

BN NANO TÜPLER İÇİNDE Ni NANO TELLERİ

Pınar ÇABUK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2007

ANKARA

Pınar ÇABUK tarafından hazırlanan BN NANO TÜPLER İÇİNDE Ni NANO TELLERİ İ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK
Tez Yöneticisi

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

Başkan: : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK (Danışman)

Üye : Prof. Dr. Bülent KUTLU

Tarih : 27/06/2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

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.

Pınar ÇABUK

BN NANO TÜPLER İÇİNDE Ni NANO TELLERİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Pınar ÇABUK

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Haziran 2007

ÖZET

Nano yapılar, bilimsel olarak ilgi çekici ve teknolojik olarak önemli bir alandır. Bu tezde, BN nanotüplerin geometrik yapıları elde edilerek içlerine Ni nanotelleri yerleştirildi. Bütün hesaplamalar, Castep paket programı ile GGA-PBE ve 280 kesilim enerjisi kullanılarak yapıldı. Geometri optimizasyonu sonrası oluşan yapıların enerji bant yapısı ve elektron durum yoğunluğu incelendi.

Bilim Kodu : 202.1.018

Anahtar Kelimeler : BN nano tüpler, Ni nano telleri, Castep

Sayfa Adedi : 56

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

Ni NANO WIRES İN BN NANO TUBES

(M.Sc. Thesis)

Pınar ÇABUK

GAZI UNIVERSITY

INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

June 2007

ABSTRACT

Nanostructures are scientifically interesting and technologically important area. In this thesis the geometry of empty BN nanotubes has been constructed and BN nanotubes filled with the Ni nanowires. All computations have been done with GGA-PBE and 280 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 : 202.1.018

Key Words : BN nano tubes, Ni nano wires, Castep

Page Number : 56

Adviser : Prof. Dr. Mehmet ŞİMŞEK

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince değerli yardım ve katkılarıyla, ayrıca engin tecrübesi ve yorumlarıyla 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, ayrıca engin tecrübesi ve yorumuyla bana yardımcı olan hocam Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her an maddi manevi desteklerini hissettiğim, her durumda yanımda olan, destekleyen, üzüntümü ve mutluluğumu her zaman paylaşan aileme sonsuz teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca yardımlarını ve manevi desteklerini her zaman hissettiğim arkadaşlarım Ferhat Mamur' a, Murat Çavuş' a, Hacı Özışık' a, Nurettin Korozlu' ya, Zeynep Buhur' a ve diğer arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Bu çalışma 2001K120590 nolu proje kapsamında Devlet Planlama Teşkilatı (DPT) tarafından desteklenmiştir.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTARCT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiv
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)	3
2.3. Nano Teknoloji	5
2.3.1. Nano tüpler	6
2.3.2. BN nano tüpler	7
2.4. Nikel Elementi ve Nikel Nano Teli	8
2.5. Bor Atomu ve Uygulama Alanları	9
2.6. Castep	10
3. HESAPLAMALAR	13
3.1. BN Nano Tüpler	13

Sayfa

3.1.1. BN (n,0), n = 3 - 8 nano tüpler	14
3.2. Boron Nitrit Nano Tüp İçine Ni Atomu Konularak Yapılan Çalışmalar	24
3.2.1. İçinde üç nikel atomu bulunan Boron Nitrit (6,0) nano tüp	24
3.2.2. İçinde tek nikel atomu bulunan Boron Nitrit (3,0) nano tüp	29
3.2.3. İçinde tek nikel atomu bulunan Boron Nitrit (4,0) nano tüp	32
3.2.4. İçinde iki tane nikel atomu bulunan Boron Nitrit (4,0) nano tüp	37
3.2.5. İçinde iki tane nikel atomu bulunan Boron Nitrit (5,0) nano tüp	43
3.2.6. İçinde beş tane Ni atomu bulunan Boron Nitrit (7,0) nano tüp	45
3.2.7. İçinde Ni atomu bulunan BN nano tüplerin bağlanma enerjileri	49
4. SONUÇ VE TARTIŞMA	52
KAYNAKLAR	54
ÖZGEÇMİŞ	56

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. Hesaplamalarda kullanılan parametrelerin gösterimi	13
Çizelge 3.2. BN nanotüplerin geometri optimizasyondan önceki birim örgü parametreleri (birim hücre serbest bırakılıp dış basınç (2,6 GPa) uygulandığı durumda)	17
Çizelge 3.3. BN nanotüplerin geometri optimizasyondan sonraki birim örgü parametreleri (birim hücre serbest bırakılıp dış basınç (2,6 GPa) uygulandığı durumda)	17
Çizelge 3.4. BN nano tüplerinin (2,6 dış basınç uygulandığında) toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjisi (1,23 ile çarpılmış şekli gösterilmiştir).....	18
Çizelge 3.5. Hesaplanan BN nano tüplerinin bağ uzunlukları (B-N atomları arasındaki uzunluklar), D_B (B-B arası) ve D_N (N-N arası) uzunluklarının gösterimi	19
Çizelge 3.6. İçinde üç nikel bulunan BN (6,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki toplam enerjileri.....	25
Çizelge 3.7. İçinde üç tane nikel atomu bulunan BN (6,0) nano tüpün geometri optimizasyonundan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi	26
Çizelge 3.8. İçinde üç nikel bulunan BN (6,0) nano tüplerin geometri optimizasyondan sonraki bağ açılarının (0) gösterimi.....	27
Çizelge 3.9. İçinde tek nikel atomu bulunan BN (3,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki atomlar arası uzaklıkları)	30
Çizelge 3.10. İçinde tek nikel atomu konulan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon sonucundaki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (Birim hücre sabit tutulduğunda)	33
Çizelge 3.11. İçinde tek nikel atomu konulan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon sonucundaki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (4 GPa dış basınç uygulandığı durumda)	35
Çizelge 3.12. İçinde iki tane nikel atomu konulan ve sabit tutulan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi	38

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.13. İçinde iki tane nikel atomu konulan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi	40
Çizelge 3.14. İçinde farklı sayılarda nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki şeklinin birim örgü parametreleri	40
Çizelge 3.15. İçinde farklı sayılarda nikel bulunan BN (4,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki toplam enerjisi	41
Çizelge 3.16. İçinde iki tane nikel atomu bulunan BN (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (birim hücre sabit).....	44
Çizelge 3.17. İçinde iki tane nikel atomu bulunan BN (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki toplam enerjisinin ve yasak enerji aralığının gösterimi	45
Çizelge 3.18. İçinde beş tane nikel atomu bulunan BN (7,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (birim hücre sabit).....	47
Çizelge 3.19. Nikel atomlarının geometri optimizasyondan sonraki toplam enerjileri	50
Çizelge 3.20. İçinde nikel atomları bulunan BN (3-8) nano tüplerin bağlanma enerjilerinin gösterimi.....	50

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 3.1. BN (3,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	15
Şekil 3.2. BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	15
Şekil 3.3 BN (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	15
Şekil 3.4. BN (6,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	16
Şekil 3.5. BN (7,0 nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	16
Şekil 3.6. BN (8,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri	16
Şekil 3.7. BN (3,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	19
Şekil 3.8. BN (4,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	20
Şekil 3.9. BN (5,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	20
Şekil 3.10. BN (6,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	20
Şekil 3.11. BN (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	21
Şekil 3.12. BN (8,0) nano tüpün band yapısının gösterimi.....	21
Şekil 3.13. BN (3,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	21
Şekil 3.14. BN (4,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	22
Şekil 3.15. BN (5,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	22
Şekil 3.16. BN (6,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	22
Şekil 3.17. BN (7,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	23
Şekil 3.18. BN (8,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi.....	23

Şekil	Sayfa
Şekil 3.19. İçine üç tane nikel atomu konulan BN nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (dış basınç uygulamadan ve birim hücre sabit iken yapılan çalışma)	24
Şekil 3.20. İçinde üç nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (6,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (2,6 GPa dış basınç altında).....	28
Şekil 3.21. İçinde üç nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (6,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (2,6 GPa dış basınç altında)	28
Şekil 3.22. İçinde tek nikel atomu bulunan BN (3,0) nano tüpün optimize olduktan sonraki (a) yandan ve b) süper hücre) gösterimi.....	29
Şekil 3.23. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)	31
Şekil 3.24. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)	31
Şekil 3.25. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (Dış basınç = 2,6 GPa).....	31
Şekil 3.26. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç = 2,6 GPa).....	32
Şekil 3.27. BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (Dış basınç uygulanmadığı durumda)	33
Şekil 3.28. BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki (a) önden b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (4 GPa dış basınç uygulandığı durumda).....	34
Şekil 3.29. İçinde tek nikel atomu bulunan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (2,6 GPa dış basınç uygulandığı durumda)	36
Şekil 3.30. İçinde tek nikel atomu bulunan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (2,6 GPa dış basınç uygulandığı durumda)	36

Şekil	Sayfa
Şekil 3.31. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapılmış (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi.....	37
Şekil 3.32. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (2,6 GPa uygulandığında)	39
Şekil 3.33. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre sabit tutularak band yapısının hesaplanması (dış basınç uygulanmadığı durumda)	42
Şekil 3.34. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre serbest bırakılarak band yapısının hesaplanması (2,6 dış basınç uygulandığında).....	42
Şekil 3.35. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre sabit tutularak durum yoğunluğunun hesaplanması (dış basınç uygulanmadığı durumda)	42
Şekil 3.36. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre serbest bırakılarak durum yoğunluğunun hesaplanması (2,6 dış basınç uygulandığında)	43
Şekil 3.37. İçinde iki nikel atomu bulunan ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapılan BN (5,0) nano tüplerin (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi	44
Şekil 3.38. İçinde beş nikel atomu bulunan ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapılan BN (5,0) nano tüplerin (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi	46
Şekil 3.39. İçinde beş tane nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)	48
Şekil 3.40. İçinde beş tane nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (7,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)	49

