaktadır [2].

Nano teknolojinin en önemli uygulama alanlarından biriside nano tüplerdir. Karbon nano tüpler 1991 yılında S. Iijima tarafından keşfedilmiştir. Bu tarz yapıların, büyük yüzey alanlarına sahip olması nedeni ile yüksek derecede hidrojen molekülü depolayabilme kapasitesine sahip olması beklenmektedir. Bu yüzden bu tür yapıların olabilirlik durumlarının belirlenmesi ve fiziksel özelliklerinin tespit edilmesi büyük öneme sahiptir. Karbon nano tüplerin buna ilaveten bor-nitrür nano tüplerin olabilirliği ilk olarak ab-initio hesaplamalar kullanılarak Boustani tarafından gösterilmiştir [3]. Biz de bu çalışmamızda BC<sub>2</sub>N nano tüpleri inceledik.

Çalışmamızda BC<sub>2</sub>N (5-10) zig-zag ve armchair yapıların enerjisi, bağ uzunlukları ve yasak enerji aralığı hesaplanmıştır.

Bu hesaplamalar CASTEP paket programında; yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) için Generalized Gradient Approximation (GGA) yaklaşımı ile gerçekleştirilmiştir. GGA yaklaşımında, Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) modeli kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır.

## **2. TEMEL BİLGİLER**

### **2.1. Moleküler Modelleme**

Moleküler modelleme, bir molekülün fiziksel, kimyasal özelliklerinin fizik yasalarından hareket ederek ve bilgisayar yardımı ile hesaplanarak elde edilmesi olarak açıklanabilir. Molekül modellerinin amacı; molekülün enerjisini analitik olarak yazmaktır. Enerji analitik olarak yazılabildiği zaman birçok fiziksel büyüklük hesaplanabilir [4].

Moleküler modellemede kullanılan fiziksel yöntemleri iki grupta açıklayabiliriz:

- Moleküler mekanik yöntemler
- Elektronik yapı yöntemleri

#### **2.1.1. Moleküler mekanik yöntemler**

Moleküler mekanik yöntemler; molekülün toplam potansiyel enerjisinin minimum olduğu molekül yapısını bulmak için kullanılan hesaplama yöntemidir. Hesaplamalarda elektronlar dikkate alınmaz ve molekülü oluşturan atomlar birer kütle, aralarındaki kimyasal bağlar ise bu kütleleri bağlayan yay gibi ele alınır.

#### **2.1.2. Elektronik yapı yöntemler**

Elektronik yapı yöntemleri, molekülü oluşturan atomların elektronik yapısını detaylı olarak göz önüne alarak hesaplama yapar. Moleküllerin özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan bu metotlar iki gruba ayrılır:

- Ab initio yöntemler
- Yarı deneysel (semi-emprical) yöntemler

### Ab initio yöntemleri

Kuantum mekaniğine dayanır, bu yöntemler ile molekül yapısı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir; bir tepkime mekanizması tam olarak modellenebilir. Hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre binlerce kere daha fazladır. GAUSSIAN, GAMESS HYPERCHEM, CACHE v.s. *ab initio* yöntemlerinin kullanıldığı bazı paket programlardır.

*Ab initio* Latince “başlangıçtan itibaren” anlamına gelir. Bu yöntem yarıdeneysel yöntemlerden farklıdır, deneysel parametre kullanmaz. *Ab initio* hesaplamalarında iki farklı matematiksel yaklaşım kullanılır; Hartree-Fock Self Consistent Field (HF-SCF) ve Density Functional Theory (DFT). HF modelinde, elektron-elektron etkileşimleri için ortalama bir potansiyel temel alınır. Bu yaklaşım, molekül frekanslarının hesaplanması ve molekül geometrisinin tayini için uygundur. DFT modelinde, molekül dalga fonksiyonları yerine, elektron ihtimaliyet yoğunluğu ( $\rho$ ) hesaplanır, molekül özelliklerinin tayininde çok daha doğru sonuçlar verir.

### Yarıdeneysel (semi-empirik) yöntemler

*ab initio* ve moleküler modelleme yöntemleri arasında yer alır ve kuantum mekaniğini kullanır. Bu yöntemlerde, molekül özelliklerin deneysel değerlere yakın sonuçlar vereceği parametreler mevcuttur. Schrödinger eşitliğinin yaklaşık çözümünü elde etmek için o sisteme uygun parametrelerin kullanılması gerekir. Etkileşim integralleri için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi *ab initio* yöntemlerinden çok daha kısadır. Yarıdeneysel bazı yöntemler şunlardır: CNDO, INDO, MINDO, ZINDO, AM1(Austin Model), PM3 (Parametric Method). Bu yöntemleri yapısında bulunduran paket programlarından bazıları MOPAC, AMPAC, HYPERCHEM vs. Dir.

## 2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyon teorisinin temeli 1964 yılında Hohenberg ve Kohn' un elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisi elektron yoğunluğunun ( $\rho$ ) bir fonksiyoneli olarak yazmasıdır. Sistemin taban durum özellikleri; taban durum yoğunluk ve enerji fonksiyoneli bilgisiyle tanımlanabilir [6].

Bir molekülün enerjisi veya diğer fiziksel büyüklükleri denkleminin çözülmesi ile elde edilebilir. Schrödinger denklemi,

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

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

Buradaki temel nicelik yoğunluktur. Hamiltoniyeni ile verilen  $N$  elektronlu sistem için yazılan Schrodinger denklemi,  $N$  tane tek elektron Schrodinger denklemine indirgenir [7].

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.1)$$

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

$$V(\vec{r}) = V_{dis}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

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



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

$$\rho(\vec{r}) = N \int |\Psi_0(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (2.3)$$

ile verilir. Burada  $\Psi_0$  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. Yine verilen iki önemli teorem şunlardır [7]:

- Verilen  $V_{dis}(r)$  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 kullanılabilceğini anlatır.

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

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + \int d\vec{r}' d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|} + Exc[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r})V_{dis}(\vec{r})d\vec{r} \quad (2.4)$$

Yoğunluk fonksiyoneli,

$$V_{eff} = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} + V_{xc}[\rho(\vec{r})] + V_{dis} \quad (2.5)$$

tanımlanmasıyla,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left| \Psi_i(\vec{r}) \right|^2 \quad (2.6)$$

ile verilen yoğunluğa göre minimize edilirse,

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \epsilon \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.7)$$

denklemini elde edilir. Denklem öz uyumlu çözümlenmelidir.

1. Verilen başlangıç yoğunluğundan 2.5 ile  $V_{eff}$  hesaplanır.
2.  $V_{eff}$  2.7 de yerine yazılarak  $\Psi_i$ 'ler elde edilir.
3. Bulunan  $\Psi_i$ 'ler ile 2.6 dan 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. 2.4'de yazılarak sistemin taban durumu enerjisi elde edilmiş olacaktır.

DFT' de kullanılan temel kavramları aşağıdaki gibi belirtebiliriz.

1. Elektron yoğunluğu,  $\rho = \rho(r)$  , herhangi bir noktadaki elektron yoğunluğu
2. Tek düze elektron gazı modeli; bir bölgedeki yük dağılımının, sisteme düzgün dağılmış n tane elektron ve sistemi nötralize edecek kadar pozitif yükten oluştuğu varsayımına dayalı idealize edilmiş bir modeldir. Yoğunluk fonksiyonu teorisinde enerji ifadeleri elde edilirken elektron dağılımının V hacimli bir küp içinde olduğu ve elektron yoğunluğu ( $\rho$ ) sabit kabul edilmiştir, yani  $\rho = n/V$  ile verildiği ve sistemde  $n, V \rightarrow \infty$  olduğu varsayımı yapılmıştır.

3. Fonksiyonel; bağımsız  $x$  değişkenine bağımlı değişkene fonksiyon denilir ve  $f(x)$  ile gösterilir. Bir  $F$  fonksiyonu  $f(x)$ ' e bağımlı ise bu bağımlılığa fonksiyonel denilir [8].

### 2.3. Nano Teknoloji

California'daki Foresight Enstitüsü başkanı Dr. Eric Drexler, Massachusetts Teknoloji Enstitüsü'ndeki eğitimi sırasında, biyolojik sistemlerden esinlenerek molekül sel makineler yapılabileceğini önermiştir ve nano teknoloji kelimesini ilk kez ortaya çıkarmıştır . Nanometre ( $1 \text{ nm}=10^{-9} \text{ m}$ ) ölçeğindeki fiziksel, kimyasal ve biyolojik olayların anlaşılması, kontrolü ve üretimi amacıyla, fonksiyonel materyallerin, cihazların ve sistemlerin geliştirilmesidir. Nano, Yunanca da “cüce” anlamına gelmektedir. Nano biriminin daha iyi anlaşılabilmesi için şöyle bir örnek verebiliriz. Bir saç teli yaklaşık 80 bin nanometre genişliğindedir. Nano teknoloji; maddenin nanometre ölçeğinde yani atomsal, moleküler ve supramoleküler yapılar düzeyinde denetlenmesi yoluyla yeni malzeme, cihaz ve sistemlerin tasarlanmasını ve üretilmesini konu alan bir teknoloji dalıdır. Maddeleri moleküler ya da nanometre düzeyinde ele alan bir mühendislik bilimi olan nano teknoloji, daha güçlü ve daha hafif elektronik materyallerin kullanıldığı yeni bir çağ vaat ederek bilim adamlarının son yıllarda umutlarını arttırmaya devam etmektedir. Bilim insanları ve mühendisleri her gün daha küçük boyutlara inmeye, daha az yer kaplayan, daha az enerji harcayarak daha hızlı çalışabilen aygıtlar yapmaya zorlamıştır [9].

Bir aygıtta kullanılan malzemenin boyutu küçüldükçe, çalışma hızı da artar ve o malzemenin yeni fiziksel özellikleri ortaya çıkar. Boyutlar nanometre ölçeklerine yaklaşırken, malzemenin fiziksel özellikleri kuantum mekaniğinin kontrolüne girip, elektron durumlarının fazı ve enerji spektrumunun kesikli yapısı daha belirgin hale gelmektedir. Daha da önemlisi, malzemeyi oluşturan atom sayıları 100'ler düzeyine inince, atomsal yapının geometrisi, hatta atom sayısının kendisi bile fiziksel özelliklerin belirlenmesinde etken olmaktadır. Örneğin; yarı iletken olarak bilinen ve çağımızın en önemli malzemesi olan silisyumdan yapılan bir telin çapı nanometreye yaklaşırken tel iletken bir karakter sergilemektedir [10].

Nano teknolojinin amaçları kısaca aşağıdaki gibi verilebilir:

- Nanometre ölçekli yapıların analizi,
- Nanometre boyutunda yapıların fiziksel özelliklerinin anlaşılması,
- Nanometre ölçekli yapıların imalatı,
- Nano hassasiyetli cihazların geliştirilmesi,
- Nano ölçekli cihazların geliştirilmesi,
- Uygun yöntemler bulunarak nanoskopik ve makroskopik dünya arasındaki bağın kurulması.

Nano teknolojinin Kullanım Alanları :

- Mikrosensörlerin, mikromakinaların, optoelektronik elemanların imalatı ve uygun şekilde bir araya getirilmesinde,
- Lazer yapımında,
- Manyetikleştirilmiş nano katmanları en ufak değişiklikleri farkedecek şekilde bir çip içine integre edilip, trafik sensörü olarak uçak ve otomobilleri tanıma ve manyetik alanlarına bakarak tiplerini de belirleyebilmede,
- Medikal alanında : Mikrocerrahide (göz, beyin vb.), diagnostik kitlerde, yüzey karakterizasyonu ve modifikasyonu, mikroorganizmaların taşınmasında, kanserli hücrelerin tedavisinde,
- DNA modifikasyonu vb. bölümlerde,
- Kozmetik sanayide,

- Dokumada kullanılacak olan elektronik fiberler sayesinde, istenildiğinde renk değiştirebilen, vücudumuzu zararlı ışıklardan koruyan hatta özel polimerler sayesinde terin emilip vücudumuzun kuru kalmasını sağlayan, su tutmayan giysilerin üretiminde,
- Mikromakinalar sayesinde de bilgisayar teknolojisinde,
- Kapasitör, transistör ve fotodiyot yapımında,
- Güneş pillerinde,
- İlaç endüstrisinde,
- Yüksek çözünürlüğe sahip ölçü aletlerinin yapımında uygulama alanları bulunmaktadır.

Uygulamaya konulacak projeler arasında da 2012 yılında yapımı tamamlanacak olan uzay asansörü ve moleküler nano teknoloji gibi bir çok alanda bulunmaktadır. Nano teknoloji biyolojik ve kimyasal sensörler, kuvvet / basınç sensörleri, güç kaynağı (pil / akülerde, yakıt hücrelerinde H<sub>2</sub> ve Li depolama, nano reaktörler), haberleşme (communication), yön bulma (navigation), itme (propulsion), iyon kanalları, biyomedikal uygulamalar, yüksek dayanımlı karma malzemeler, kablo ve kırımlar, ısı değiştiriciler, radyatörler, ısı bariyerleri, radyasyon bariyerleri, filtre membranları, zırhlar, askeri kıyafetler ve uzay giysileri, nano ve mikro cihazlarının imali vs. gibi bir çok alana şimdiden girmiştir. Nano malzemeler elektronikte, bilgisayar teknolojisinde, malzeme ve imalatta, enerji ve taşımacılıkta önemli sıçramalara yol açmaktadır [11].

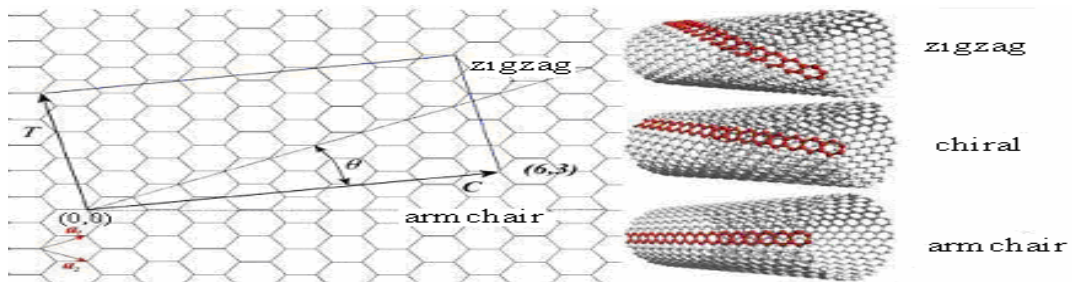
### 2.3.1. Nano tüpler

Teknolojide meydana gelen hızlı gelişmeler, nano teknolojinin ortaya çıkmasını sağladı ve nano teknoloji günümüzün en önemli araştırma alanlarından biri oldu. Nano parçacıklar, ince filmler ve nano tüpler olarak elde edilen malzemeler, sahip oldukları pek çok fiziksel özellik sayesinde teknolojide çok büyük bir kullanım alanına sahiptirler.

Nano tüpler, birçok malzemenin gösterdiği farklı özellikleri tek başına bünyesinde toplamaktadır. Nano tüplerin gelecekte kuantum telleri, diyod ve transistör olarak pek çok alanda kullanılması beklenmektedir. Nano tüpler birçok mekanik ve fiziksel özellikler göstermektedir. Bunlara örnek olarak, nano tüplerin çok sağlam olması ve yüksek elastikiyet göstermesi, plastiğin nano tüplerle katkılandırılmasıyla iletken elde edilmesi özelliklerini verebiliriz [12].

#### Yapısal Özellikler

Yüksek çözünürlüklü mikroskopi teknikleriyle nano tüplerin yapısı ile ilgili pek çok deney yapılmaktadır. Bu deneyler sonucunda nano tüplerin, kristal grafitlerden oluşan hegzagonal örgüdeki atomların oluşturduğu silindirik yapılar olduğu ortaya çıkmıştır. 3 tip nano tüp çeşidi vardır: “armchair”, “zigzag” ve iki boyutlu grafit levhanın nasıl rulo yapıldığına bağlı olan “chiral”. Değişik tip nano tüpler birim hücrelerine göre kolayca belirlenir, yani yapıyı belirleyen en küçük atom grubudur [12,13].



Şekil 2.3.1.1.Zigzag, chiral ve armchair yapıların gösterimi.