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
BN	Boron Nitrit
eV	Elektron volt
Å	Angstrom
P	Elektron yoğunluğu
GPa	Giga Pascal
Kısaltmalar	Açıklama
CASTEP	Cambridge Serial Total Energy Package
GGA	Genelleştirilmiş Eğim Yaklaşımı
LDA	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
BPE	Perdew-Burke-Ernzerhof
DFT	Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi
Ψ	Moleküler orbital, dalga fonksiyonu
E	Molekülün toplam enerjisi
H	Moleküler Hamiltoniyen
V	Potansiyel enerji
E^T	Kinetik enerji
E^V	Potansiyel enerji
E^J	Coulomb enerji
E^X	Değiş tokuş enerjisi
E^C	Korelasyon enerjisi
E^{XC}	Değiş tokuş ve korelasyon enerjisi
E_e	Molekülün elektronik enerjisi

Kısaltmalar**MNT****D_b****D_n****Açıklama**

Moleküler Nanoteknoloji

Bor atomları arasındaki uzaklık

Azot atomları arasındaki uzaklık

1.GİRİŞ

Son zamanlarda nano teknoloji, bilimsel yenilikler ve teknolojik gelişmeler açısından önemli ve ilginç uygulama alanlarından birisi olmuştur. Yeni bir teknoloji olduğundan dolayı birçok elementin bilinmeyen özellikleri keşfedilmekte ve insan hayatını kolaylaştırabilecek farklı özellikler ortaya çıkmaktadır. Nano teknoloji sadece nano bilim alanında sınırlı kalmayıp fizik, biyoloji, kimya, endüstri ve mühendislik alanlarının [1] yanında özellikle insan hayatını etkileyecek olan tıp alanında çok değişik uygulamalara rastlanmaktadır [2].

Nano teknolojinin en önemli uygulama alanlarından biriside nano tüplerdir. Çalışmamız da BN nano tüpler ve BN nano tüplerin geçiş elementleri ile kullanılabilme durumları incelenmiştir.

Yaptığımız hesaplamaları genel olarak iki grupta toplayabiliriz.

- Çalışmalarımızın başlangıcında test aşaması olarak BN (3-8) zig-zag yapıların enerjisi, bağ uzunlukları, yasak enerji aralığı hesaplanmıştır.
- Daha sonra BN nano tüpler içerisine geçiş elementleri olan nikel atomlarından farklı sayılarda konularak ve dış basınç uygulanarak hesaplamalar yapılmıştır.

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 hareketle ve bilgisayar yardımı ile hesaplanması olarak açıklanabilir. Molekül modellemede amaç; molekülün enerjisini analitik olarak yazmaktır. Enerji analitik olarak yazıldığı takdirde birçok fiziksel büyüklük hesaplanabilir [3].

Moleküler modellemede kullanılan fiziksel metotları iki grupta açıklayabiliriz:

- Moleküler mekanik metotlar
- Elektronik yapı metotları

2.1.1. Moleküler mekanik metotlar

Moleküler mekanik metotlar; 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 metotları

Elektronik yapı metotları, molekülü oluşturan atomların elektronik yapısını detaylı olarak göz önüne alarak hesaplama yapar.

Moleküllerin özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan bu metotlar iki gruba ayrılır:

- *Ab initio* metotlar
- Yarı deneysel (*semi-emprical*) metotlar

Ab initio metotlar

Molekölü oluşturan atomlar ile ilgili olarak deneysel değerler kullanmadan fiziğin temel yasalarından hareketle hesap yapar. Bu metot, kuantum mekaniksel kanunlar ile moleküler yapı ve bu yapıya bağlı özelliklerin hesaplanmasında kullanılır. Hesaplama süresi, molekül ya da moleküler sistemin içerdiği elektron sayısına bağlı olduğu için moleküler mekanik sistemlere oranla daha fazladır.

Yarı deneysel (semi-emprical) metotlar

Yarı deneysel metotlarda, kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak hesaplamalar yapılır. Bu metotta parametreler deneysel verilerden alınır. Hesaplama süresi ab initio hesaplarına oranla daha kısadır.

2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyon teorisinin temeli 1964 yılında Hohenberg ve Kohn' un elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisi elektron yoğunluğunun (ρ) bir fonksiyoneli olarak yazmasıdır. Sistemin taban durum özellikleri; taban durum yoğunluk ve enerji fonksiyoneli bilgisiyle tanımlanabilir [4].

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

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.1)$$

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

Moleküller kuantum mekaniksel olarak incelenirken moleküler hareket; protonun kütlesi ($1,67 \times 10^{-27}$ kg) elektronun kütlesinin ($9,1 \times 10^{-31}$ kg) yaklaşık 1840 katı olması nedeni ile çekirdek ve elektronun hareketi birbirinden bağımsız kabul edilirse, çekirdek elektrona göre hareketsiz kabul edilebilir. Bu yaklaşıma Born-Oppenheimer yaklaşımı denilir [5].

Bir molekülün elektronik enerjisi ise,

$$E_e = E^T + E^V + E^J + E^{XC} \quad (2.2)$$

- E^T elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji,
- E^V çekirdek–elektron çekim ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisi,
- E^J elektron-elektron itme terimi (elektron yoğunluğunun coulomb öz-etkileşimi olarak da tanımlanır),
- $E^{XC} = E^X + E^C$ ise değiş tokuş (E^X) ve korelasyon (E^C) terimidir ve elektron-elektron etkileşmelerinin geri kalan kısmını kapsar. Daha doğrusu; değiş tokuş enerjisi aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşim enerjisidir. Kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun anti simetrikliğinden dolayı ortaya çıkar. Korelasyon enerjisi ise farklı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir [6,7].

DFT’ de kullanılan temel kavramları aşağıdaki gibi belirtebiliriz.

1. Elektron yoğunluğu, $\rho = \rho(\vec{r})$, 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 (ρ) sabit kabul edilmiştir, yani $\rho = n/V$ ile verildiği ve sistemde $n, V \rightarrow \infty$ olduğu varsayımı yapılmıştır [8,9].

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 ve bu kavram DFT' de sıkça kullanılmaktadır.

2.3. Nano Teknoloji

1974 yılında Tokyo Üniversitesinde Norio Taniguchi tarafından ortaya atılan Nano teknoloji mevcut teknolojilerin daha ileri düzeyde duyarlılık ve küçültülmesine dayalı olarak hızla ortaya çıkan teknolojilerdir. Gelecekte bu teknoloji muhtemelen Moleküler Nano Teknolojisi (MNT) adıyla nano büyüklüğündeki boyutlarıyla yapı makineleri ve mekanizmalarını da içerecektir.

Nano teknoloji en az bir boyutu 1–100 nm olan materyaller, cihazlar ve sistemler ile ilgilenir. Daha farklı ve üstün nitelikli mekanik, elektrik, ısı, optik ve kimyasal özelliklere sahip materyal ve sistemler geliştirmeyi amaçlar. Başlıca:

- Nanometre ölçekli yapıların analizi ve imalatı
- Nanometre boyutundaki yapıların fiziksel özelliklerinin anlaşılması,
- Nano ölçekli cihazların geliştirilmesi,
- Nano hassasiyetli cihazların geliştirilmesi,
- Daha farklı ve üstün nitelikli mekanik, elektrik, ısı, optik ve kimyasal özelliklere sahip materyal ve sistemler geliştirmesi.

Nano teknolojinin kullanım ve uygulama alanları aşağıdaki gibidir:

- Karbon nano tüp ve nano litografi,
- Karbon lifler üreterek hidrojen bataryası olarak kullanma,
- Nano kütüphaneler,

- Veri bilgi depolama
- Hücre onarım robotları
- Polietilen üretiminde zincir yapısı değişimi ile çelikten sağlam taşıyıcı halat üretimi
- n ve p tipi transistör ve elektronik devrelerin imali

Kısaca nano teknoloji temelde moleküler ve atomal düzeydeki malzeme ile uğraşmaktadır. Bu özellikleri, istenen işlevleri yerine getirebilecek biçimde, insan eliyle tasarımlanabilen ve moleküler/atomal düzeyde denetlenebilen, yepyeni malzemeler, yapılar, organizmalar, sistemler, cihazlar ortaya çıkarmak demektir. Örneğin; gelecekte kalıcı bellekler, hızlı bilgi işleme ve daha az enerji harcayan işlemciler kullanılacaktır.

2.3.1. Nano tüpler

Nano tüpler, nano teknolojinin en önemli uygulama alanlarından birisidir. Nano tüplerin çok ilginç ve değişik uygulama alanları bulunmaktadır. Örneğin karbon nano tüpler çelikten daha güçlü ve plastik kadar esnektir. Esnek olduğundan her türlü şekli alabilir. Enerjiyi şimdiye kadar keşfedilen tüm maddelere göre daha iyi iletirler. Ağırlıklarının çok hafif olması, yüksek elastiklik modülüne sahip olması ve gözüken en dayanıklı fiber olması ihtimalleri karbon nano tüplerin en önemli özelliklerindedir [10]. Nano yapıya yabancı bir atomun yapışması, elektronik özelliklerini değiştirmektedir. Örneğin elektrik iletkenliğini, fark edilebilir şekilde değiştirmektedir. Bu yabancı atom, geçiş elementi olduğunda, yapıştığı bir nano yapıya, manyetik özellikler kazandırabilmektedir. Kısacası, bir nano yapının fiziksel özellikleri, bağ yapısı ve dolayısı ile dayanıklılığı, onun büyüklüğüne ve boyutuna bağlı olarak önemli değişimler gösterebilmektedir [11].