Başka bir önemli faktör ise chiral(kiriş) açısıdır. Grafit levha nano tüpünün silindirik kısmını oluşturmak üzere yukarı yuvarlandığında chiral vektörünün uçları birbiriyle birleşir. Böylece chiral vektörü, nano tüpün dairesel kesitinin çevresini oluşturur.  $m$  ve  $n$ 'nin değişik farklı değerleri için farklı nano tüp yapıları oluşur. Armchair nano tüpler  $n=m$  ve chiral açı  $30^\circ$  olduğunda oluşur. Zig-zag nano tüpler  $m$  ya da  $n$ 'den biri sıfır ve chiral açısı  $0^\circ$  olduğunda oluşur. Chiral açısının  $0^\circ$ - $30^\circ$  arasında olduğu diğer tüm nano tüpler chiral nano tüpler olarak adlandırılır [13].

Nano tüplerin çaplarının ve kiriş açılarının ölçümü tünelleme taramalı mikroskobu ve geçirmeli elektron mikroskobu ile yapılmaktadır. Yine de çapı ve  $\theta$  açısını ölçerken aynı anda örneğin direnç gibi fiziksel bir özelliğide ölçebilmek halen büyük bir zorluk teşkil etmektedir. Çünkü nano tüplerin boyutları çok küçük ve karbon atomları sürekli bir ısısal hareket halindedirler. Ayrıca mikroskoptan gönderilen elektron demeti nano tüplere zarar verebilirler.

### Elektriksel Özellikler

Bir tek grafit levhası yarımetaldir. Bunun anlamı sahip olduğu özellikleri yarıiletken ile metal arasında ortadüzeyde olmasıdır. Grafit levha yuvarlanarak nano tüp oluşturulduğunda; daire çevresinde yalnızca atomlar sıralanmaz, aynı zamanda elektronların kuantum mekaniksel dalga fonksiyonları da uyumlu olarak düzenlenir. Radyal doğrultularda, elektronlar inceltilmiş tek katmanlı grafit düzlem tarafından sınırlanmıştır. Nano tübün daire çevresinde periyodik sınır şartları ortaya çıkmaktadır. Örneğin eğer bir nano tüp daire çevresinde 10 hegzagon bulunduruyorsa, 11. hegzagonal 1. ile çakışmaktadır. Silindir etrafında  $2\pi$ 'lik faz farkı ile karşılaşılır [13].

Elektriksel özelliklerin nano tüpün çapına ve kirişine son derece bağlı olduğunu daha önce vurgulamıştık. Yapılar üstünde elektronik ve optik nano ölçekte ölçümler yapmanın zorluklarının yanısıra, nano tübün simetrisi ile ilgili bilgilerin ( $n$  ve  $m$  değerleri) tahminini yapmakta oldukça önemlidir. Bu zorluklara rağmen deneysel çalışmaların öncülüğünde, nano tüplerin elektriksel özellikleri hakkında temel teorik

tahminler doğrulanmıştır. Yüksek kaliteli tek-katmanlı nano tüplerin yeterli miktarlarda elde edilebilmesinden önce deneyler çok-katmanlı nano tüpler üzerinde odaklanılmıştı. Bunun yanında başlarda bağımsız çok-katmanlı nano tüpler üzerinde yapılan ölçümlerde, tek boyutlu kuantum etkisi ölçülememiştir. Çünkü nano tübün çapı çok geniş kalmış ya da çalışmalar yeterli düşük sıcaklıklarda yapılmamıştı. Fakat çok-katmanlı nano tüplerden alınan sonuçlar, farklı çap ve kirişlerdeki yoğunlaşmış nano tüplerden alınan eşzamanlı bilgiler ile tamamlanmaktadır. Ek olarak, nano tüpteki kusurlar elektron seyrekliğine yol açabilir ve nano tübün tüm öğelerinde elektrik iletimi güvenilir olmayabilir. Elektriksel kontakların iletim özellikleri elektron iletimini etkileyebilir. Ayrıca bu ilgi çekici iletim olayı, tek boyutta kuantum etkisinin görülebildiği düşük sıcaklıklarda ve küçük çaplı çok-katmanlı nano tüpler üzerinde yapılmalıdır [14]. General Motors Araştırma Laboratuvarından Charles Oik ve Joseph Heremans'ın (Michigan) taramalı tünelleme mikroskopuyla (STM), bağımsız çok katmanlı nano tüplerin özelliklerini 1994'te ölçmesiyle, çok önemli bir aşama kaydedildi. Bu sonuçlar ilk defa bazı nano tüplerin metalik, bazılarının yarıiletken olduğunu gösterdi [13].

### Mekaniksel Özellikler

Nano tüplerin mekanik özellikleri de önemli araştırma alanlarından biridir. Grafit ve karbon fiberlerine benzer olarak, nano tüplerin çok sağlam ve yüksek elastikiyet modülüne sahip olmaları beklenmektedir. Ayrıca tek-katmanlı karbon nano tüplerin, tıpkı uzay teknolojisi uygulamalarında kullanılan karbon fiberi gibi, çok sağlam ve esneme altında kırılmama dayanıklılığına sahip olması beklenmektedir. North Caroline Üniversitesi'nden Jerzy Bernhole ve meslektaşlarının hesaplarına göre bir nano tüp kırılmadan yüksek oranda uzayabiliyor. Karbon fiberlerinin aksine, tek katmanlı nano tüpler dikkate değer oranda esnektir. Burkulabilir, düzleştirilebilir, küçük daireler şeklinde kıvrılabilir. Ya da başka çeşitli esnetmeler sonucunda kırılmadan kalabilir. Bernhole ve meslektaşları, nano tüp üzerindeki etki çekildiği zaman eski orijinal şeklini aldığını gözlemlemişlerdir [13]. Baskı altında kolayca kırılan karbon fiberlerinin aksine, karbon nano tüpler etki uygulandığında elastikiyeti sağlayan tek benzer yapıyı oluştururlar. Sonuç olarak nano tüpler sadece karbon



fiberlerinin avantajlarına sahip olmayıp, aynı zamanda çok daha esnek ve basınç altında kırılmaya dayanıklıdır [15]. Örneğin; Hyperion Catalysis International Company bu moleküllerden az miktarda plastiğe katarak, plastiği elektriksel olarak iletken hale getiriyor [13]. İletken plastikler otomotiv sektöründe elektriksel olarak yüklü boya imal etmek üzere kullanılıyor. Bu elektrostatik boya, spreyci boya yöntemine göre daha fazla boya tasarrufu sağlamaktadır.

Düz ip şeklindeki nano tüpleri halka nano tüplere çevirmek için bir yol bulunmuştur; bu halkalar birçok katman olarak, tek-katmanlı nano tüplerden oluşuyor ve 0,7 mikron çapa sahip. Halka haline getirme, proteinlerde ve diğer biyomoleküllerde gözlenmiş ve sarım içi temel kuvvetin hidrojen bağından kaynaklandığı düşünülmekteydi. Karbon nano tüpler ise yeni bir özellik göstererek halka olayında sadece Van der Waals kuvvetlerinin etkili olduğu görülmüştür. Metal elektrodalara yerleştirdiğimiz halkalar, yeni elektrik iletim olayını incelememizi sağlar. Halka oluşturmak için kullanılan nano tüpler son derece küçüktür; çapları sadece 1,4 nm'dir. Bu nano tüpler düşük sıcaklıklarda tek boyutlu iletkenlerdir, kuantumsal etkileşim tüpler arasındaki elektriksel iletimi yönetir. Halka şekli, bunun gibi tek boyutlu iletkenlerde kuantum etkilerini gözleyebilmemizi mümkün kılar [14,16].

#### Teknolojideki Kullanım Alanları

IBM araştırmacıları, dünyada ilk defa tek bir molekül içinde mantıklı bilgisayar devresi geliştirerek, çalıştırmayı başardılar. Karbon atomlarının oluşturduğu, saç telinden 100 000 kat daha ince tüp şeklindeki bir molekülden, karbon nano tüplerden, günümüz bilgisayarlarında bulunan üç temel devreden biri olan “voltaj çevirici”yi üretmeyi gerçekleştirdiler. Nano tüplerle, NOT kapısı adında bir voltaj çevirici devre elde edildi. Tek bir karbon nano tüpünün boyuna çevirici mantık fonksiyonunu şifreleyen bilimadamları, dünyanın ilk intra moleküler ya da tek molekülli mantık devresini kurdular. Sıfırların ve birlerin hakim olduğu iki haneli dijital dünyamızda voltaj çeviricisi, bilgisayar çiplerinde 1'leri 0'a , 0'ları da 1'e dönüştürüyor. Günümüzde bilgisayar işlemcileri, “AND” ve “OR” kapıları gibi temel iki işlevin

yanı sıra, “NOT” kapısının çok daha karmaşık ve geniş kombinasyonlarından oluşuyor [13].

Voltaj çeviricilerde farklı elektronik özelliklere sahip iki tür transistör bulunuyor. Bunlar; elektronların elektrik akımını taşıdığı n türü transistörler ve elektronların bulunmadığı delik denilen bölgelerde elektrik akımının taşındığı p transistörleri. Bugüne dek geliştirilen tüm karbon nano tüpler sahip oldukları p türü transistörler nedeniyle, mantıklı bilgisayar devrelerinin kurulmasına elverişli değildi. Bilim adamları, potasyum atomlarını ekleyerek nano tüp transistörlerin özelliklerini değiştirdiler. Bu sayede p tipi nano tüp transistörlerinin, n tipi transistörlere dönüşümünü gerçekleştirmişlerdir. P tipi transistörler vakum içinde ısıtıldığında, n tipi transistörlere dönüşüyor, havaya maruz bırakıldığında ise, süreç tersine işliyor. Bilim adamları ayrıca bazı bölümleri n tipine dönüştürülen nano tüpte bazı bölümlerinde p tipi olabileceğini ortaya çıkarttılar. Dünyanın ilk tek molekülü mantıklı devresi de, bu bulgular ışığında inşa edildi [15].

Nano tüpler yapılarına göre değişerek metal veya yarıiletken özellik gösterebilirler. Ayrıca süper iletken özellikleri de bulunmaktadır. Bunlar aynı zamanda aşırı dayanıklı maddelerdir ve yüksek ısıl iletkenliğe sahiptirler. Bu karakteristik özelliklerine bağlı olarak, nano-elektronik ve nano-mekanik devrelerde kullanılabilir olmaları, nano tüplerin üzerinde büyük ilgi doğurmuştur. Nano kablo gibi kullanılabilir ya da entegre devreler içinde, alan etkili transistörlerde olduğu gibi aktif bileşen olarak kullanılabilir. Transistörler entegre devrelerin yapı taşlarıdır. Sadece çok katmanlı ya da tek katmanlı nano tüpleri kullanarak, alan etkili transistör kanalı gibi, nano tüp transistörleri elde edilmiş ve başarılı olarak test edilmiştir. Elektriksel özellikleri incelenmiş ve nano tüp kanalından geçen akımı, giriş kapısına uygulanan gerilimi değiştirilerek, 100 000 çarpanına kadar değiştirilebildiği bulunmuştur [17]. Bütün bu bilgiler ışığında karbon nanotüpün, büyük bir hızla gelişmekte olan nano teknoloji alanında birçok kolaylıklar sağladığı ve gelecekteki pek çok teknolojik uygulamalarda yerini alacağı açıkça görülmektedir.

### 2.3.2. BCN Nano tüpler

BCN nano tüpler ilginç materyallerdir. Çünkü C nano tüpler ve BN nano tüplerle birçok fiziksel özellikler paylaşımlarının yanında teknolojik uygulamalar için bazı eşsiz avantajlar sergilerler. BN nano tüpler  $\sim 5,5$  eV luk bir band aralığı ile geniş bandlı yarıiletkenlerdir. C nano tüpler yarımetalik veya yarıiletken olabilirler. BCN nano tüplerin C nano tüplerden avantajlı olan tarafı elektronik ve optik özelliklerinin kontrol edilebilmesidir [18,19].

C nano tüplere B ve N atomları eklenerek üretilen BCN nano tüpler yapısal olarak C nano tüpler ile benzedir. Fakat BCN nano tüplerin elektronik yapılarının farklı olması gerektiği görülmüştür. Bu tamamen C nano tüp yapısı içinde B ve N in konsantrasyonuna bağlıdır. Teorik hesaplamalar BCN nano tüplerin; BN nano tüpler ve C nano tüplerin ortasında ayarlanabilir band aralıklarına sahip olduğunu açığa çıkarmıştır. BCN nano tüplerin band aralıkları yalnızca atomik konfigürasyonlarının değiştirilmesiyle kontrol edilebilir [20,21].

BCN nano tüplerin kararlılıkları atomlar arasındaki bağlarla belirlenebilir. C-C ve B-N bağlarının sayıca fazla olduğu yapılar en kararlı yapılar olarak tanımlanır. BCN nano tüpler içinde maksimum C-C ve B-N bağlarına sahip olan BC<sub>2</sub>N nano tüpler en kararlı yapılar olarak gösterilmektedir [22,23].

## 2.4. Castep

Cambridge Sequential Total Energy Package (CASTEP) Cambridge Üniversitesi teorik yoğun madde grubu tarafından geliştirilmiştir [24].

CASTEP paket programı hesaplamalarda yoğunluk fonksiyonu teorisini kullanılır ve kuantum mekaniksel temel ilkelerden hareketle hesap yapar. Toplam enerji hesaplamaları yapar. Bu hesaplamalar ilgili sistem için taban durum enerjisini, yük yoğunluğu ve toplam enerji ile ilgili büyüklükleri (örgü sabitleri, elastik sabitler, geometri yapı, bağlanma enerjisi vb.) verir.

CASTEP paket programının moleküller, katıhal ve yüzey problemleri ile ilgili hesaplamalarda geniş bir kullanım alanı vardır. Örneğin; metallerin ve yarıiletkenlerin yüzey özellikleri, sıcaklığa bağlı çalışmalar, moleküller ve moleküler kristaller, malzemelerin optik özellikleri, elektronik yapı (band yapıları ve durum yoğunluğu) gibi özelliklerin hesaplamalarında kullanılır.

CASTEP birim hücrelerden hesap yapar ve sözde potansiyelleri kullanılır. Sözde potansiyeller atomların kimyasal yapısını anlamakta yararlıdır. Bu potansiyel valans elektronlarında etkin olan bir potansiyeldir. Elektron-elektron etkileşimleri, yoğunluk fonksiyonu teorisi kullanılarak pseudo potansiyellerinin ve düzlem dalga'nın birlikte kullanımı, sistemdeki atomlar üzerinde etkin olduğu için hesaplanmasında oldukça kolaylık sağlamaktadır.

CASTEP paket programında kullanılan metotlar ile metaller üzerinde yapılan hesaplamalar kolaylaştırılmıştır. Çünkü metallerin elektronik yapısındaki karışıklık nedeni ile toplam enerji hesaplamalarını metallere uygulamak, yarıiletken ve yalıtkanlara uygulamaktan daha zordur.

Local Density Approximation (LDA), uzayda bütün noktalarda her elektronun deęiş-tokuş korelasyon enerjisinin, homojen elektron gazındaki her elektronun deęiş-tokuş enerjisine eşit olduęu varsayılarak geliştirilen bir modeldir.

Elektron yoğunluğunun yerel deęerleri üzerindeki deęiş-tokuş korelasyon enerjisinin işlevsel bağımlılıęını ihmal etmek için yerel tanımlamaların sınırlandırılmasına GGA yaklaşımı denir. GGA açıkça elektron yoğunluęu eğrisi üzerinde deęiş-tokuş korelasyonun bağımlılıęıdır.

CASTEP' te yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak; bir molekülün veya malzemenin fiziksel büyüklükleri hesaplanmaktadır.

$$E_1[\rho] = \sum_i \left\langle \phi_i + \left| \frac{-\nabla^2}{2} \right| \phi_i \right\rangle + \rho(r_i) \left[ E_{xc}[\rho(r_i)] + \frac{V_e(r_i)}{2} - V_N \right] + V_{NN} \quad (2.8)$$

ile toplam enerji hesaplanır. Enerjinin koordinata göre birinci türevi bize sisteme etki eden kuvveti verir ( $F = -dE / dR$ ). Tüm kuvvetler sıfır olduęunda bu bize sistemin denge durumunu verir. Dolayısıyla enerjinin birinci türevinden sistem geometrisi elde edilir. Buna geometri optimizasyonu denir.

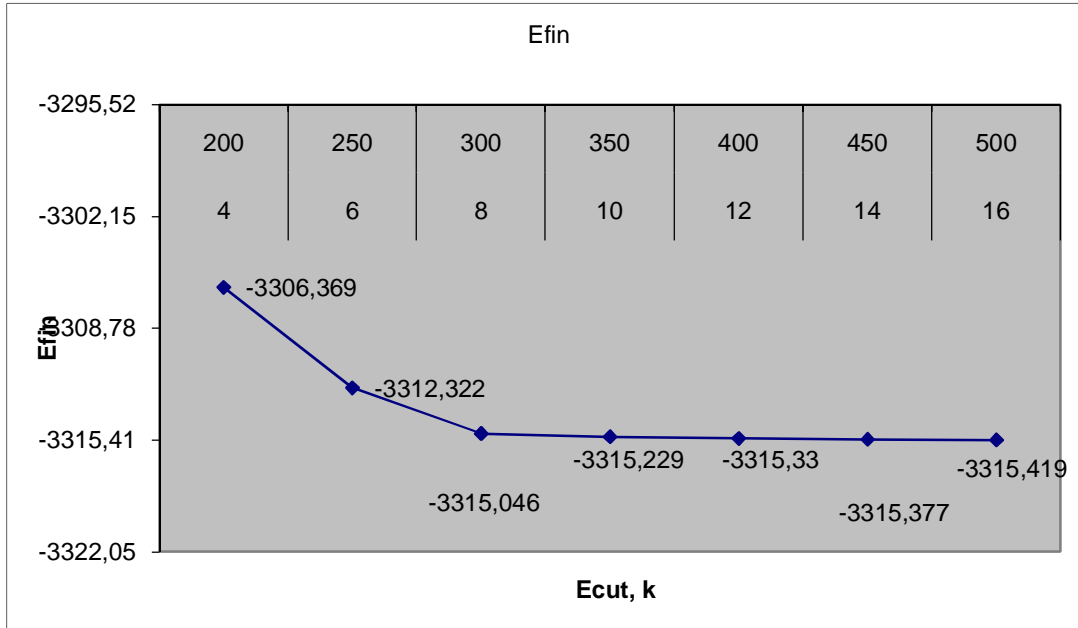
Geometri optimizasyon yapıldıktan sonra sistemin elektronik, yapısal ve titreşimsel özellikleri hesaplanabilir. Bunlar band yapıları, durum yoğunluęu, optik özellikleri, fonon dispersiyonu, fonon durum yoğunluęu vb. sonuçlar BN nano tüplerinde olduęu gibi elde edilebilir [25].

### 3. HESAPLAMALAR

#### 3.1. BC<sub>2</sub>N Nano tüpler

Bu çalışmada BC<sub>2</sub>N nano tüpler incelendi. BC<sub>2</sub>N nano tüplerle ilgili yapmış olduğumuz araştırma için [26,27] numaralı çalışmalar kaynak olarak alındı. Referans kaynaklarda bulunan dört yapı önce verilen değerlerle CASTEP paket programıyla tekrar hesaplandı. Daha sonra kendi belirlediğimiz değerleri bu dört yapıya uygulayarak hesaplamaları tekrar yaptık.

Bu çalışmada öncelikle k nokta sayısını 4 ile 16 arasında ve kesilim enerjisini 200 eV ile 500 eV arasında alarak uygun olan k nokta sayısı değeri ve kesilim enerjisini belirlemeye çalıştık. Burada amacımız uygun k nokta sayısı değeri ve kesilim enerjisi ile minimum enerjii elde etmektir. CASTEP paket programıyla yaptığımız hesaplamalar sonucu k nokta sayısı değerleri ve kesilim enerjilerine göre elde ettiğimiz enerjilerin grafiği Şekil 3.1’ de verilmiştir.



Şekil 3.1. k nokta sayısı değerleri ve kesilim enerjilerine göre elde ettiğimiz enerji değerlerinin grafiği

Grafik incelendiği zaman  $k=8$  ve  $E_{cut}=300$  eV da elde edilen enerji sabit kalmaya başlamaktadır. Burada amaç minimum enerjiye sahip olmaksa, kullanabileceğimiz k nokta sayısı değerini 8 ve kesilim enerjisini 300 eV olarak alabiliriz. Çünkü minimum enerji -3315,046 eV olarak elde edilmiştir.

Bütün hesaplamalarda seçilen CASTEP program parametreleri Çizelge 3.1' de verildi.

Çizelge 3.1. Hesaplamalarda kullanılan parametrelerin gösterimi

Kesilim enerjisi	300 eV
Korelasyon metodu	PBE
Optimizasyon metodu	BFGS
Toplam enerji toleransı	0,2000E-04 eV/atom
Maksimum iyon toleransı	0,5000E-01 eV/A
K-nokta sayısı	8
Maksimum kuvvet	0,05 eV/A
Maksimum basınç	0.1 GPa
SCF Tolerans	Coarse
Temel set düzeltmesi	Smart
Düzeltilme modu	Otomatik
Nümerik diferansiyel noktası	3
Karşılık potansiyel	Ultrasoft

Çalışmamızda CASTEP paket programında Çizelge 3.1' de verilen parametreler kullanılarak ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyonu yapıldı.

Bu çalışma sonucunda da yine [26,27] nolu referanslara uygun değerler elde edildi. Birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda BC<sub>2</sub>N nano tüplerinin toplam enerjileri, C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi ve band yapıları hesaplandı.

Bağlanma enerjilerinin hesaplanmasında iki farklı hesaplama yöntemi kullanıldı ve elde edilen sonuçlar karşılaştırıldı.

Birinci hesaplamamızda,

$$E_{bağ} = E_{top} - n_B\mu_B - n_C\mu_C - n_N\mu_N \quad 3.1$$

formülünü kullanarak hesaplamayı yaptık. Burada  $E_{top}$  geometri optimizyondan elde ettiğimiz final enerjisi,  $n$  nano tüpteki atomların sayısı,  $\mu$  ise kimyasal potansiyeldir.

İkinci hesaplamamızda ise,

$$E_{bağ} = E_{top} - n (\mu_{tüpBN} + \mu_{tüpCC}) \quad 3.2$$

ile 19 nolu referansta verilen hesaplama formülünü kullandık . Burada  $E_{bağ}$  geometri optimizyondan elde ettiğimiz final enerjisi,  $n$  nano tüpteki atomların sayısı,  $\mu_{tüpBN}$  BN nano tüpün kimyasal potansiyeli,  $\mu_{tüpCC}$  karbon nano tüpün kimyasal potansiyelidir.

19 nolu referansta,

$$\mu_{tüpBN} = -350.17 \text{ eV ve } \mu_{tüpCC} = -309.72 \text{ eV olarak verilmiştir.}$$

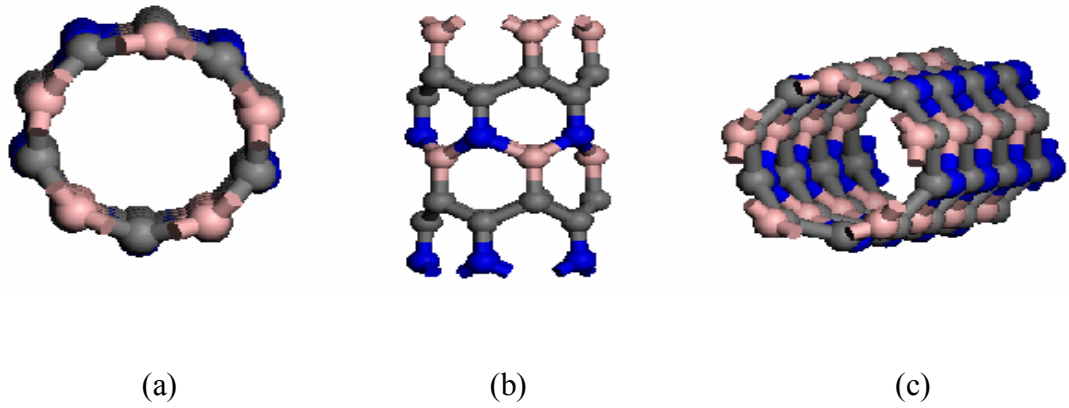
Bütün şekillerde koyu (gri) renk ile gösterilen elementler karbon, koyu (mavi) renk ile gösterilen elementler azot, açık (pembe) renk ile gösterilenler ise bor elementleridir.



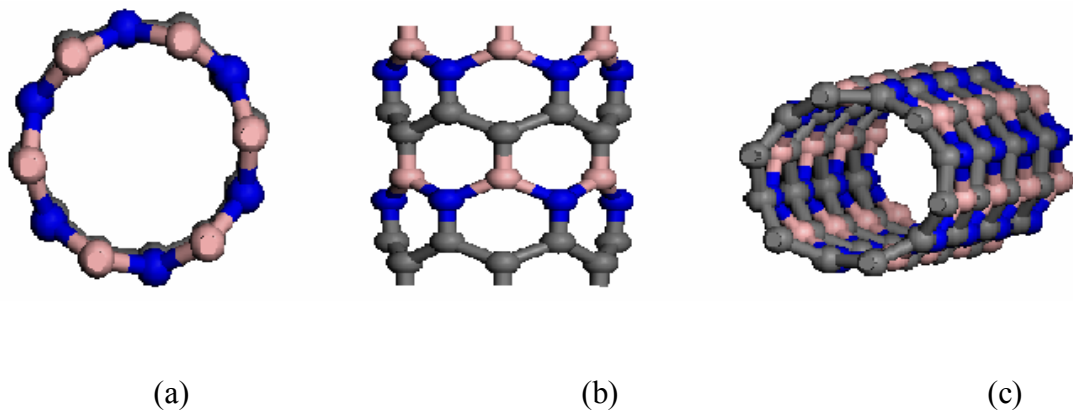
Bu çalışmada dört farklı BC<sub>2</sub>N nano tüp yapısı incelendi. Bu dört yapıdan ilk ikisi zigzag yapı diğer ikisi ise armchair yapıdır.

### 3.1.1. BC<sub>2</sub>N (n,0), n=5-10 zigzag nano tüpler

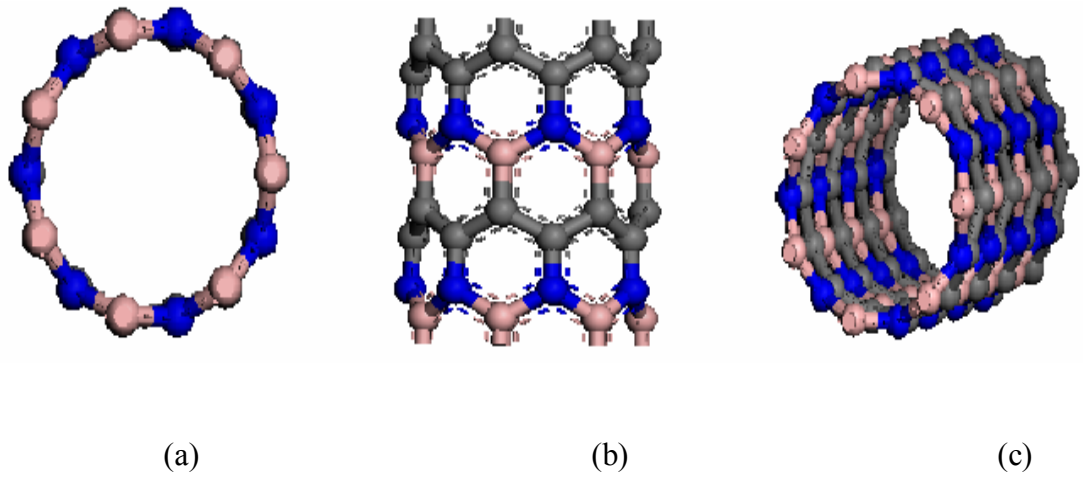
Birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda elde edilen optimize BC<sub>2</sub>N (5-10) zigzag nano tüplerin üstten, yandan ve süper hücre gösterimleri sırasıyla Şekil 3.2 - Şekil 3.7' da verilmiştir. (5,0), (6,0), (7,0) nano tüpler birinci yapıdan; (8,0), (9,0), (10,0) nano tüpler ikinci yapıdan alınmıştır.



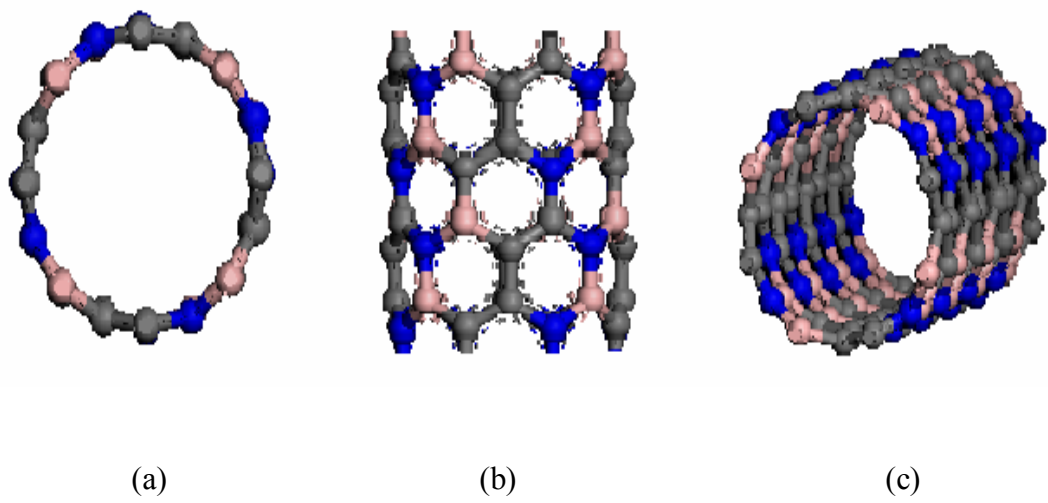
Şekil 3.2. BC<sub>2</sub>N (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki ( a) üstten,(b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



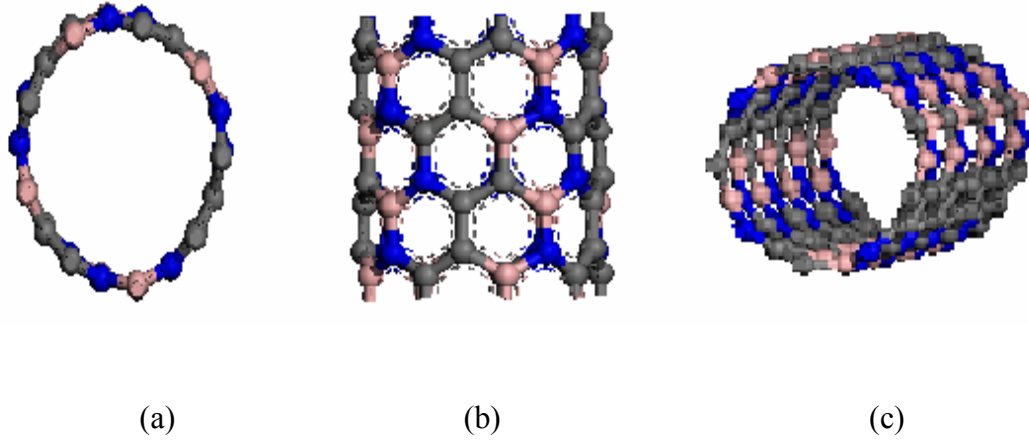
Şekil 3.3. BC<sub>2</sub>N (6,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



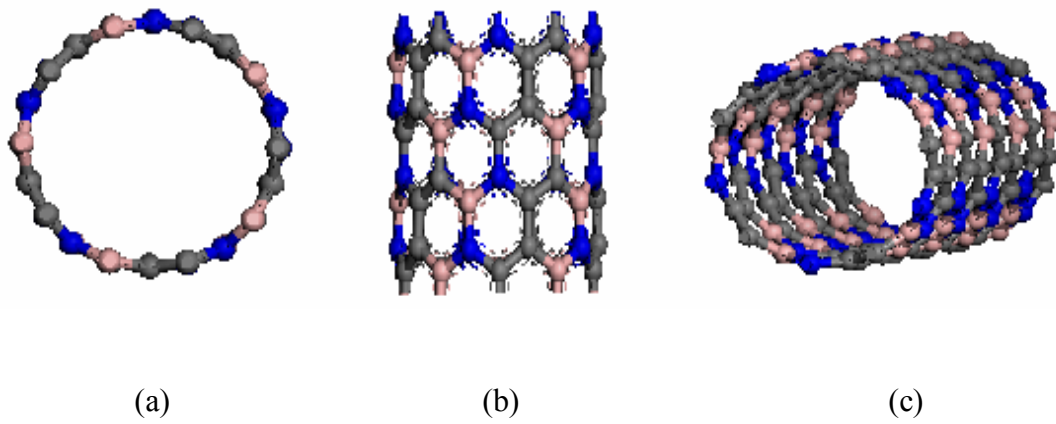
Şekil 3.4.  $BC_2N$  (7,0) nano t p n geometri optimizasyondan sonraki (a)  stten, (b) yandan ve (c) s per h cre olarak g sterimleri



Şekil 3.5.  $BC_2N$  (8,0) nano t p n geometri optimizasyondan sonraki (a)  stten, (b) yandan ve (c) s per h cre olarak g sterimleri



Şekil 3.6. BC<sub>2</sub>N (9,0) nano tütün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



Şekil 3.7. BC<sub>2</sub>N (10,0) nano tütün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri

Birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda elde edilen optimize BC<sub>2</sub>N (5-10) zigzag nano tüplerin birim örgü parametreleri Çizelge 3.2’de verildi. Ayrıca toplam enerjileri, C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi, band yapıları hesaplandı ve Çizelge 3.3 ve Çizelge 3.4’ te gösterildi.