Kullanım alanları

Nano tüplerin özelliklerinden dolayı kimyasal algılayıcılardan ilaç iletme sistemlerine [12], nano ölçekli bilgisayar devrelerinden bir uzay merdiveni projesine kadar gerçekleşmiş, tasarlanmış ya da hayal edilmiş pek çok kullanım alanı kazandırmıştır. Olağanüstü elektriksel özellikleri nedeniyle, televizyon ve bilgisayar gibi elektronik alanında kullanılmaktadır.

Bu nedenle nano tüpler endüstride devrim yaratacak malzemelerdir. C, BN, BC₂N, Si, Au nano tüpleri sık kullanım alanları bulabilecek önemli nano tüplerdir.

2.3.2. BN nano tüpler

BN nano tüpler bor ve azot atomları ile oluşturulan yarıiletken malzemelerdir. Bu nano tüpler son zamanlarda değişik alanlarda sıkça kullanılan karbon nano tüplerin yeni bir alternatifidir. BN nano tüpler modern teknolojinin birçok alanında kullanılabilir bir nano tüp çeşididir ki özelliklerinden dolayı hidrojen depolama, veri depolama, manyetik kayıt sistemleri gibi alanlarda kullanılabilen üstün nitelikli yapılarıdır. BN nano tüpünün duvarları yüksek yoğunluklu bilgi depolaması için verimli olarak kullanılabilir nano tüplerdir [13].

BN nano tüplerin içerisine geçiş metallere oluşturulan nano teller konulduğunda BN nano tüplere manyetik özellikler kazandırır ve dayanıklılığını artırır. BN nano tüpler nano teller için doğal yalıtkan özelliği gösterirler [14].

BN nano tüpler çok geniş yasak enerji aralığına sahiptir. Bu nedenle dış müdahalelerden boşluk içindeki nano teller için koruma sağlar. Bu bir nano tüp içindeki nano telin kılıflanması gibidir [14].

Karbon nano tüpleri geçiş metalleri ile dolu iken dayanıklı fakat aynı sistemlerde yarı metalik davranış göstermemiştir. BN nano tüpleri ise geçiş metalleri ile yarı metalik davranış göstermektedir [13].

2.4. Nikel Elementi ve Nikel Nano Teli

Nikel demirin bazı özelliklerini taşıyan beyaz, parlak, dövülebilen, ısıtıldığı zaman kırılmadan uzayabilen bir madendir. Kullanılan madenlerin içinde en sertidir. Yerin yüzeyinde bol değildir. Gök taşlarında saf halde bulunur.

Nikel bir geçiş metalidir. Geçiş metalleri esas olarak sertlikleri, yüksek yoğunlukları, iyi ısı iletkenlikleri yüksek erime ve kaynama sıcaklıklarıyla tanınırlar. Geçiş metallerinin hepsinin elektron dizilimlerinde en dıştaki yörünge hep “d” yörüngesidir. Tepkimelere giren elektronlar bu yörüngedeki elektronlardır.

Saf nikel özellikle sağlamlığı nedeni ile kullanılır. Kimyasal etkenlerden etkilenmez ve hava değişimlerinden bozulmaz. Bu özelliği yüzünden birçok alaşım türünün yapımında aranan bir elemandır. Yüksek ısılara dayanır ve deniz suyundan etkilenmez. Bazı alaşımlarda çelik esasına dayandırılır. Ni-Cr 'lu çelikler hiç oksitlenmediklerinden sanayide pek çok yerde kullanılır.

Ayrıca nikel elektronik tellerde ve batarya içlerinde kullanılır. Sertliği düşüktür. Bu nedenle kolay şekil alabilir. Altın, gümüş, bakır gibi alaşımlarda sertleştirme işlemlerinde düşük sıcaklıkta kullanılabilir.

Nikel Nano teknolojiye kullanılan önemli bir elementtir. Nikel genellikle nano tel olarak kullanılmaktadır. Nikel ile yapılmış birçok deneysel çalışma vardır. Nikel nano teli magneto optik uygulamalarda ve nano tüp uygulamalarında kullanılabilir [15]. Ayrıca nano ölçekli yapılar içinde nano teller önemli bir kategori oluşturmaktadır. BN nano tüp içerisine konulduğunda nano tüpe manyetik

özellikler kazandırır ve dayanıklılığını artırır [13]. Nano tellerde sadece elektriksel iletkenlik değil ısı iletimi de kuantumlaşmaktadır [16]. Elektronik devrelerin ölçüleri günden güne küçüldüğünden, gelecekte teknoloji kuantum fiziğinin sınırlarına dayanacaktır. O aşamada, elektron, ısı taşınımında kuantum etkileri gösteren nano teller önemli ve yararlı roller oynayacaktır [17].

2.5. Bor Atomu ve Uygulama Alanları

Bor, ametal sınıfında B harfi ile gösterilen bir kimyasal elementtir. 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. Bu yüzden bor element olarak yarı metalik element sınıfında kabul edilir. Kristalize bor görünüm ve optik özellikleri açısından elmasa benzer ve neredeyse elmas kadar serttir. Kristal bor, önemli ölçüde hafiftir, serttir, çizilmeye karşı mukavemetlidir ve ısıya karşı kararlıdır. Bor kırmızı ötesi ışığın bazı dalga boylarına karşı saydamdır ve oda sıcaklığında zayıf elektrik iletkenliğine sahiptir. Yüksek sıcaklıkta iyi bir iletkenidir.

Bor' u saf olarak elde etmek zordur. % 95-98 safsızlıkta bor, borik asidin magnezyum ile indirgenmesinden amorf halde elde edilir ve safsızlığı baz ve asit ile yıkanarak filtre edilir. Elde edilen bor, oksit ve bor bulunduran bileşikleri ihtiva eder ve küçük kristaller halinde koyu kahve renklidir. Bor, tungsten yüzeyinde bor oksidin hidrolizi ile elde edilir.

Bor telleri, plastik ve metallerle kullanılır. Bunların mukavemetini artırır. Nötron detektörü olarak kullanıldığı gibi roket yapımında da istifade edilir. Bor ve bor bileşikleri, termoelektrik tipindeki elektrik üreticileri ve yüksek sıcaklıkta emniyetle çalışan yarı iletkenler için infrared (kırmızı ötesi) ışınlara saydam olan pencereleri yapmak için malzeme olarak kullanılır.

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

Bor; pencere camı, şişe camı v.b. sanayilerde ender hallerde kullanılmaktadır. Özel camlarda ise borik asit vazgeçilemeyen bir unsur olup, rafine sulu / susuz boraks, borik asit veya kolemanit / boraks gibi doğal haliyle kullanılmaktadır.

Bor, amonyak veya nitrojen ile yüksek sıcaklıklarda bor nitrür (BN) oluşturacak şekilde reaksiyona girer. Bu malzeme karbonla izo elektrondur ve grafit benzerdir, fakat farklı olarak bor ve azot atomları içeren kristal bir yapısı vardır. Çok yüksek sıcaklık ve basınçta BN'ün bu modifikasyonu elmas türü kafes (latis) formuna dönüşür ve elmas kadar serttir.

2.6. Castep

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

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 yarı-iletkenlerin yüzey özellikleri, sıcaklığa bağlı çalışmalar, moleküller ve moleküller

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 etkileşmeleri, 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 değiş tokuş korelasyon enerjisinin, homojen elektron gazındaki her elektronun değiş tokuş enerjisine eşit olduğu varsayılarak geliştirilen bir modeldir.

Elektron yoğunluğunun yerel değerleri üzerindeki değiş-tokuş korelasyon enerjisinin işlevsel bağımlılığını ihmal etmek için yerel tanımlamaların sınırlandırılmasına GGA yaklaşımı denir. GGA açıkça elektron yoğunluğu eğrisi üzerinde değiş-tokuş korelasyonun bağımlılığıdır.

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

$$E_t[\rho] = \sum_i \left\langle \phi_i \left| \frac{-\nabla^2}{2} \right| \phi_i \right\rangle + \left\langle \rho(r_i) \left[E_{xc}[\rho(r_i)] + \frac{V_c(r_i)}{2} - V_N \right] \right\rangle + V_{NN} \quad (2.3)$$

ile hesaplanır. Enerjinin koordinata göre birinci türevi bize sisteme etki eden kuvveti verir ($F = -dE / dR$). Tüm kuvvetler sıfır olduğunda 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 yoğunluğu, optik özellikleri, fonon dispersiyonu, fonon durum yoğunluğu vb. sonuçlar elde edilebilir.

3. HESAPLAMALAR

3.1. BN Nano Tüpler

Çalışmalarımızda başlangıç olarak BN nano tüpleri incelendi. BN nano tüplerle yapmış olduğumuz araştırmalarda [18] nolu referans kaynak alındı. CASTEP paket programı ile yapılan hesaplamalarda GGA yaklaşımı, PBE korelasyon metodu ve k-nokta sayısı [18] nolu referansa uygun olarak alındı.