Çizelge 3.2. BC<sub>2</sub>N (5-10,0) zigzag nano tüplerin birim örgü parametreleri

Nano tüpler	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
(5,0)	7,31 7,20*	7,31 7,20*	4,28 4,30*	90 90*	90 90*	120 120*
(6,0)	8,08 8,0*	8,08 8,0*	4,27 4,25*	90 90*	90 90*	120 120*
(7,0)	8,67 8,70*	8,69 8,70*	4,21 4,20*	90 90*	90 90*	120 120*
(8,0)	9,40 9,42*	9,50 9,45*	4,21 4,20*	90 90*	90 90*	120 120*
(9,0)	10,24 10,30*	10,24 10,30*	4,22 4,20*	90 90*	90 90*	120 120*
(10,0)	11,01 11,00*	10,97 11,00*	4,22 4,20*	90 90*	90 90*	120 120*

\* [26]'da verilen değerler ile yapılan hesaplamadan elde edilen sonuçları göstermektedir. Kesilim enerjisi 310 eV ve k nokta sayısı 10 olarak alınmıştır.

Çizelge 3.3. BC<sub>2</sub>N (5-10,0) zigzag nano tüplerin bağ uzunlukları (C-C, C-B, C-N ve

B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları)

Bağ uzunlukları (Å)	
Bağ	BC <sub>2</sub> N tüpü
C-C	1,404 1,42*
C-B	1,50 1,51*
C-N	1,38 1,39*
B-N	1,43 1,45*

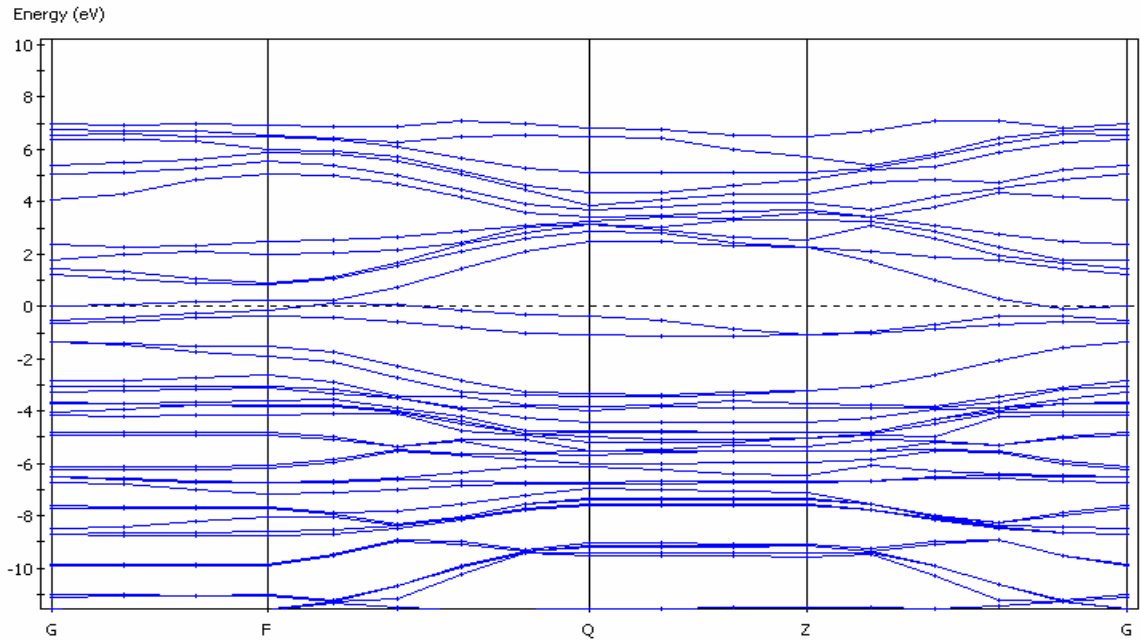
\* [26]'da verilen değerleri göstermektedir.

Çizelge 3.4. BC<sub>2</sub>N (5-10,0) zigzag nano tüplerin toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjileri ve band yapıları

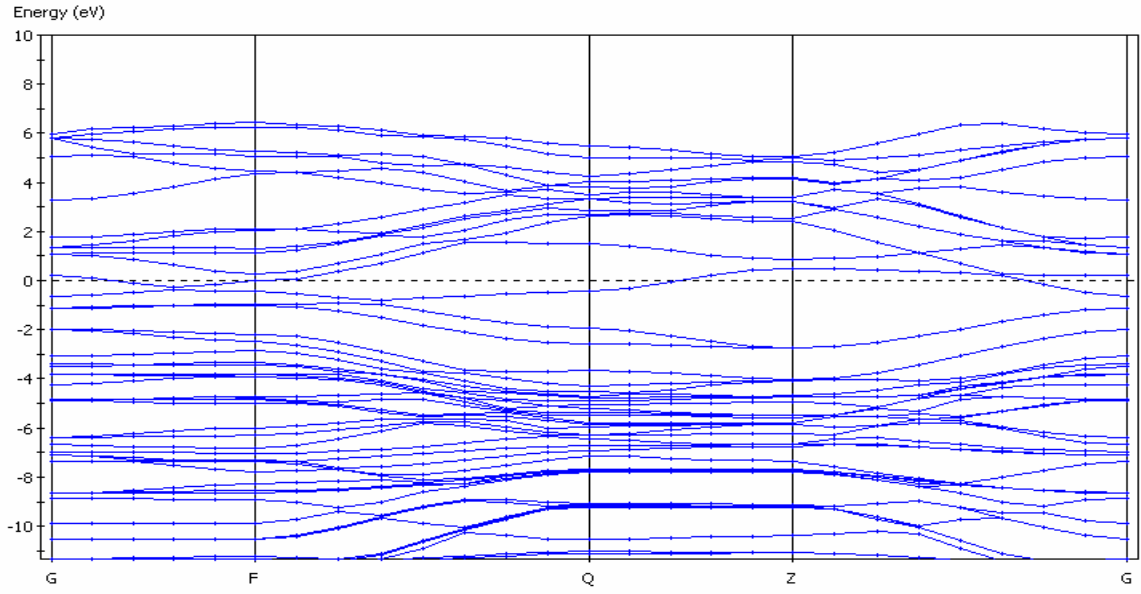
Nano tüp	$E_n$ (eV)	Yasak enerji aralığı	$E_b$ (eV)	Band Yapısı
(5,0)	-3309,089 -3309,100*	–	-9,08 -9,1**	Metal Metal*
(6,0)	-3973,890 -3973,930*	- 0,12*	-13,89 -12,09**	Metal Direkt*
(7,0)	-4638,189 -4638,343*	0,93 1,03*	-18,189 -18,112**	Direkt Direkt*
(8,0)	-5299,130 -5302,705*	0,96 1,12*	-19,139 -19,123**	İndirekt İndirekt*
(9,0)	-5962,930 -5966,822*	1,29 1,76*	-22,93 -22,74**	Direkt Direkt*
(10,0)	-6626,125 -6630,895*	1,43 1,56*	-26,125 -26,098**	Direkt Direkt*

\* [27]'de verilen değerleri göstermektedir.

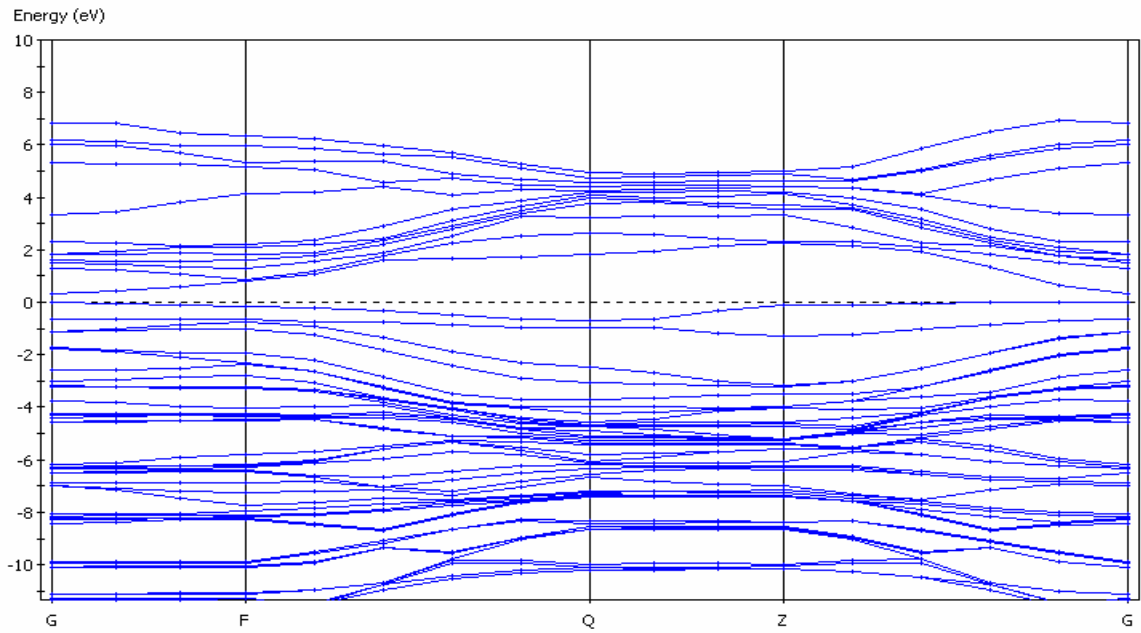
\*\* [19]'da verilen hesaplamayla elde edilen sonuçları göstermektedir.



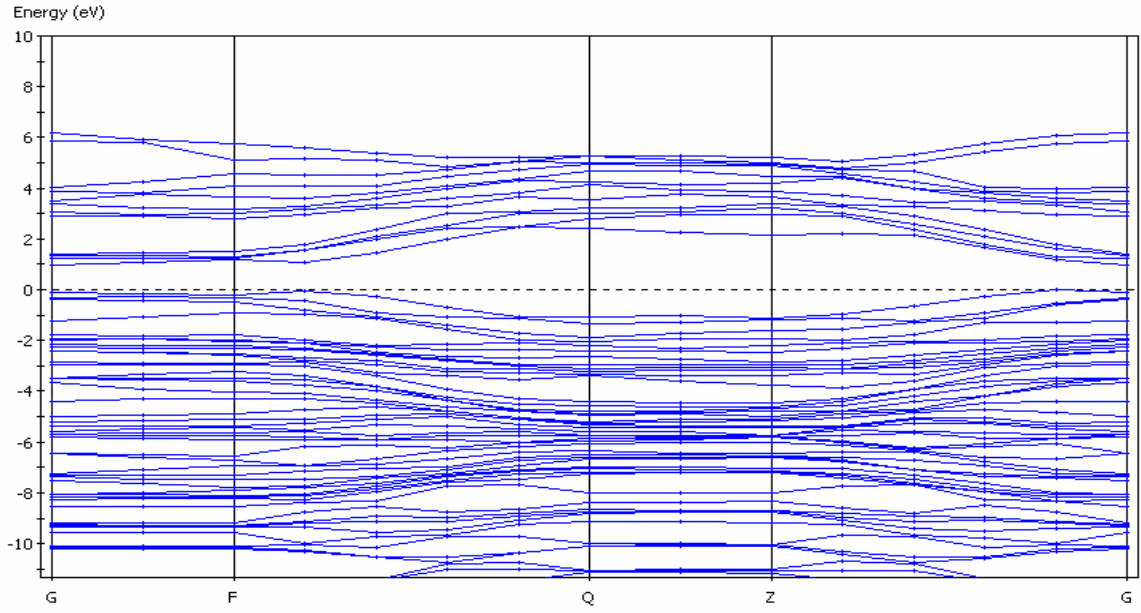
Şekil 3.8. BC<sub>2</sub>N (5,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



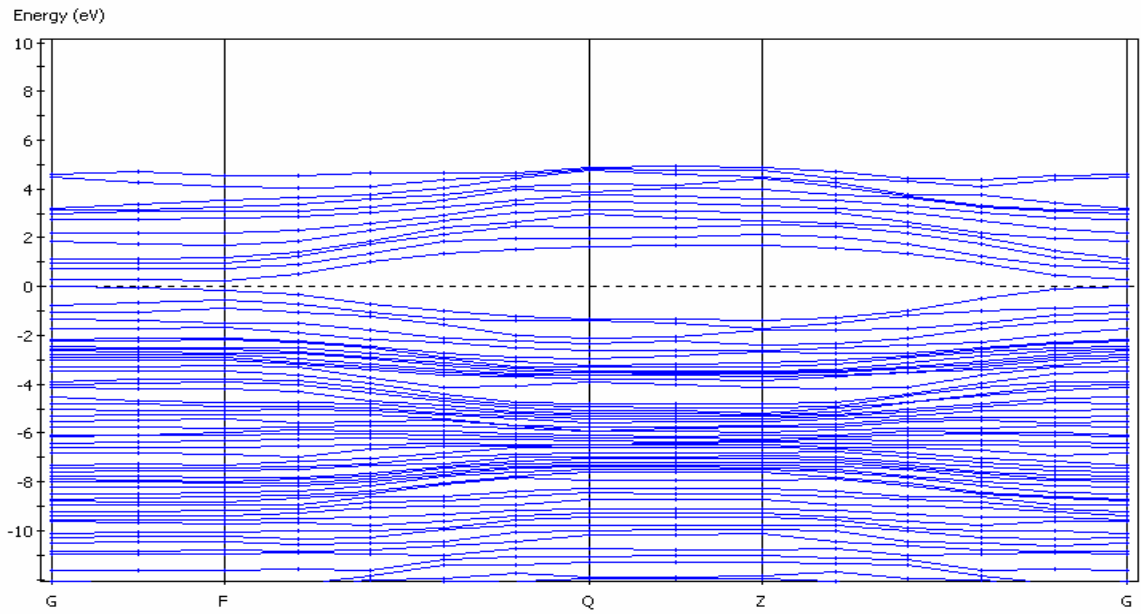
Şekil 3.9. BC<sub>2</sub>N (6,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



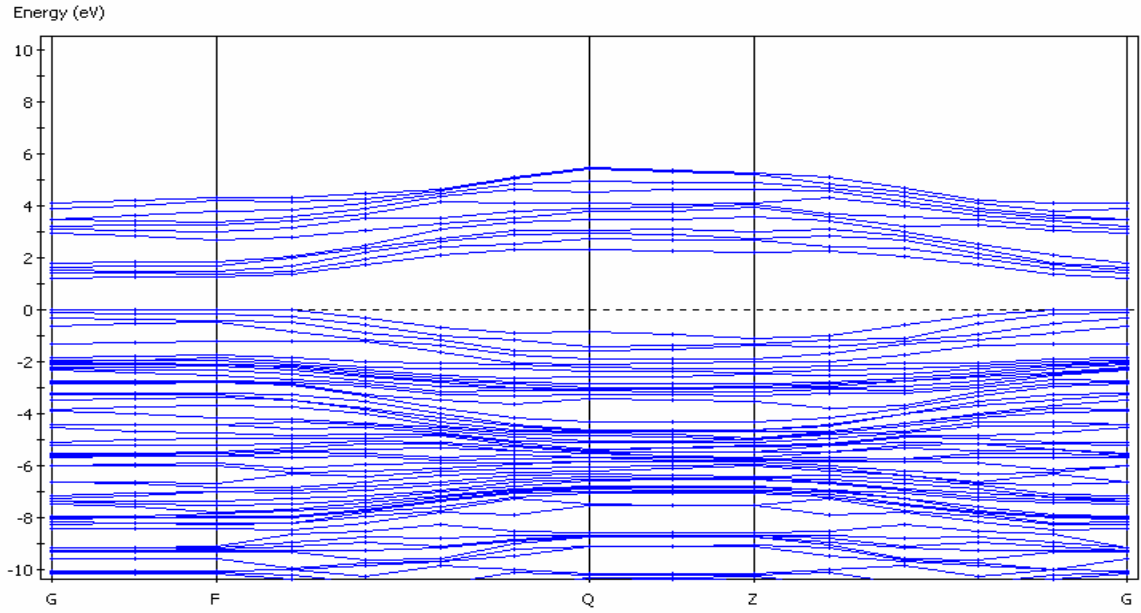
Şekil 3.10. BC<sub>2</sub>N (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



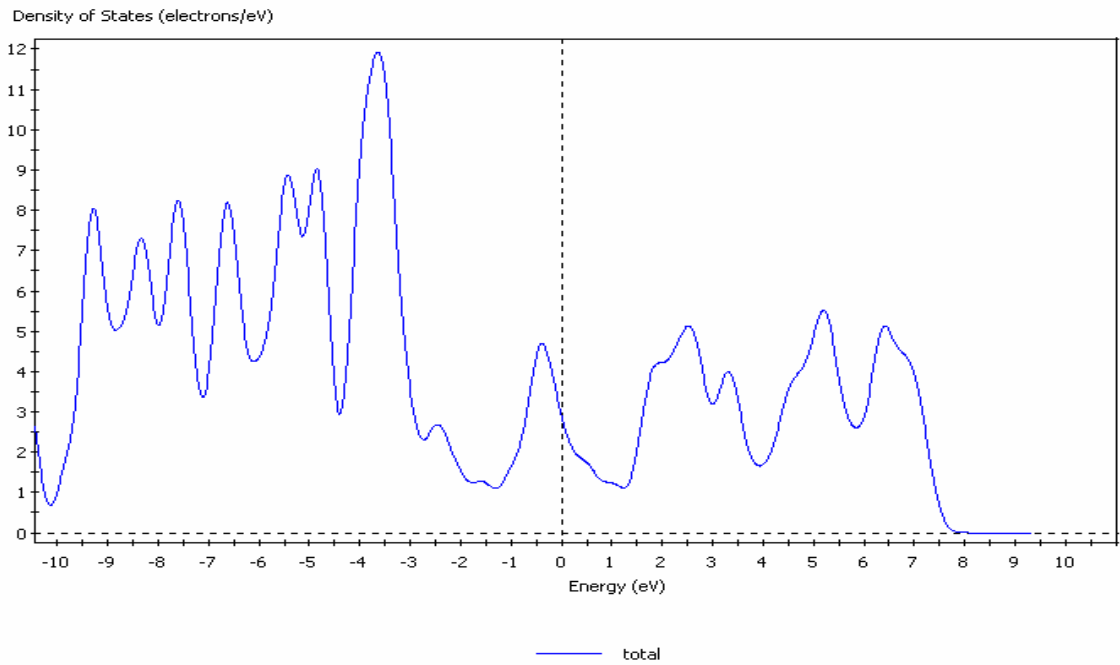
Şekil 3.11. BC<sub>2</sub>N (8,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



Şekil 3.12. BC<sub>2</sub>N (9,0) nano tüpün band yapısının gösterimi

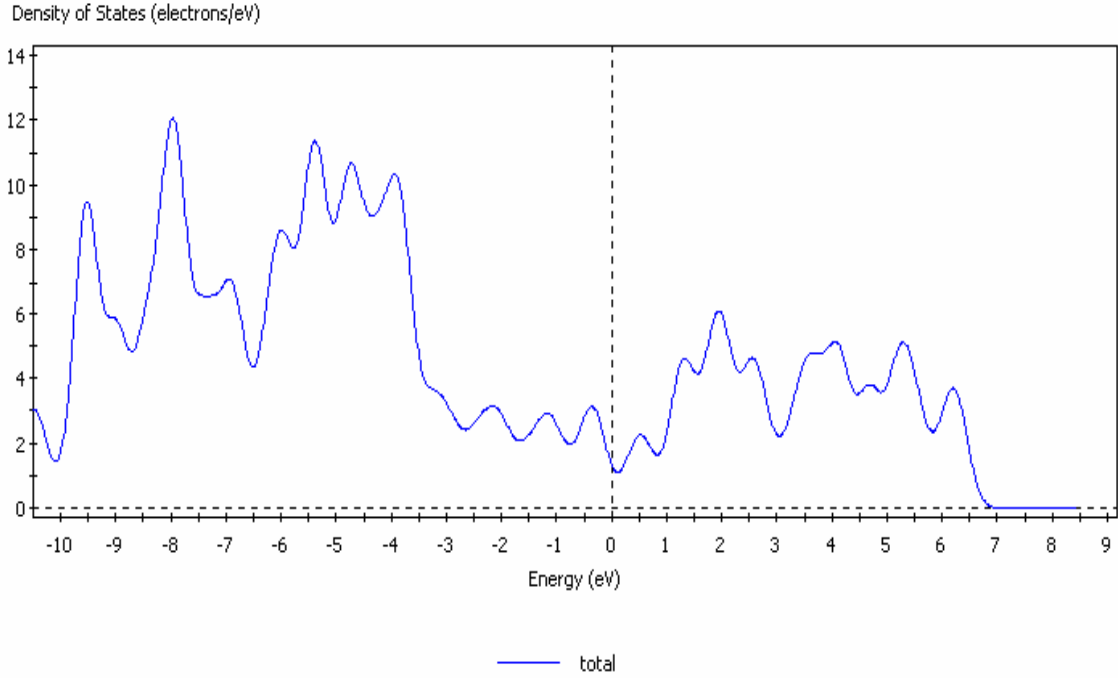


Şekil 3.13. BC<sub>2</sub>N (10,0) nano tüpün band yapısının gösterimi

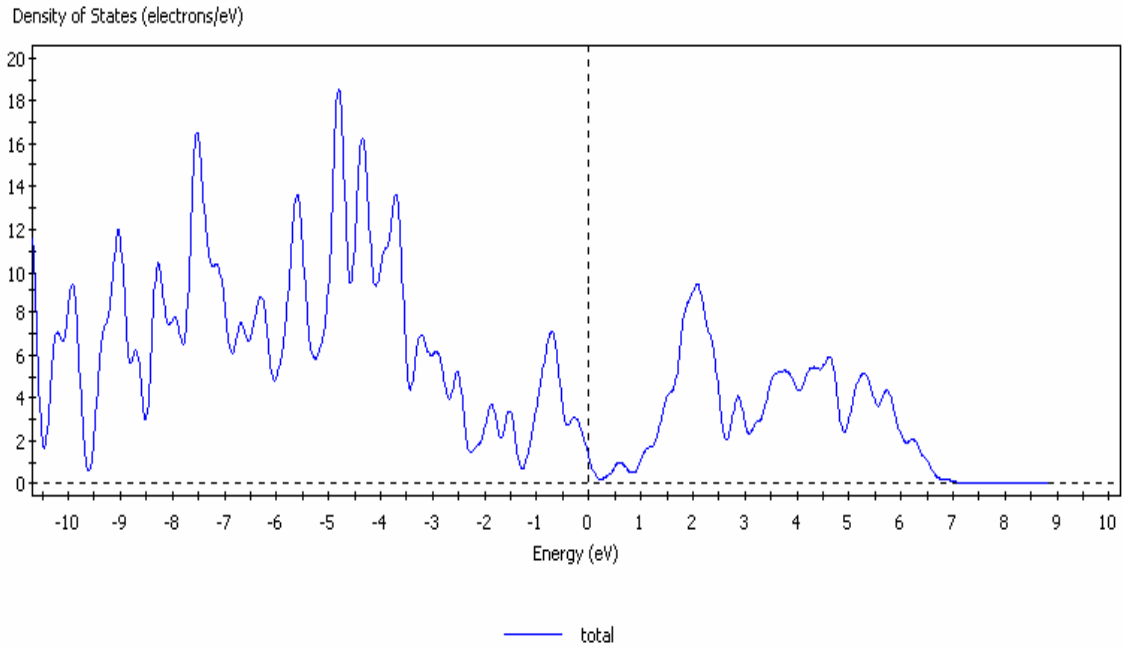


Şekil 3.14. BC<sub>2</sub>N (5,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi

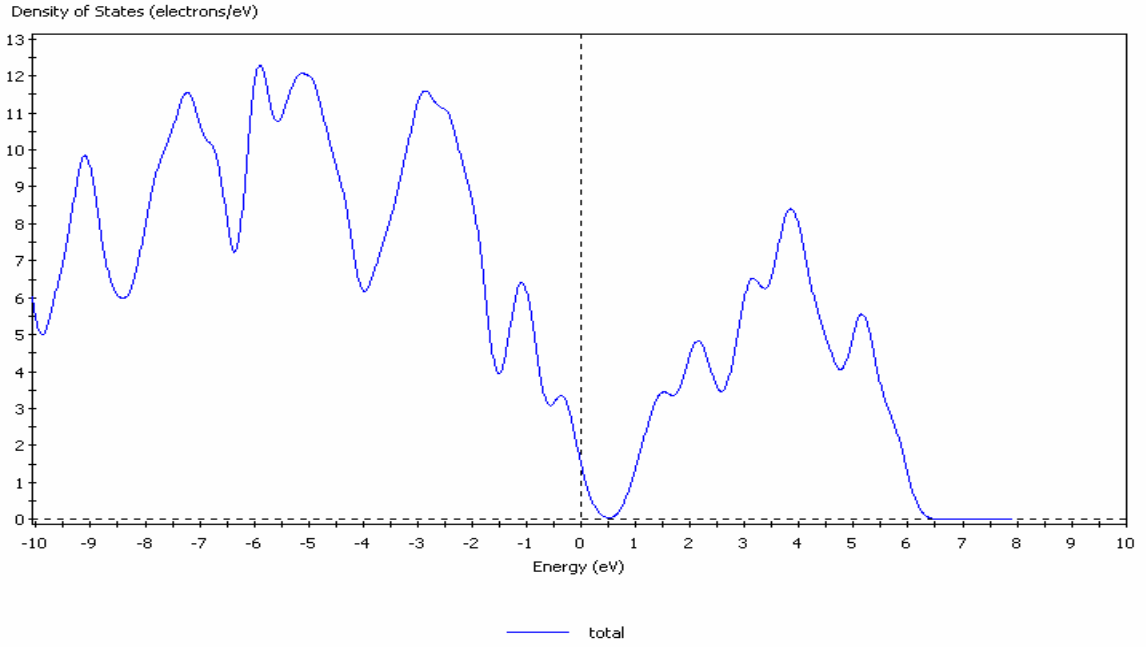




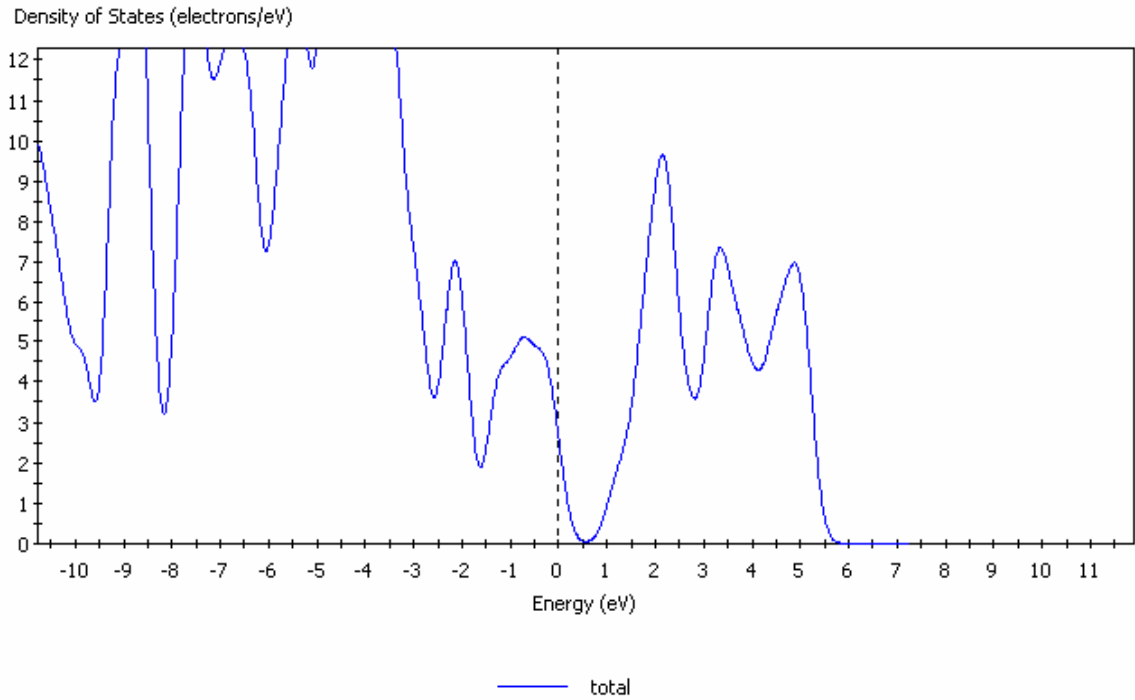
Şekil 3.15. BC<sub>2</sub>N (6,0) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi



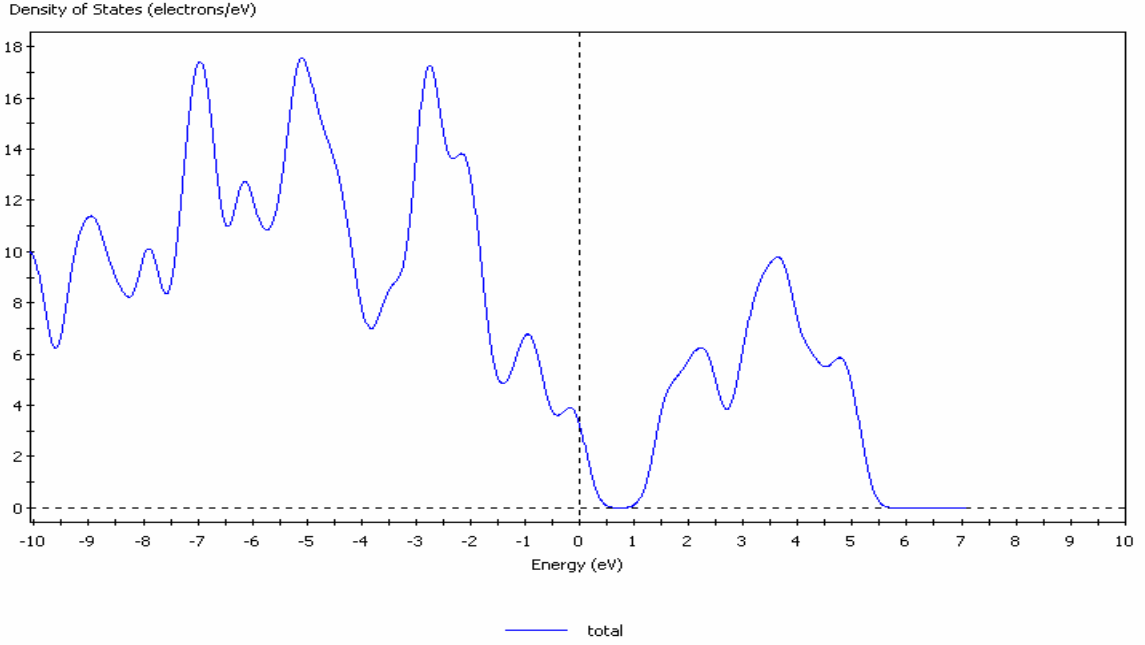
Şekil 3.16. BC<sub>2</sub>N (7,0) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.17. BC<sub>2</sub>N (8,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



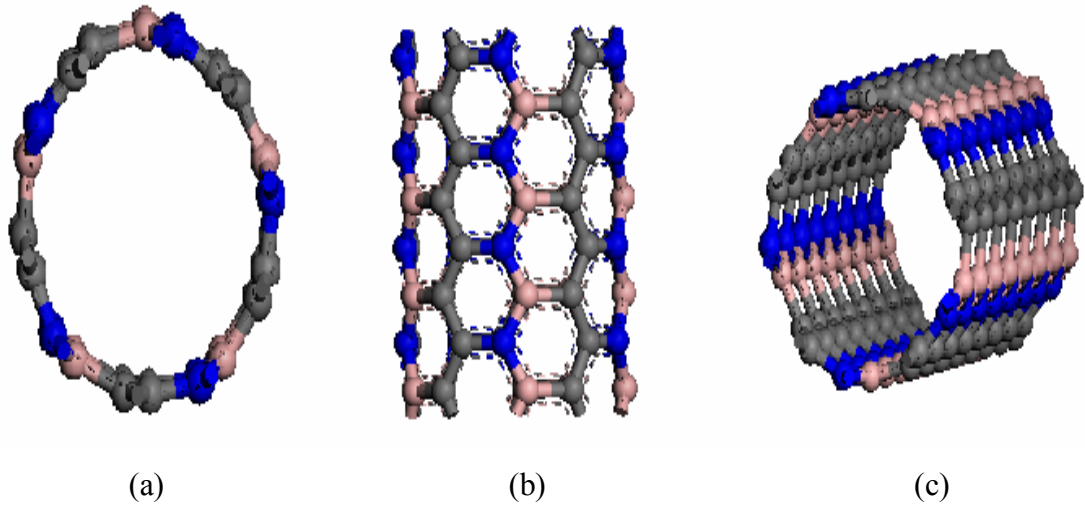
Şekil 3.18. BC<sub>2</sub>N (9,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