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

Çizelge 3.1. Hesaplamalarda kullanılan parametrelerin gösterimi

Kesilim enerjisi	280 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	18
Maksimum kuvvet	0,05 eV/A ⁰
Maksimum Basınç	0,1 GPa
SCF Tolerans	Coarse
Temel set düzeltmesi	Smart
Düzeltilme modu	Otomatik
Nümerik diferansiyel noktası	3
Sözde potansiyel	Ultrasoft

Daha sonra test aşaması sonucunda optimize edilen nano tüpler içerisine geçiş elementlerinden olan nikel atomları konuldu ve bu çalışmalarda birim hücre değişmez kabul edildiğinde ve serbest bırakıldığında arada ne gibi farklılıklar olduğu incelendi.

3.1.1. BN (n,0), n = 3 - 8 nano tüpler

Bu çalışmalara ilk olarak Çizelge 3.1' de verilen parametreler kullanılarak ve birim hücre serbest bırakılarak başlandı. Fakat program, birim hücre sürekli olarak genişlediğinden ve nanotüp bozulmaya başladığından dolayı sonlanmadı.

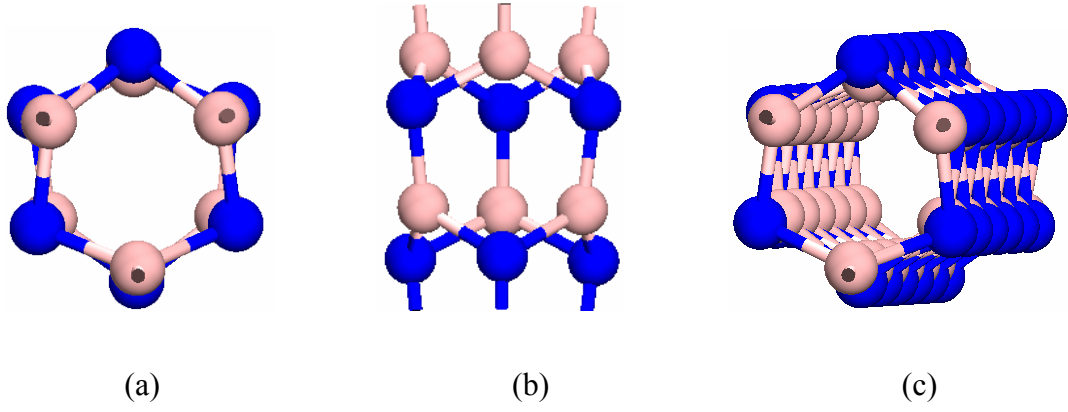
Daha sonra bu yukarıdaki parametreler aynı alınıp, birim hücre serbest bırakılarak ve 2,6 GPa dış basınç uygulanarak program tekrar çalıştırıldı. Hesaplama sonucunda ise [18] nolu referansa uygun değerler elde edildi.

Sonraki aşamada ise dış basınç uygulanmadan ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapıldı. Bu çalışma sonucunda da yine [18] nolu referansa uygun değerler elde edildi.

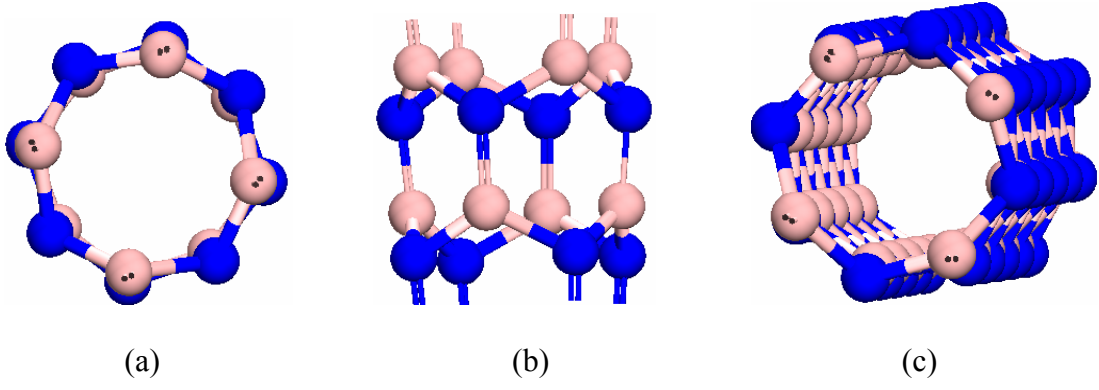
Dış basınç uygulanıp birim hücre serbest bırakıldığında ve basınç uygulanmadan birim hücre sabit tutularak yapılan çalışmalar sonucunda BN nano tüplerinin toplam enerjileri, B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi, B-B ve N-N atomları arasındaki uzaklıklar (D_b ve D_n (yarıçapları)), band yapıları hesaplandı.

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

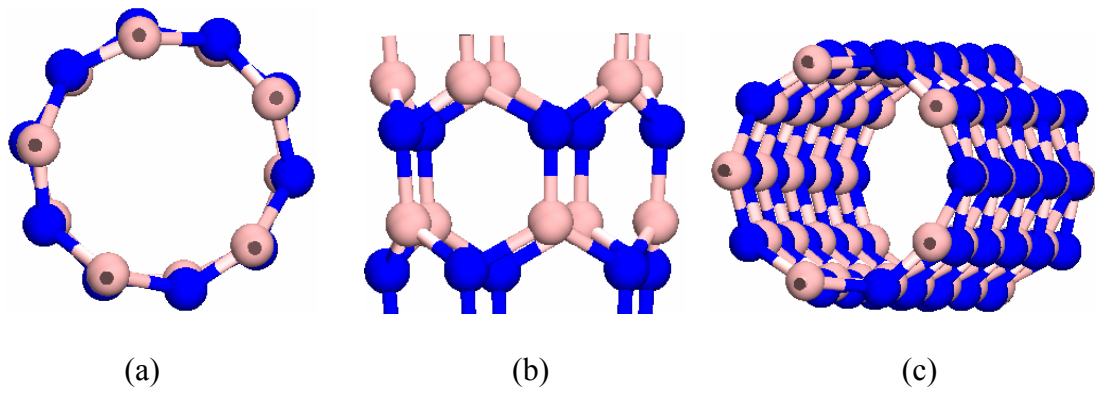
Birim hücre serbest bırakılıp, dış basınç uygulanarak (2,6 GPa) elde edilen optimize BN (3-8) nano tüplerin üstten, yandan ve süper hücre gösterimleri sırasıyla Şekil 3.1 - Şekil 3.6' da verilmiştir.



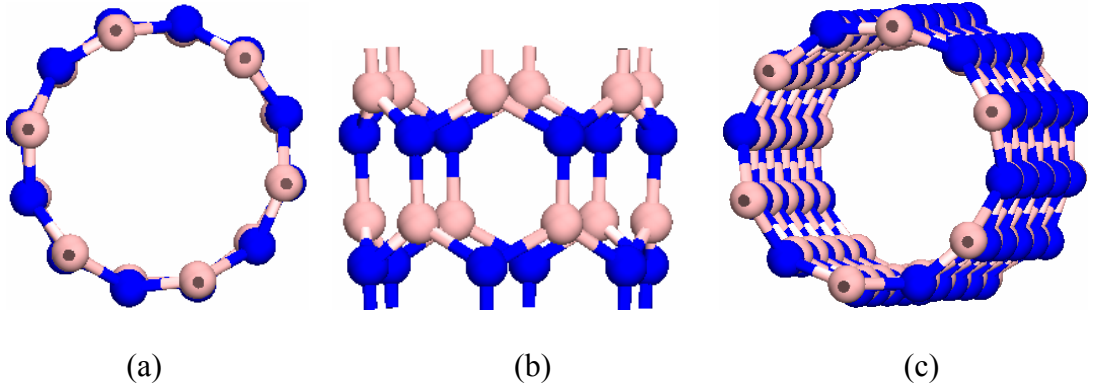
Şekil 3.1. BN (3,0) nano t p n geometri optimizasyondan sonraki (a)  stten, b) yandan ve c) s per h cre olarak) g sterimleri



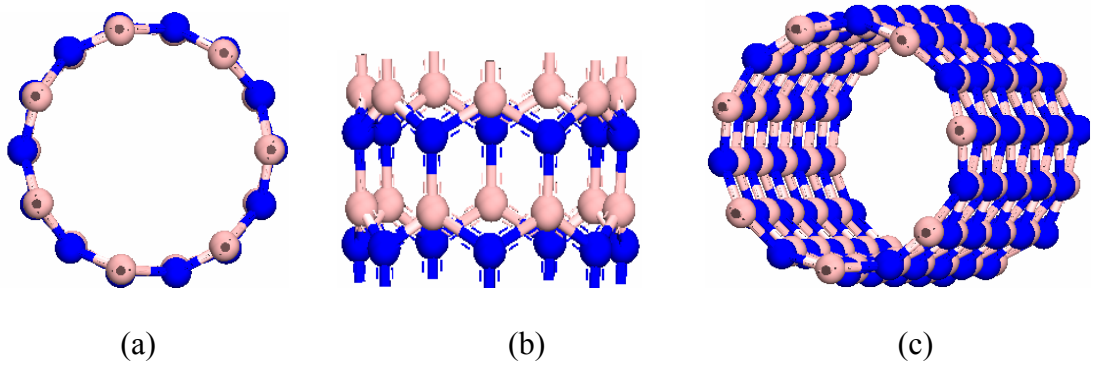
Şekil 3.2. BN (4,0) nano t p n geometri optimizasyondan sonraki (a)  stten, b) yandan ve c) s per h cre olarak) g sterimleri



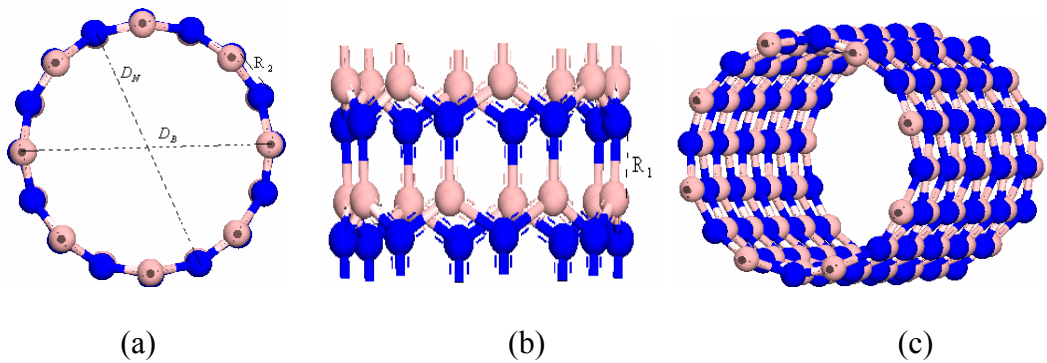
Şekil 3.3. BN (5,0) nano t p n geometri optimizasyondan sonraki (a)  stten, b) yandan ve c) s per h cre olarak) g sterimleri



Şekil 3.4. BN (6,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri



Şekil 3.5. BN (7,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri



Şekil 3.6. BN (8,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre olarak) gösterimleri

Burada birim hücre serbest bırakılıp dış basınç (2,6 GPa) uygulanarak geometri optimizasyon yapılan BN nano tüplerin birim örgü parametreleri Çizelge 3.2 ve

Çizelge 3.3' de verildi. Ayrıca toplam enerjileri, B-N atomları arasındaki bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi, B-B ve N-N atomları arasındaki uzaklıklar (D_b ve D_n (yarıçapları)), band yapıları hesaplandı ve Çizelge 3.4 ve Çizelge 3.5' de gösterildi.

Çizelge 3.2. BN nanotüplerin geometri optimizasyondan önceki birim örgü parametreleri (birim hücre serbest bırakılıp dış basınç (2,6 GPa) uygulandığı durumda)

Nano tüpler	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
(3,0)	8,29	8,29	4,21	90,0	90,0	120,0
(4,0)	9,41	9,88	4,26	90,2	90,1	118,3
(5,0)	11,01	10,97	4,22	90,0	90,0	120,0
(6,0)	8,67	8,69	4,21	90,0	90,0	120,0
(7,0)	8,67	8,69	4,21	90,0	90,0	120,0
(8,0)	9,40	9,50	4,22	90,0	90,0	120,0

Çizelge 3.3. BN nanotüplerin geometri optimizasyondan sonraki birim örgü parametreleri (birim hücre serbest bırakılıp dış basınç (2,6 GPa) uygulandığı durumda)

Nano tüpler	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α	β	γ
(3,0)	6,70	6,75	4,15	90,8	89,0	121,1
(4,0)	7,92	8,37	4,23	90,2	90,2	120,4
(5,0)	11,49	11,31	4,27	91,1	88,9	143,9
(6,0)	11,32	11,32	4,28	90,9	88,8	136,6
(7,0)	11,23	11,31	4,29	90,0	89,9	121,4
(8,0)	11,37	12,83	4,29	90,01	89,9	122,1

Çizelge 3.4. BN nano tüplerinin (2,6 dış basınç uygulandığında) toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjisi (1,23 ile çarpılmış şekli gösterilmiştir)

Nano tüp	E_n (eV)	E_b (kcal/mol)	Yasak enerji aralığı
(3,0)	-2104,586	175,7	1,25
	-2104,482 ¹	175,3 ¹	1,63 ¹
(4,0)	-2812,048	193,0	2,52
	-2812,043 ¹	192,8 ¹	2,45 ¹
(5,0)	-3518,935	201,7	2,64
	-3518,911 ¹	201,7 ¹	2,77 ¹
(6,0)	-4225,230	206,6	2,33
	-4225,250 ¹	206,6 ¹	3,48 ¹
(7,0)	-4931,260	209,6	4,20
	-4931,248 ¹	209,6 ¹	4,19 ¹
(8,0)	-5637,007	211,5	4,42
	-5637,034 ¹	211,5 ¹	4,43 ¹

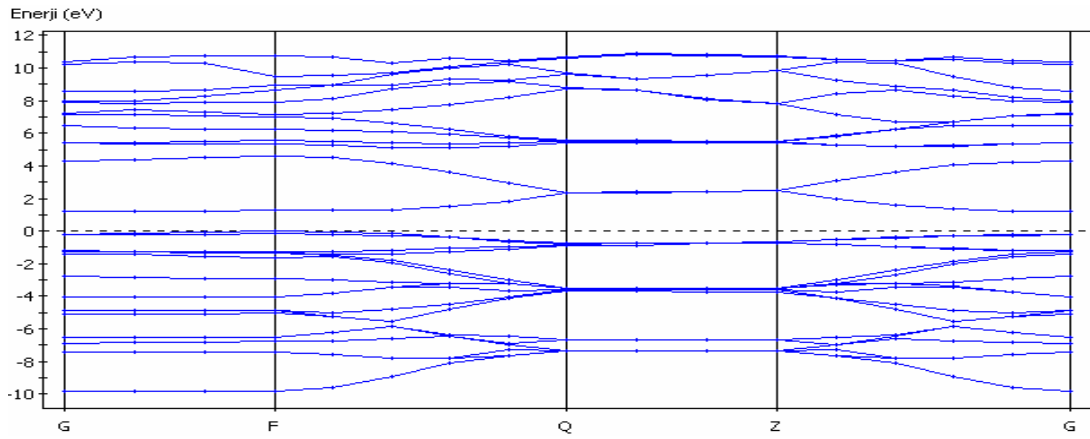
¹ kaynak [18]' de verilen değerleri göstermektedir.

Çizelge 3.5. Hesaplanan BN nano tüplerinin bağ uzunlukları (B-N atomları arasındaki uzunluklar), D_B (B-B arası) ve D_N (N-N arası) uzunluklarının gösterimi

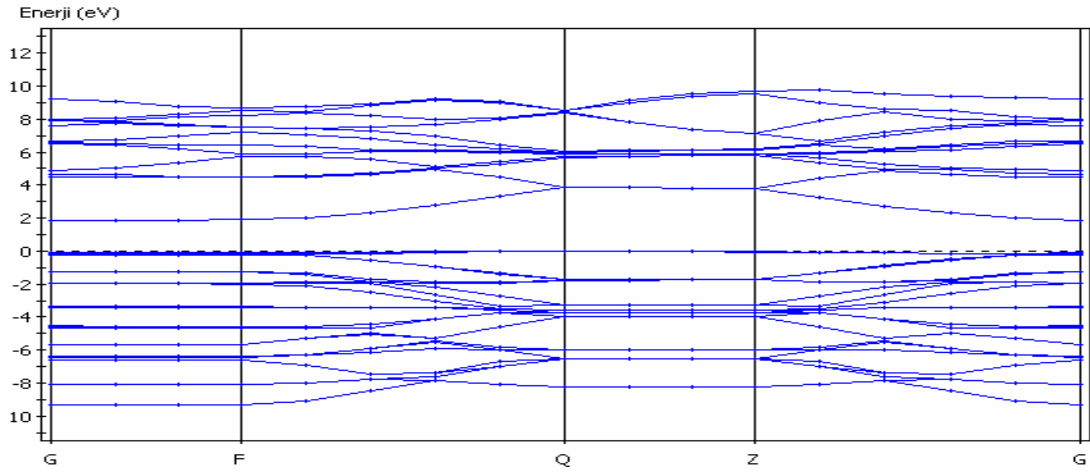
Nano tüpler	R_1	R_2	D_B	D_N
(3,0)	1,51	1,42	2,16	2,48
(4,0)	1,48	1,42	3,24	3,54
(5,0)	1,46	1,43	3,81	4,02
(6,0)	1,45	1,43	4,80	4,94
(7,0)	1,45	1,43	5,44	5,59
(8,0)	1,45	1,43	6,34	6,50

Çizelge 3.5’ de elde edilen sonuçlar [18] nolu referansta verilen değerlere uygundur.

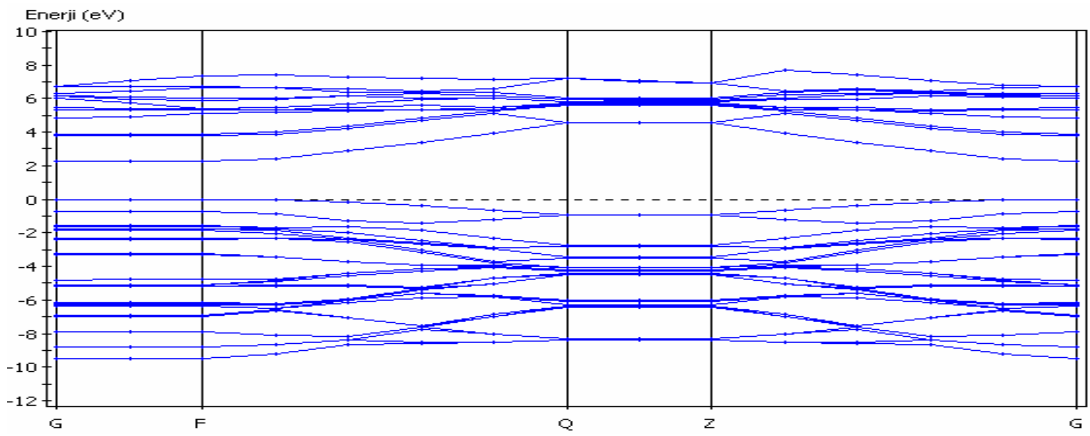
Dış basınç uygulanarak hesaplanan BN nano tüplerin band yapıları ve durum yoğunlukları sırasıyla Şekil 3.7 - Şekil 3.18’ de verildi.