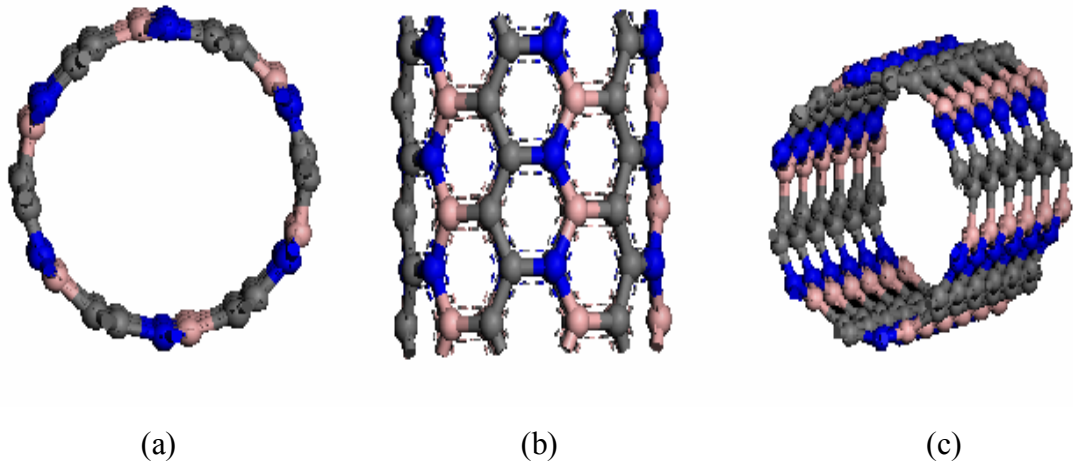
Şekil 3.19. BC<sub>2</sub>N (10,0) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi

### 3.1.2. BC<sub>2</sub>N (n,m), n=m=5-10 armchair nano tüpler

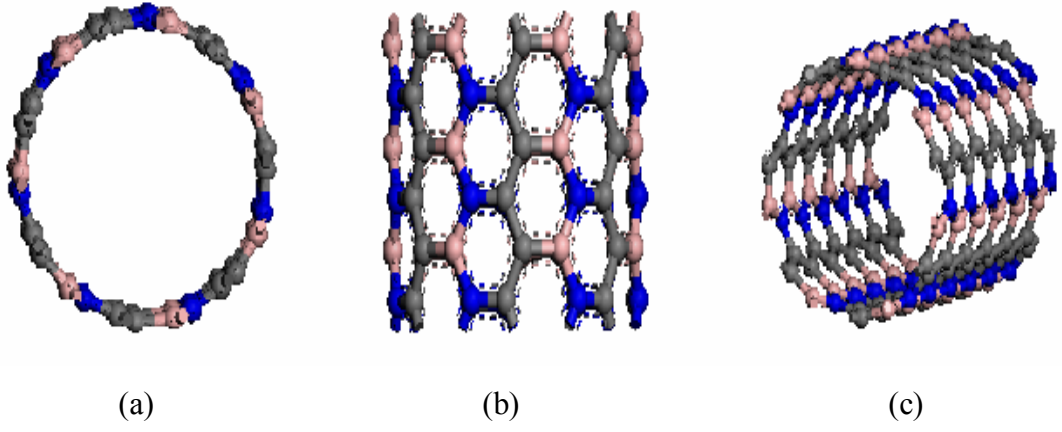
Birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda elde edilen optimize BC<sub>2</sub>N (5-10) armchair nano tüplerin üstten, yandan ve süper hücre gösterimleri sırasıyla Şekil 3.20 - Şekil 3.25' de verilmiştir. (5,5), (6,6), (7,7) nano tüpler birinci yapıdan; (8,8), (9,9), (10,10) nano tüpler ikinci yapıdan alınmıştır.



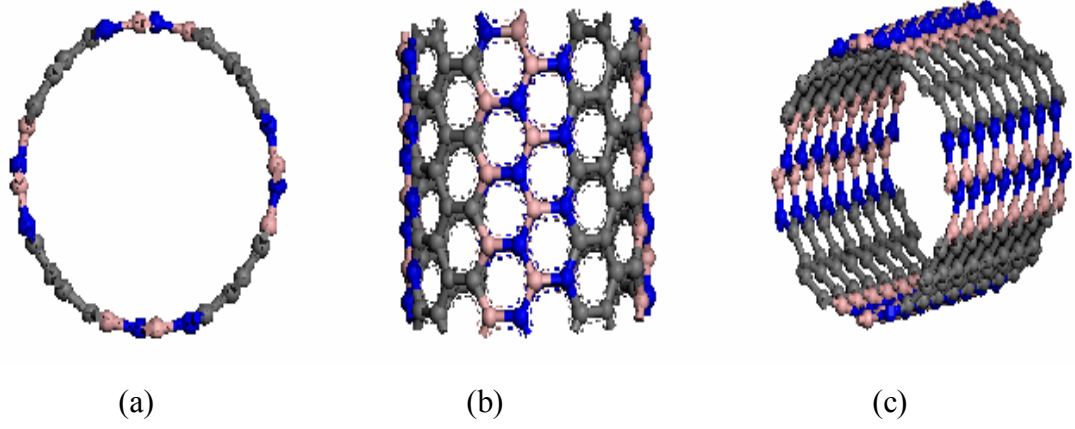
Şekil 3.20. BC<sub>2</sub>N (5,5) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



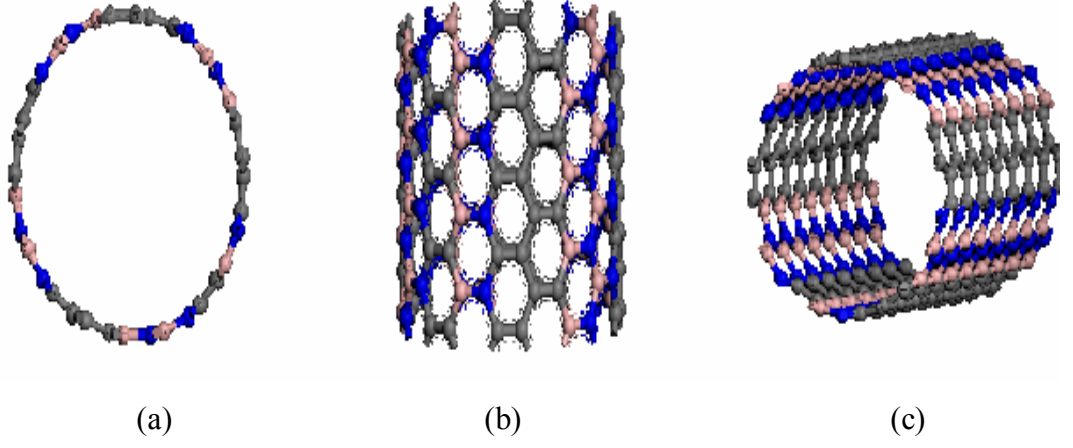
Şekil 3.21. BC<sub>2</sub>N (6,6) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



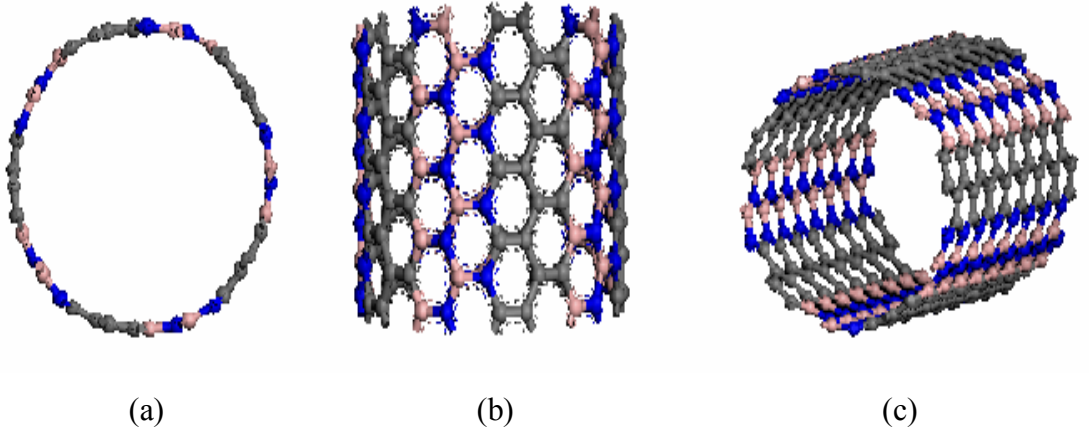
Şekil 3.22. BC<sub>2</sub>N (7,7) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



Şekil 3.23. BC<sub>2</sub>N (8,8) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



Şekil 3.24. BC<sub>2</sub>N (9,9) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri



Şekil 3.25. BC<sub>2</sub>N (10,10) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, (b) yandan ve (c) süper hücre olarak gösterimleri

Birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda elde edilen optimize BC<sub>2</sub>N (5–10) armchair nano tüplerin birim örgü parametreleri Çizelge 3.5’de verildi. Ayrıca toplam enerjileri, C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi, band yapıları hesaplandı ve Çizelge 3.6 ve Çizelge 3.7’ de gösterildi.

Çizelge 3.5. BC<sub>2</sub>N (5-10,5-10) armchair nano tüplerin birim örgü parametreleri

Nano tüpler	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
(5,5)	10,01 10,00*	9,85 10,00*	2,43 2,44*	90 90*	90 90*	120 120*
(6,6)	11,27 11,30*	11,27 11,30*	2,44 2,45*	90 90*	90 90*	120 120*
(7,7)	12,52 12,50*	12,71 12,75*	2,44 2,45*	90 90*	90 90*	120 120*
(8,8)	14,01 14,00*	13,91 14,00*	2,44 2,45*	90 90*	90 90*	120 120*
(9,9)	15,28 15,30*	15,28 15,30*	2,44 2,45*	90 90*	90 90*	120 120*
(10,10)	16,56 16,60*	16,70 16,75*	2,44 2,45*	90 90*	90 90*	120 120*

\*[26]’da verilen değerler ile yapılan hesaplamadan elde edilen sonuçları göstermektedir. Kesilim enerjisi 310 eV ve k nokta sayısı 10 olarak alınmıştır.

Çizelge 3.6. BC<sub>2</sub>N (5–10,5–10) zigzag nano tüplerin bağ uzunlukları (C-C, C-B, C-N ve B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları)

Bağ uzunlukları (Å)	
Bağ	BC <sub>2</sub> N tüpü
C-C	1,404
	1,42*
C-B	1,50
	1,51*
C-N	1,38
	1,39*
B-N	1,43
	1,45*

\* [26]' da verilen değerleri göstermektedir.

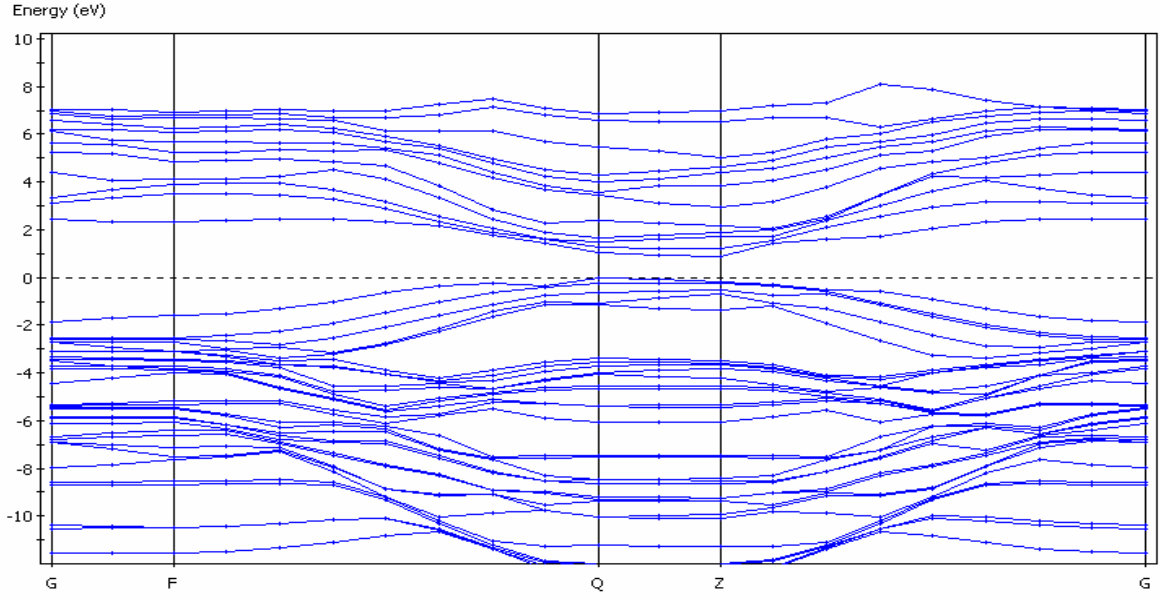
Çizelge 3.7. BC<sub>2</sub>N (5-10,5-10) armchair nano tüplerin toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjileri ve band yapıları

Nano tüp	$E_n$ (eV)	Yasak enerji aralığı	$E_b$ (eV)	Band Yapısı
(5,5)	-3315,046	0,89	-15,046	Direkt
	-3315,026*	1,46*	-15,512**	Direkt*
(6,6)	-3979,081	0,97	-19,081	Direkt
	-3979,224*	1,48*	-19,124**	Direkt*
(7,7)	-4643,002	0,96	-23,002	Direkt
	-4641,553*	1,52*	-23,079**	Direkt*
(8,8)	-5303,968	1,22	-23,968	İndirekt
	-5306,865*	1,56*	-23,889**	İndirekt*
(9,9)	-5966,431	1,096	-26,431	İndirekt
	-5970,703*	1,60*	-26,398**	İndirekt*
(10,10)	-6630,648	1,022	-30,648	İndirekt
	-6634,314*	1,63*	-30,563**	İndirekt*

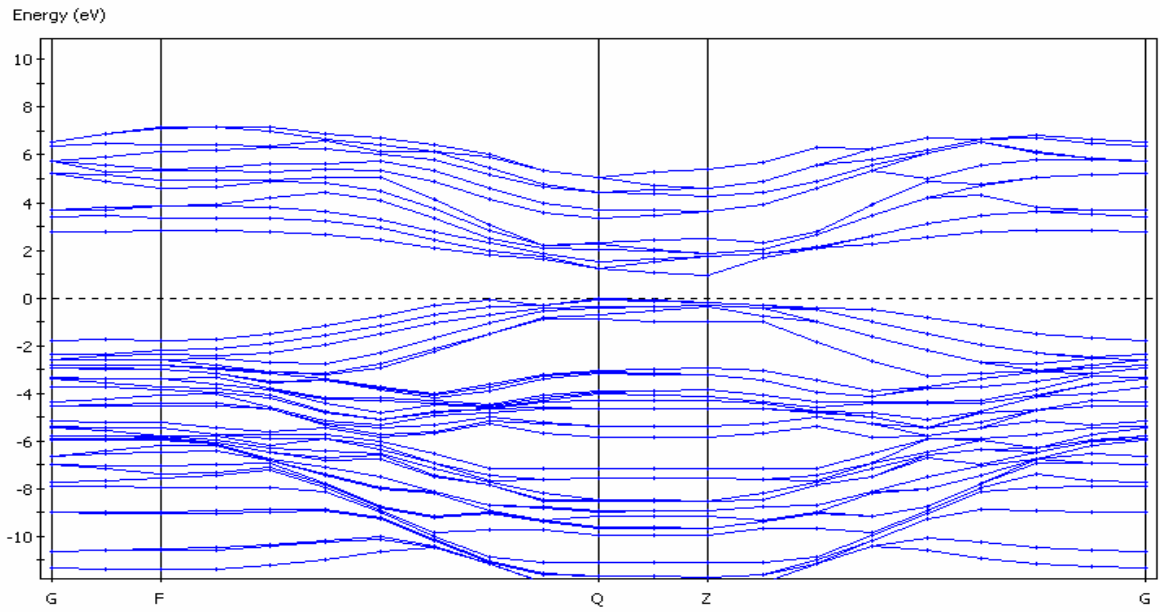
\* [27]' de verilen değerleri göstermektedir.

\*\*[19]'da verilen hesaplamayla elde edilen sonuçları göstermektedir.