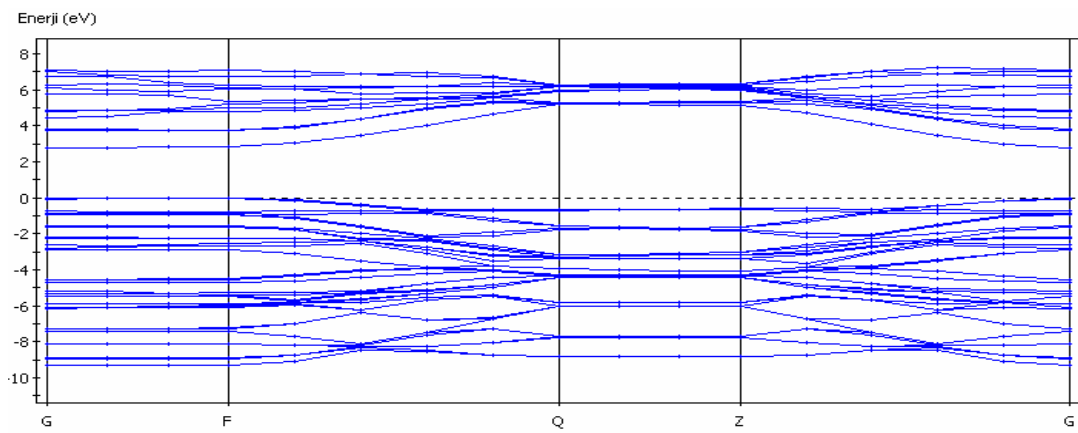
Şekil 3.7. BN (3,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



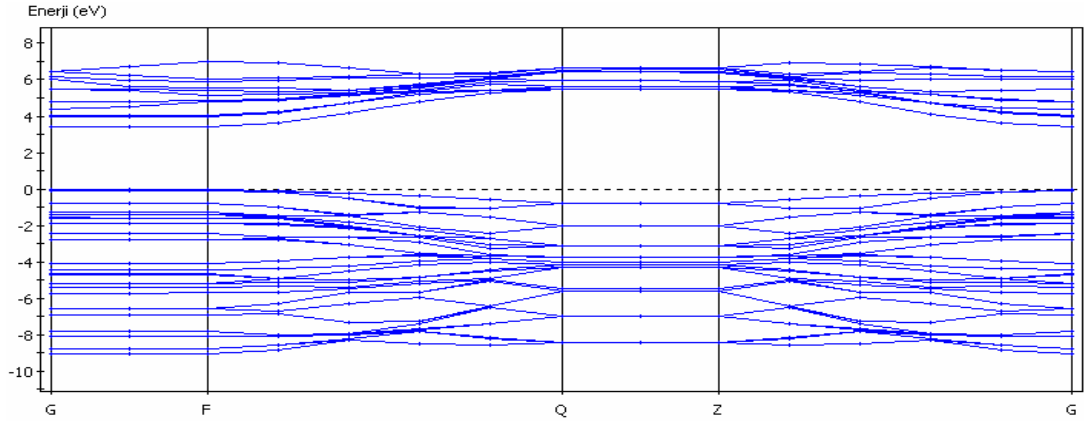
Şekil 3.8. BN (4,0) nano tütün band yapısının gösterimi



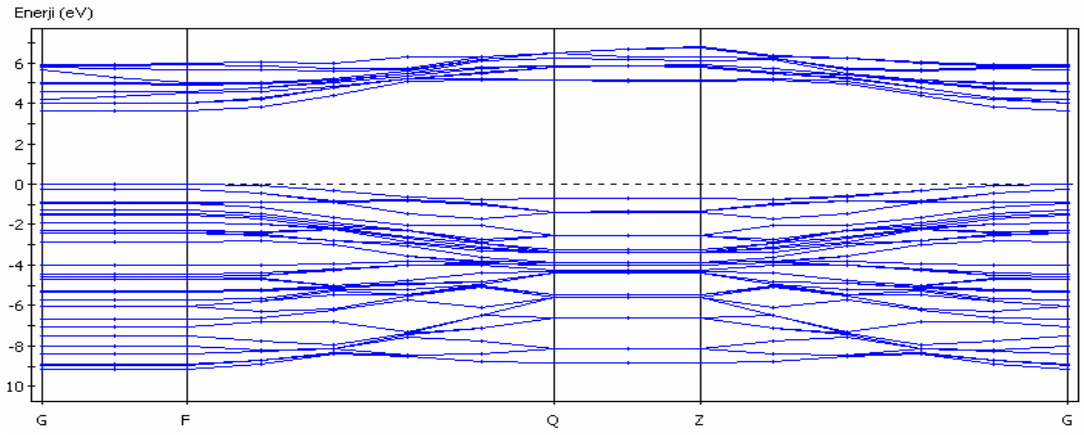
Şekil 3.9. BN (5,0) nano tütün band yapısının gösterimi



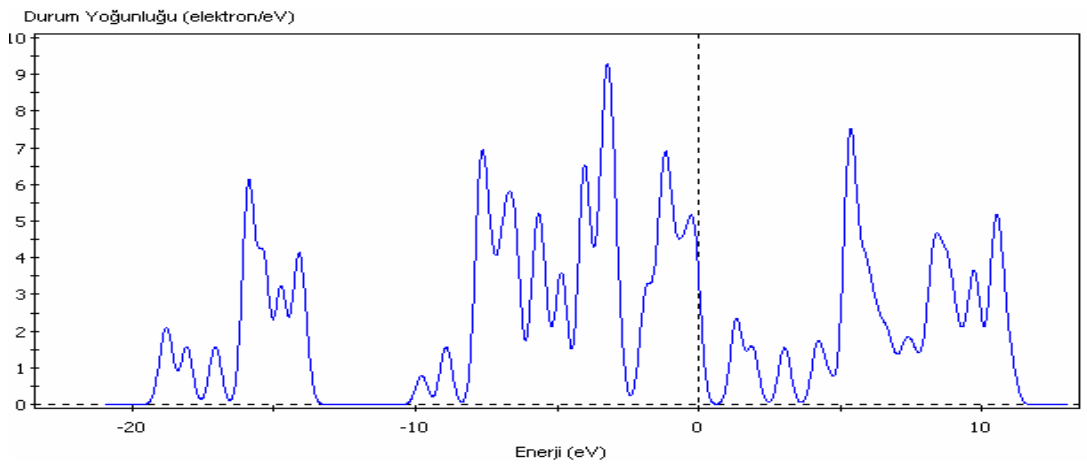
Şekil 3.10. BN (6,0) nano tütün band yapısının gösterimi



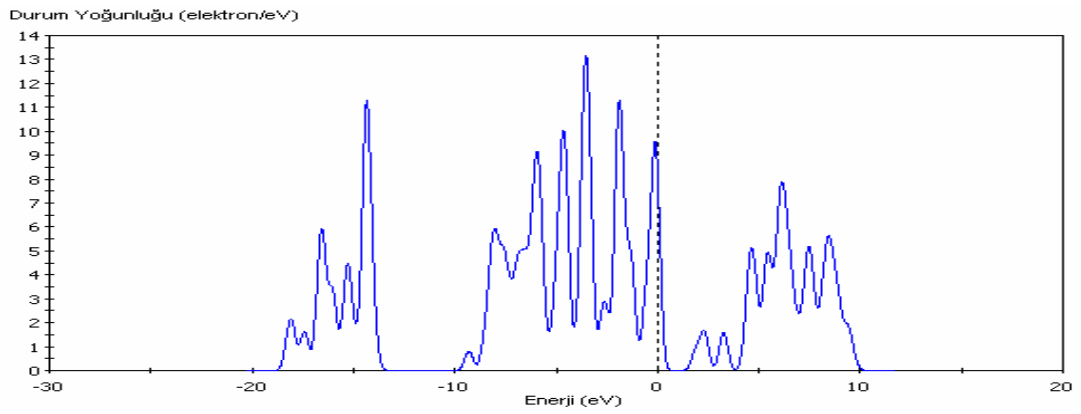
Şekil 3.11. BN (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



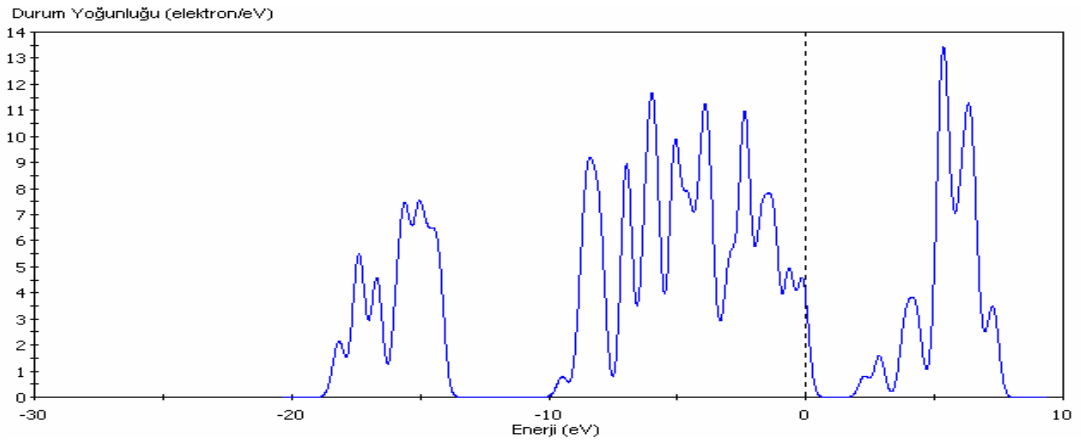
Şekil 3.12. BN (8,0) nano tüpün band yapısının gösterimi



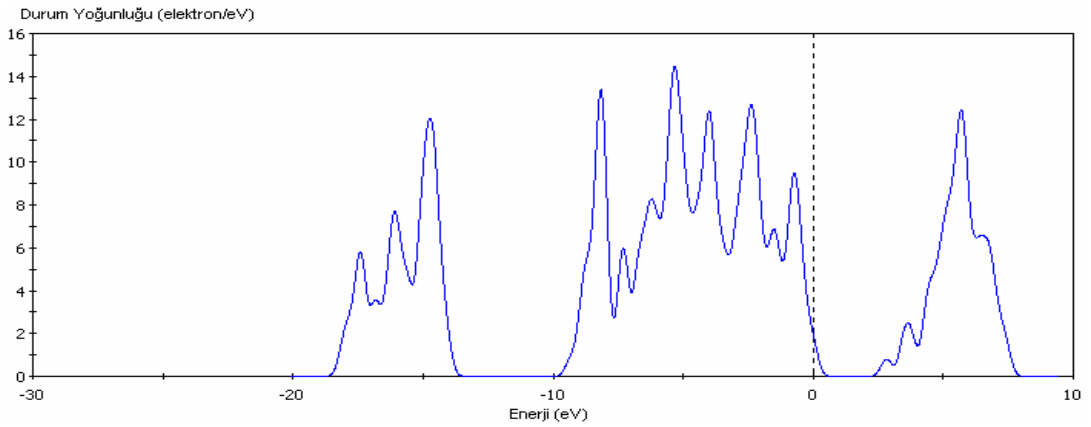
Şekil 3.13. BN (3,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



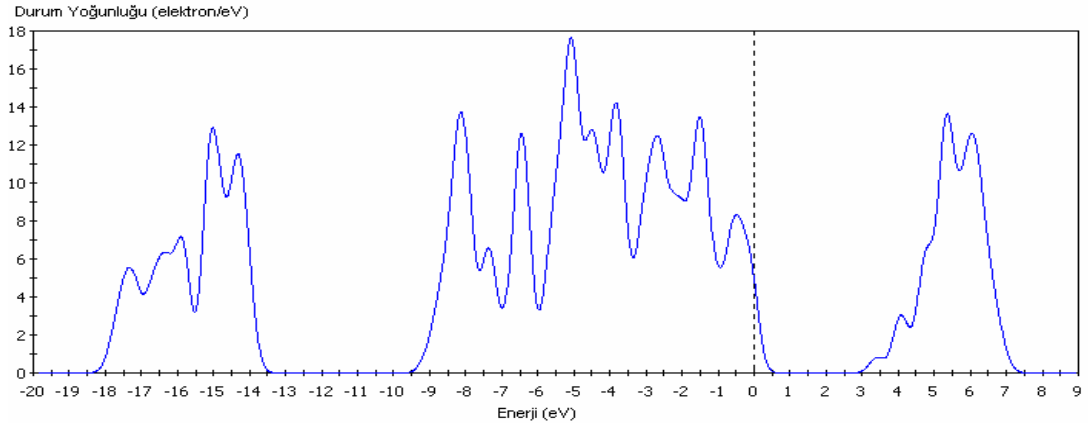
Şekil 3.14. BN (4,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



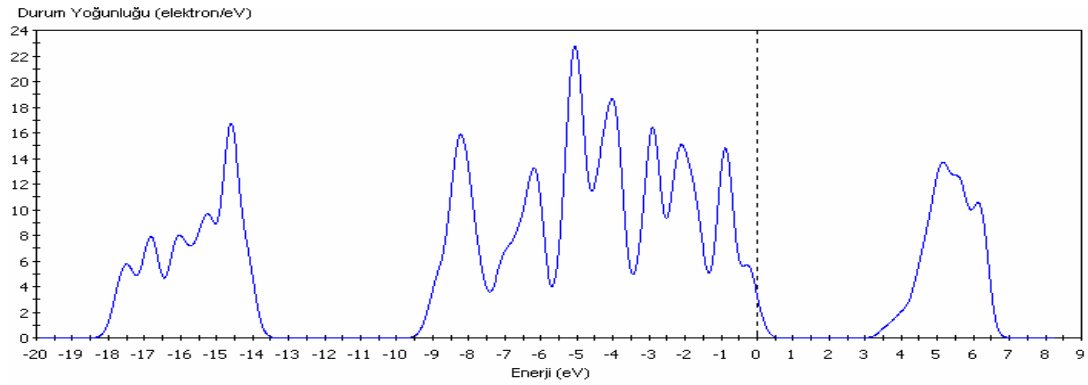
Şekil 3.15. BN (5,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.16. BN (6,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.17. BN (7,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi



Şekil 3.18. BN (8,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi

Band yapıları incelendiğinde tüm BN nano tüplerin yarıiletken olduğunu söyleyebiliriz. Hepsi belirli bir yasak enerji aralığına sahiptir. BN nano tüpler üzerine basınç (2,6 GPa) uygulandığında (birim hücre serbest tutularak) ya da dış basınç uygulanmadan birim hücre sabit tutularak çalıştırıldığında; toplam enerjisinde, bağ uzunluklarında, B-B ve N-N atomları arasındaki uzaklıklarda önemli bir fark görülmemektedir. Basınç uygulandığında bağ uzunluklarında $\sim 0,01 - 0,02 \text{ \AA}$ kadar bir uzaklaşma oldu.

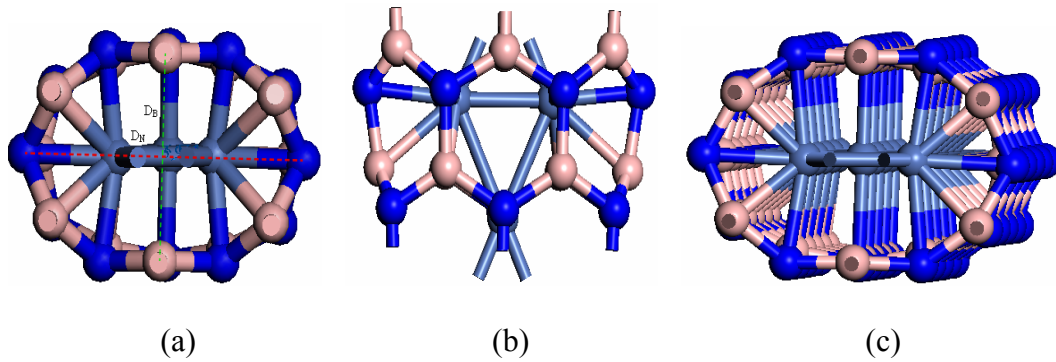
3.2. Boron Nitrit Nano Tüp İçine Ni Atomu Konularak Yapılan Çalışmalar

Farklı boyutlardaki BN nano tüp içerisine değişik sayılarda nikel atomu koyup, CASTEP paket programı ile hesaplamalar yapıldı. Çalışmaların bu aşamasında da GGA yaklaşımı, PBE korelasyon metodu ve kullanıldı. Tüm nano tüplerde kesilim enerjisi 280 eV, sözde potansiyel ultrasoft ve k-nokta sayısı 18 alındı.

Çalışmaların başlangıcında BN (6,0) nano tüp ile çalışıldı ve geometri optimizasyon yapıldıktan sonra toplam enerjisi bağ uzunlukları, yasak enerji aralığı, elektron yoğunluğu, bağlanma enerjisi hesaplandı. Daha sonra BN (6,0)' dan daha küçük ve daha büyük nano tüplerle çalışıldı ve aynı hesaplamalar yapıldı.

3.2.1. İçinde üç nikel atomu bulunan Boron Nitrit (6,0) nano tüp

İlk önce optimize ettiğimiz Şekil 3.7' deki BN nano tüpün içine üç tane nikel atomu konulup, k-nokta sayısını 18 olarak alarak, dış basınç uygulamadan birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapıldı. Şekil 3.19' da gösterilen sonuç elde edildi.



Şekil 3.19. İçine üç tane nikel atomu konulan BN nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (dış basınç uygulamadan ve birim hücre sabit iken yapılan çalışma)

Sonraki aşamada ise BN (6,0) nano tüp için yukarıdaki parametreler aynı alınarak birim hücre parametreleri sabit tutularak fakat (2,6 GPa) dış basınç uygulanarak

hesaplandı. Daha sonra aynı çalışma birim hücre serbest bırakılarak tekrarlandı. Yine bu çalışma da 2,6 GPa dış basınç uygulandı.

Hesaplamalar sonucunda toplam enerjileri, atomlar arası bağ uzunlukları, nikel atomları arasındaki açılar sırası ile Çizelge 3.6 - Çizelge 3.8' de gösterildi.