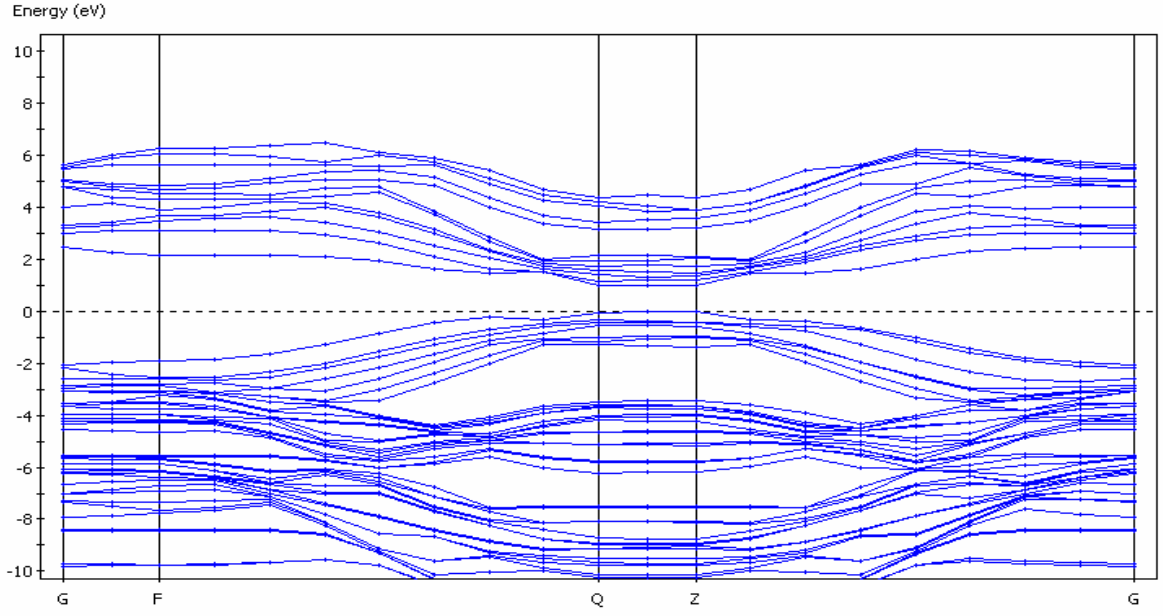




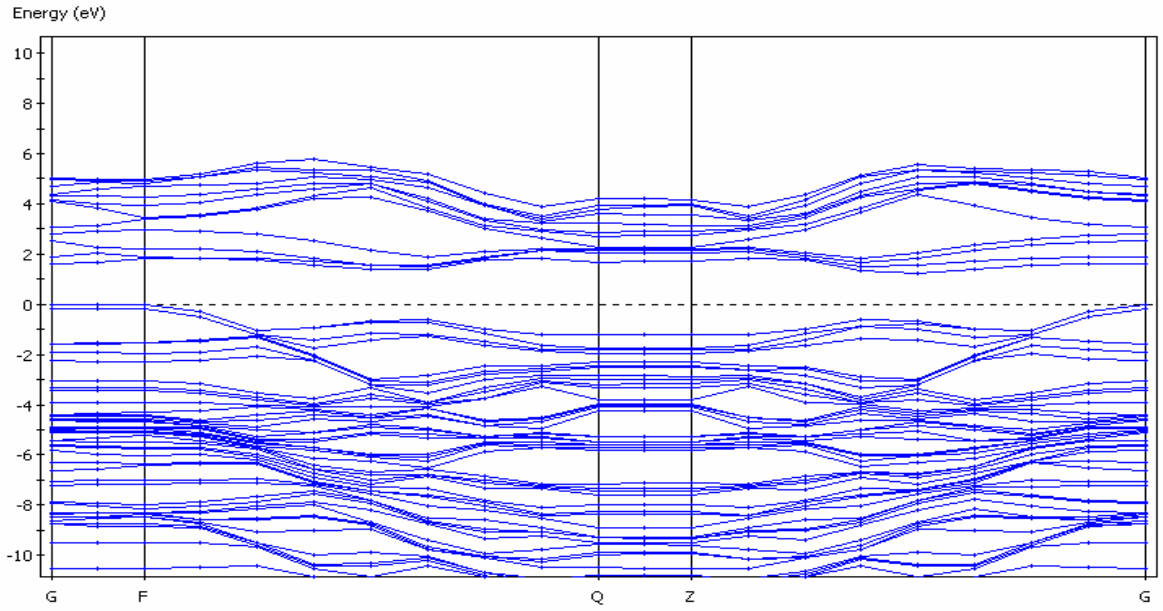
Şekil 3.26. BC<sub>2</sub>N (5,5) nano tüpün band yapısının gösterimi



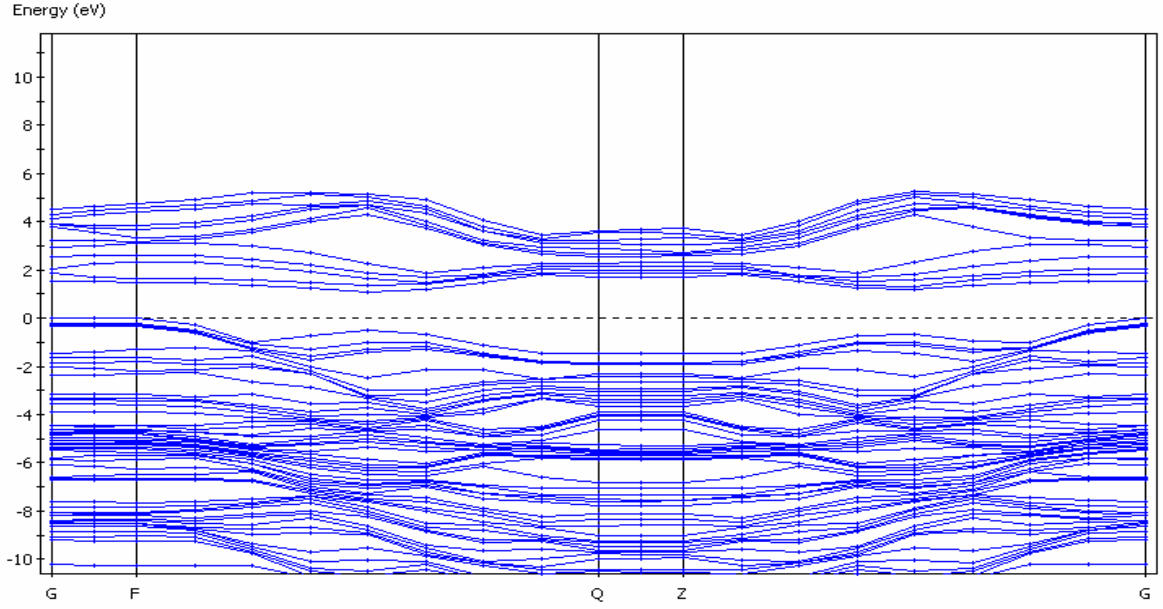
Şekil 3.27. BC<sub>2</sub>N (6,6) nano tüpün band yapısının gösterimi



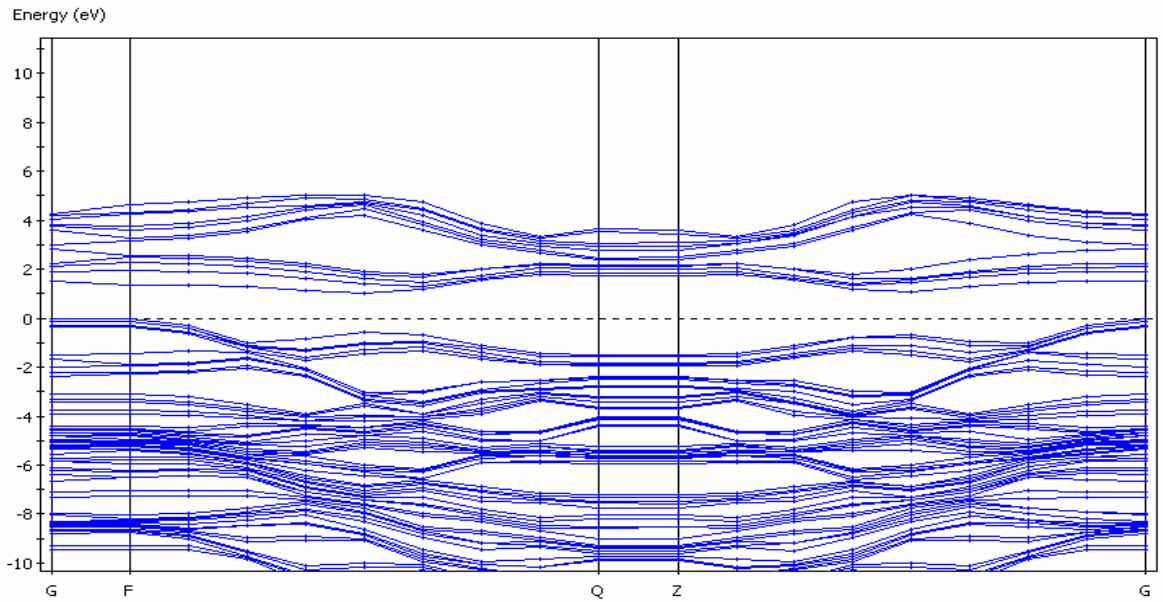
Şekil 3.28. BC<sub>2</sub>N (7,7) nano tütün band yapısının gösterimi



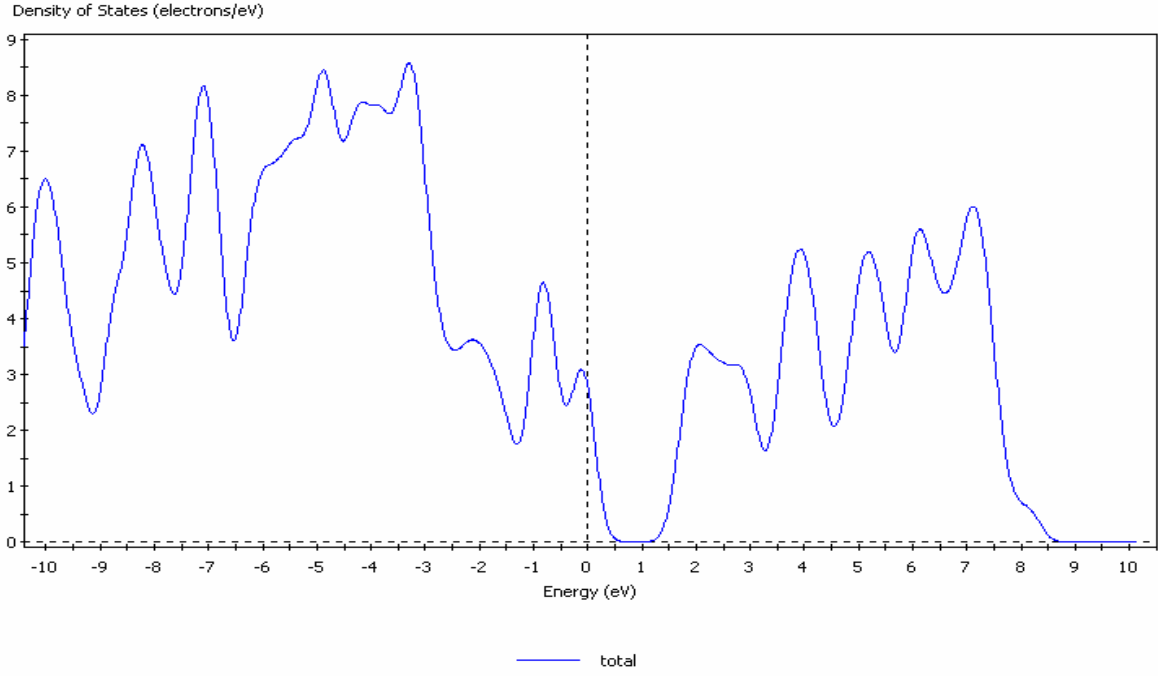
Şekil 3.29. BC<sub>2</sub>N (8,8) nano tütün band yapısının gösterimi



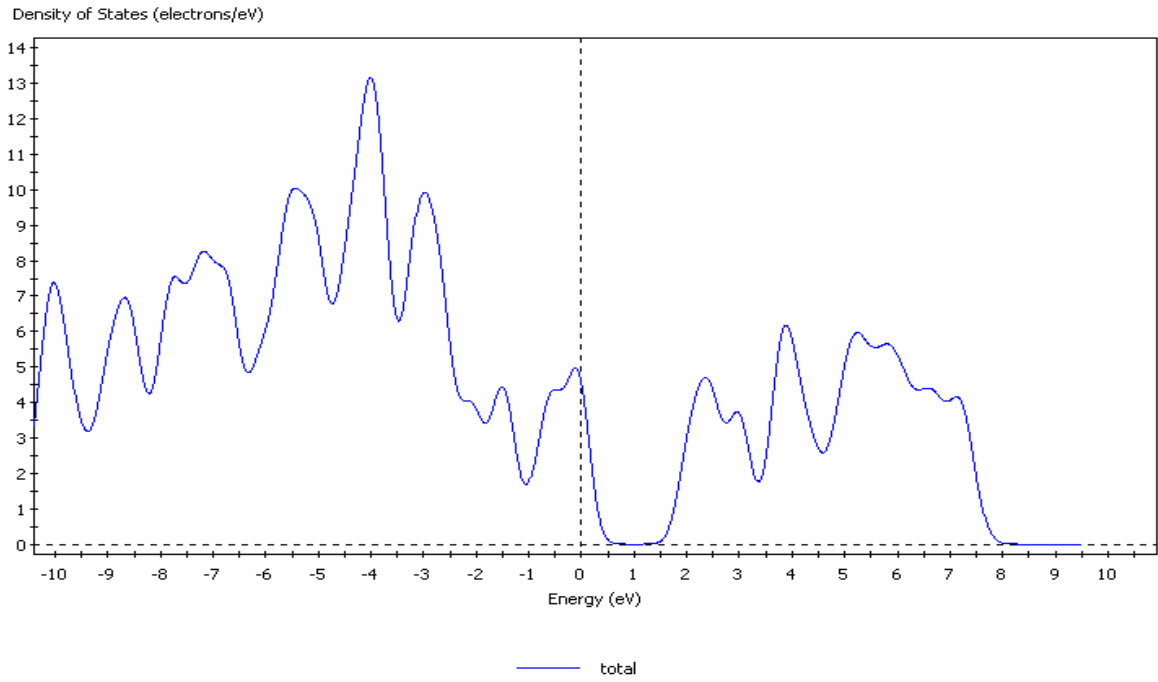
Şekil 3.30. BC<sub>2</sub>N (9,9) nano tütün band yapısının gösterimi



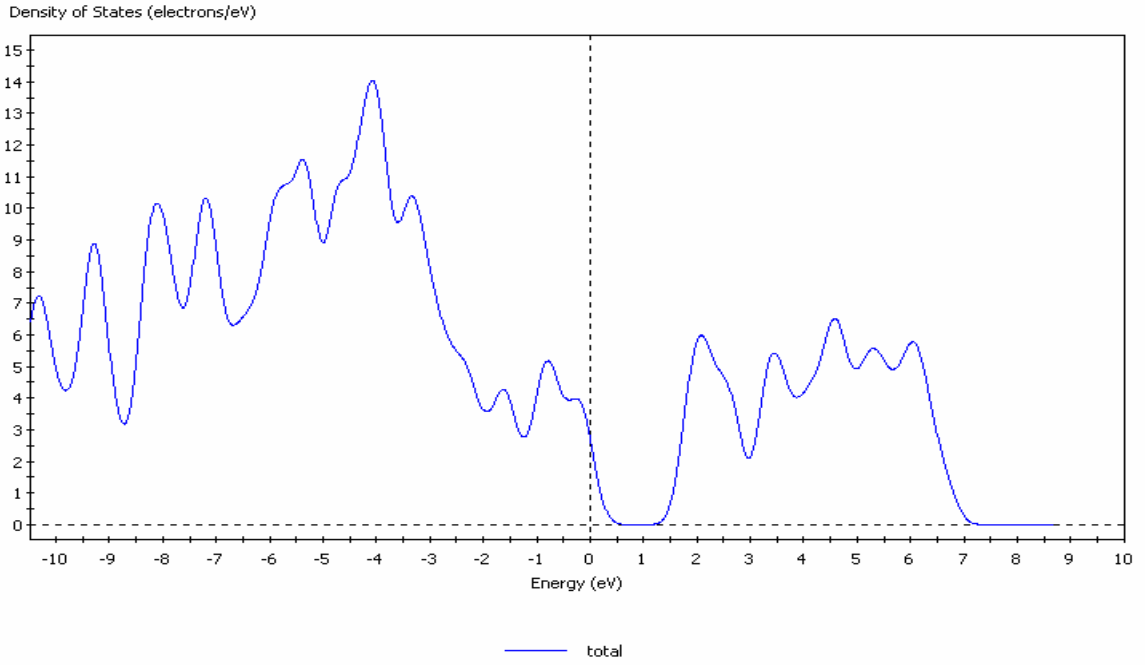
Şekil 3.31. BC<sub>2</sub>N (10,10) nano tütün band yapısının gösterimi



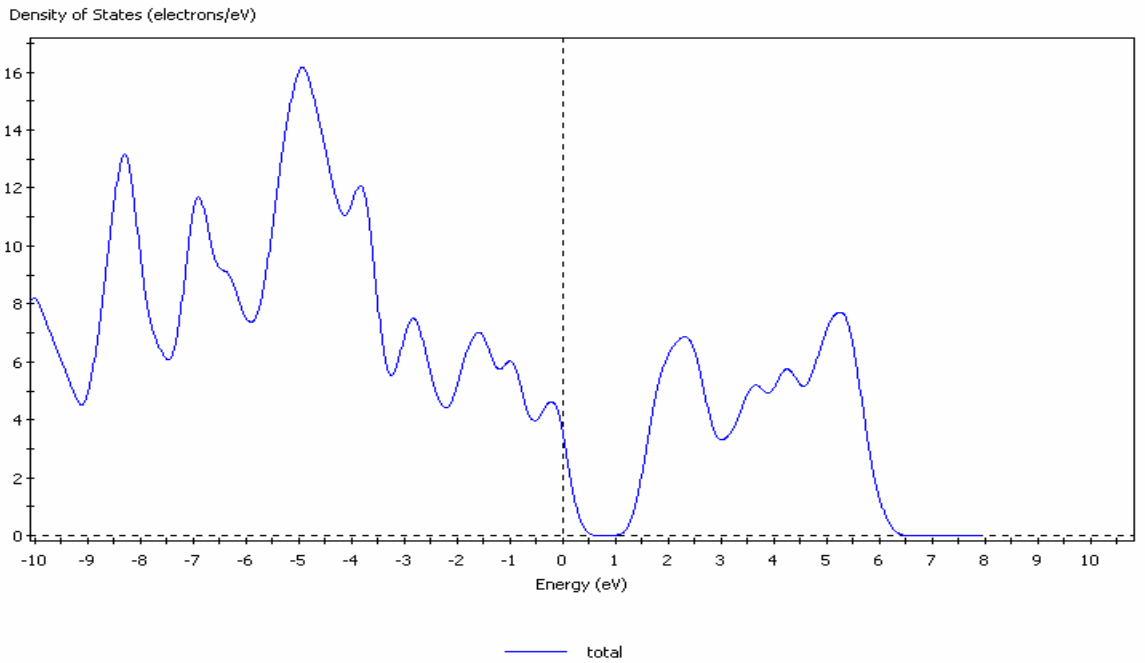
Şekil 3.32. BC<sub>2</sub>N (5,5) nano t p n durum yoęunluęunun g sterimi



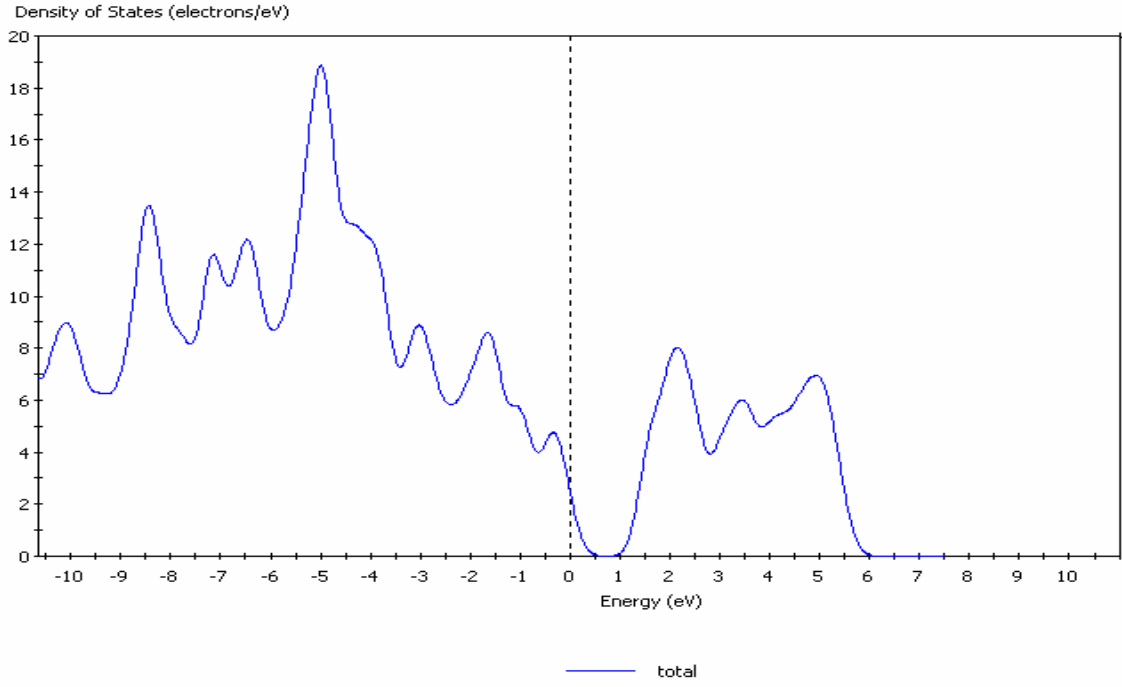
Şekil 3.33. BC<sub>2</sub>N (6,6) nano t p n durum yoęunluęunun g sterimi



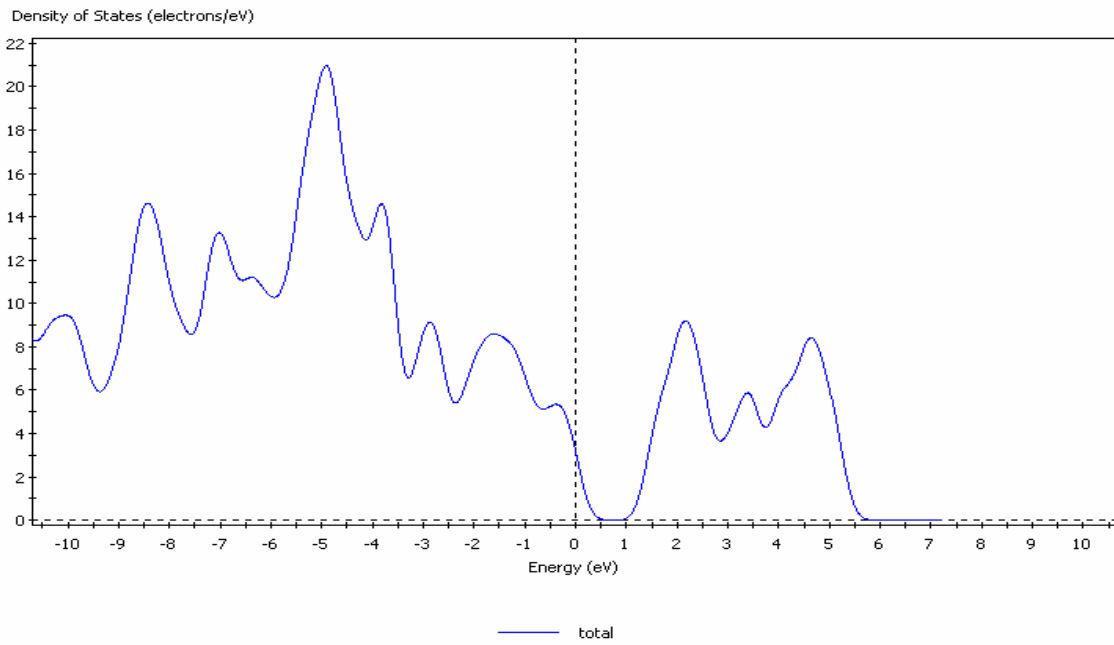
Şekil 3.34. BC<sub>2</sub>N (7,7) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.35. BC<sub>2</sub>N (8,8) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.36. BC<sub>2</sub>N (9,9) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.37. BC<sub>2</sub>N (10,10) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi

#### 4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada BC<sub>2</sub>N (5-10) armchair ve zigzag nano tüpler CASTEP paket programında, yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ile GGA yaklaşımı ve PBE modeli kullanılarak hesaplandı. Sonuçta toplam enerji değerleri, bağ uzunlukları, band aralıkları [26] ve [27] nolu referanslar ile uygun sonuçlar verdi.

Birim hücre sabit tutularak BC<sub>2</sub>N (5-10) armchair ve zigzag nano tüplerin dört farklı yapı için geometri optimizasyonu yapıldı. Band yapıları incelendiğinde birinci yapıya sahip olan (5,0), (6,0) zigzag nano tüpler hariç BC<sub>2</sub>N nano tüplerin yarıiletken olduğu görüldü. Birinci yapıdaki (5,0), (6,0) zigzag nano tüpler ise metaliktir. İkinci yapıdaki (5,0), (6,0) zigzag nano tüpler yine yarı iletken özellik göstermiştir. Bu durum nano tüplerin yapılarına göre içerdikleri karbon atomlarının etkileşimlerinden ve konfigürasyonundan kaynaklanmaktadır.

İncelediğimiz dört farklı yapının ikisi armchair ikisi ise zigzag yapıya sahipti. Elde ettiğimiz sonuçları karşılaştırdığımızda BC<sub>2</sub>N nano tüplerin geometrik özelliklerinin nano tüpün boyutuna ve atomların konfigürasyonuna bağlı olarak farklı özellikler gösterdiğini gördük. Yani nano tüpün atomik konfigürasyonunu değiştirirsek band aralıklarında değişim meydana gelmektedir. Genel olarak nano tüpün boyutu arttıkça yasak enerji aralığında da bir artış meydana gelmektedir. Ayrıca yine nano tüpün boyutuna bağlı olarak bağlanma enerjisinde de değişim meydana gelmektedir. Bağlanma enerjisi nano tüpün boyutu arttıkça artış göstermektedir.

## KAYNAKLAR

1. Ayhan, A., “Yeni bir teknolojik çağın kapısı aralanırken: Nano teknoloji”, *İpek Yolu Derg.*, Konya Ticaret Odası,194:14-20 (2004)
2. Gencer, Y., “Nano teknoloji ve karbon nanoyapılar”, Bitirme Tezi, *Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü*, 1 (2006)
3. Öge, U., “Tek duvarlı (8,0) zig-zag karbon nano tüpten bor-nitrür nano tüp sentezlenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, 1–5 (2006)
4. Höltje, H. D., Sippl, W., Rognan, D., Folkers, G., “Molecular Modelling”, 2nd ed. *Wiley-VCH*, 8: 18–78 (2003).
5. Gill, P. M. W., "DFT, HF and Self Consistent Field", Enc. Of Comp. Chemistry, *John Wiley & Sons Ltd*, New York, 3: 65–87(1996).
6. Stewart, J., In "Quantum Chemistry Program Exchange Catalog", *India University 14*, 455–488 (1983).
7. Akıncı, Ü., “Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi”, Yüksek Lisans Tezi, *Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, 4–5 (2005)
8. Gill, P. M. W., "DFT, HF and Self Consistent Field", Enc. Of Comp. Chemistry, *John Wiley & Sons Ltd*, New York, 3: 65-87 (1996).
9. Drexler, K.E., “Nanosystems: Molecular machinery, manufacturing, and computation”, *Wiley Interscience*, 18–22, (1992)
10. Başaran, E. ve Ayhan, A., “Nano teknoloji; Dünden Bugüne Türkiye’ de Bilim-Teknoloji ve Geleceğin Teknolojileri ”, *Beta Yayını*, 5: 379–388 (2002).



11. Çıracı, S., “21. yüzyılda yeni bir sanayi devrimi: Nano teknoloji”, *Bilim ve Ütopya*, 152: 4–11 (2007)
12. M. Daenen, R.D. de Fouw, B. Hamers, P.G.A. Janssen, K. Schouteden, M.A. J. Veld, “The Wondrous World of Carbon Nanotubes”, *Eindhoven University of Technology Project*, 4–12, (2003)
13. Koç, M.B., “Nano tüpler”, Bitirme Tezi, *Ankara Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Fizik Mühendisliği Bölümü*, 1–10 (2003)
14. Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., Avouris, P., “Carbon Nanotubes”, *Springer-Verlag*, 13–38 (2001)
15. Botrakh, B., Jonhson, J.K., Sholl, D.S., Howard, B., Matranga, C., Shi, W., Sorescu, D., Ajayan, P.M., Ramanath, G., Terrones, M., Ebbesen, T.W., “Igniting Nanotubes with a Flash”, *Science*, 297: 192–193 (2002).
16. T. Skipa “Modification of the electronic properties of carbon nanotubes by bundling, temperature, B- and N- doping: a resonance raman study”, *Institut für Festkörperphysik*, 15–24 (2006)
17. Matthieu Verstraete, “Ab initio calculation of the structural, electronic and superconducting properties of nanotubes and nanowires”, *Docteur en Sciences Appliquees*, 45–101 (2005)
18. F. Piazza, J.E. Nocua, A. Hidalgo, J. De Jesus, R. Velazquez, B.L. Weiss, G. Morell, “Formation of boron carbonitride nanotubes from in situ grown carbon nanotubes”, *Diamond and Related Materials*, 14: 965–969 (2005)
19. S. Azevedo, R de Paiva and J R Kaschny, “Stability and electronic structure of BxCyNz nanotubes” *J.Phys.: Condens, Matter*, 18: 10871-10879 (2006)

20. Yoshio Bando and Dmitri Golberg, “B-C-N nanotubes”, *National Institute for Materials Science*, 2: 14 (2004)
21. R. M. Wang and H. Z. Zhang, “Analytical TEM investigations on boron carbonitride nanotubes grown via chemical vapour deposition”, *New Journal of Physics*, 6: 78 (2004)
22. S. Azevedo, R de Paiva and J R Kaschny, “Structural stability and electronic properties of carbon-boron nitride compounds” *Europhys. Lett.*, 75 (1): 126-132 (2006)
23. S. Azevedo, “Energetic and electronic structure of BC<sub>2</sub>N compounds”, *Eur. Phys. J. B*, 44: 203–207 (2005)
24. Computer Code CASTEP, Materials Studio, Version 3.1, Accelrys Inc., San Diego (2004)
25. Çabuk, P., “BN nano tüpleri içinde Ni nano telleri”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü*, 5–10 (2006)
26. Hui Pan, Yuan Ping Feng and Jian Yi Lin, “First-principles study of optical spectra of single-wall BC<sub>2</sub>N nanotubes” , *Phys. Rev. B*, 73(035420): 1–6 (2006).
27. Hui Pan, Yuan Ping Feng and Jian Yi Lin, “Ab initio study of single-wall BC<sub>2</sub>N nanotubes” *Phys. Rev. B*, 74(045409): 1–4 (2006).
28. T. Kar, M. Cuma, S. Sceiner, “Structure, Stability and bonding of (BC<sub>2</sub>N)<sub>n</sub> n= 2,3: an ab initio study”, *Journal of Molecular Structure*, 556: 275–281 (2000)

29. Xiaoju Guo, Zhongyuan Liu, Xiaoguang Luo, Dongli Yu, Julong He, Yongjun Tian, Jian Sun and Hui-Tian Wang, “Theoretical hardness of the cubic BC<sub>2</sub>N”, *Diamond and Related Materials*, 16: 526–530 (2007)
20. VL Solozhenko, SN Dub and NV Novikov, “Mechanical properties of cubic BC<sub>2</sub>N, a new superhard phase”, *Diamond and Related Materials*, 10: 2228–2231 (2001)
31. Yi Zhang, Hong Sun and Changfeng Chen, “Superhard Cubic BC<sub>2</sub>N Compared to Diamond”, *Phys. Rev. Lett.*, 93(195504): 1-4 (2004)

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : BABAYİĞİT, İlknur

Uyruğu : T.C.

Doğum tarihi ve yeri : 19.03.1980, İstanbul

Medeni hali : Bekar

Telefon : 0 (537) 572 70 20

e-mail : [ibabayiyit@yahoo.com](mailto:ibabayiyit@yahoo.com)

### Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Anadolu Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2004
Lise	Çemberlitaş Kız Lisesi	1998

### Yabancı Dil

İngilizce

### Hobiler

Sinema, Bilgisayar, Yüzme