Çizelge 3.6. İçinde üç nikel bulunan BN (6,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki toplam enerjileri

Birim hücre	Enerji (eV)	Dış basınç (GPa)
Sabit	-8284,128	0
Sabit	-8284,127	2,6
Serbest	-8284,148	2,6

Çizelge 3.7. İçinde üç tane nikel atomu bulunan BN (6,0) nano tüpün geometri optimizasyonundan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi

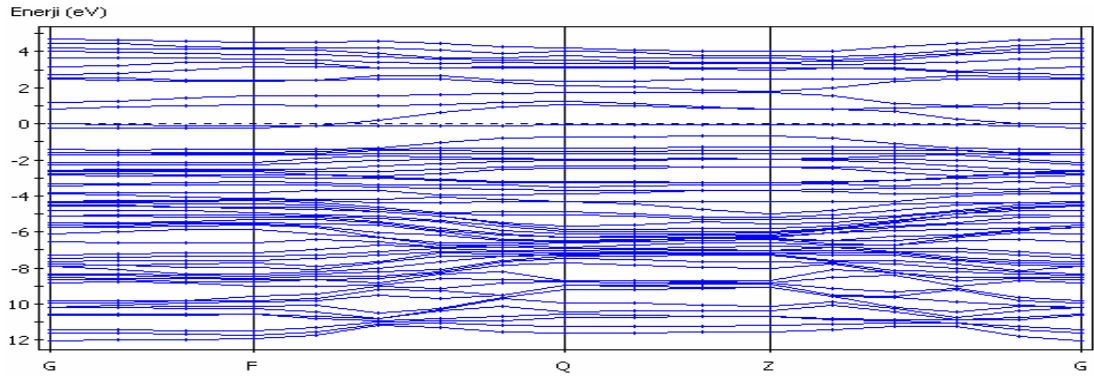
Geometri Parametreleri	Birim hücre sabit (0 GPa)	Birim hücre sabit (2,6 GPa)	Birim hücre serbest (2,6 GPa)
$N_{üst} (1) - Ni(1)$	2,03	2,03	2,02
$B_{üst} (1) - Ni(1)$	2,02	2,03	2,02
$N_{üst} (2) - Ni(1)$	1,99	1,99	1,99
$B_{üst} (2) - Ni(1)$	2,03	2,03	2,03
$N_{üst} (3) - Ni(1)$	2,01	2,01	2,02
$N_{üst} (4) - Ni(2)$	2,03	2,03	2,02
$B_{üst} (4) - Ni(2)$	2,03	2,03	2,02
$N_{üst} (5) - Ni(2)$	1,98	1,98	1,98
$B_{üst} (5) - Ni(2)$	2,01	2,03	2,03
$N_{üst} (6) - Ni(2)$	2,03	2,01	2,02
$B_{alt} (2) - Ni(2)$	2,14	2,14	2,13
$B_{alt} (5) - Ni(2)$	2,13	2,13	2,14
$N_{alt} (3) - Ni(3)$	2,03	2,03	2,03
$N_{alt} (6) - Ni(3)$	2,03	2,03	2,03
$B_{alt} (3) - Ni(1)$	2,20	2,20	-
$B_{alt} (6) - Ni(2)$	2,20	2,20	-
$Ni(1) - Ni(2)$	2,15	2,15	2,15
$Ni(1) - Ni(3)$	2,41	2,41	2,42
$Ni(2) - Ni(3)$	2,41	2,41	2,42

Çizelge 3.8. İçinde üç nikel bulunan BN (6,0) nano tüplerin geometri optimizasyondan sonraki bağ açılarının ($^{\circ}$) gösterimi

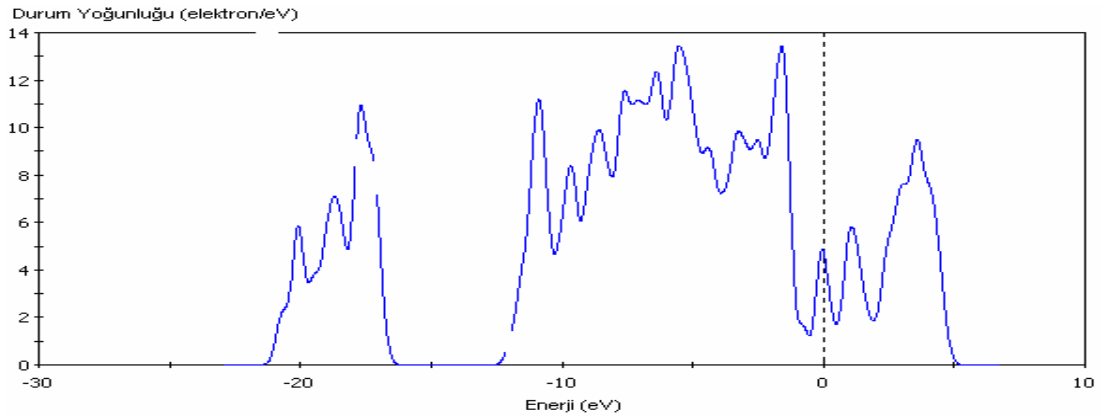
Geometri Parametreleri	Birim hücre sabit (0 GPa)	Birim hücre serbest (2,6 GPa)	Birim hücre sabit (2,6 GPa)
Ni(1)–Ni(2)-Ni(3)	63,4	63,6	63,4
Ni(3)–Ni(1)-Ni(2)	63,5	63,6	63,5
Ni(1)–Ni(3)-Ni(2)	53,1	53,6	53,1

İçine üç tane nikel atomu konularak BN (6,0) nano tüplerle yapmış olduğumuz çalışmalarda, ilk olarak basınç uygulanmadan birim hücre sabit tutularak hesaplandı. Burada B-B ve N-N atomları arasındaki uzaklıklara bakacak olursak; $D_B = 3,94 \text{ \AA}$, $D_N = 6,10 \text{ \AA}$ dur. Daha sonra tüm parametreler aynı alınarak ve (2,6 GPa) dış basınç uygulanarak program çalıştırıldı. Bu basınç altında ölçülen atomlar arasındaki uzaklıklar ise; $D_B = 3,94 \text{ \AA}$, $D_N = 6,09 \text{ \AA}$ dur. Nano tüp üzerine dış basınç uygulamadan geometri optimizasyon yapıldığında Şekil 3.19' da gösterildiği gibi oval iken, 2,6 GPa dış basınç uyguladığında D_B aynı kalırken D_N uzaklığında değişim görüldü. Basınç uygulandığında şekil diğerine göre daha az bozulma gösterdi ve ilk haline geri dönmeye başladı.

Şekil 3.20 ve Şekil 3.21' de içine üç tane nikel atomu konulup, birim hücre sabit tutularak çalıştırılan BN (6,0) nano tüpün band yapısı ve durum yoğunluğu gösterilmektedir.



Şekil 3.20. İçinde üç nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (6,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (2,6 GPa dış basınç altında)



Şekil 3.21. İçinde üç nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (6,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (2,6 GPa dış basınç altında)

Bu çalışmada birim hücre sabit tutularak ve 2,6 GPa basınç altında hesaplandı. Hesaplamalar sonucunda band yapıları incelediğinde nano tüplerin iletken olduğu söylenebilir.

Sonraki çalışmada ise birim hücre sabit tutularak diğer optimizasyon parametreleri aynı alınarak optimizasyon yapıldı ve nano tüpün enerjisi, bağ uzunlukları, bağlanma enerjisi hesaplandı. 2,6 GPa dış basınç altında birim hücre serbest bırakılarak ve sabit tutularak hesaplanan BN (6,0) nano tüplerin toplam enerji değerleri arasındaki fark 0,021 eV' dur. Çalışmalar arasındaki farklılıklar Çizelge 3.6 - Çizelge 3.8' de verilmiştir. Sonuç olarak hücre sabit tutularak ve dış basınç uygulanarak yapılan geometri optimizasyon çalışmalarında program beklendiği gibi sonuca daha kısa

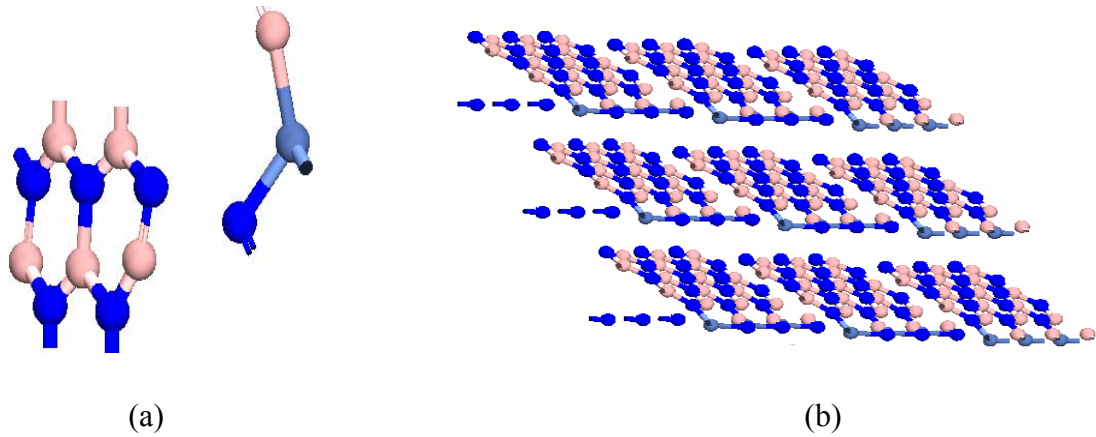
sürede ulaştığı için ve yukarıda çizelgelerde verildiği gibi aralarındaki farkların çok fazla olamamasından dolayı tercih edilmiştir.

3.2.2. İçinde tek nikel atomu bulunan Boron Nitrit (3,0) nano tüp

BN (3,0) nano tüp içerisine tek nikel atomu yerleştirilip, hücre serbest bırakılarak, sabit tutularak ve basınç uygulanarak geometri optimizasyon yapıldı.

İlk çalışmada hücre serbest bırakılıp geometri optimizasyon yapıldığında program çok uzun çalışmasına rağmen sonuç vermedi.

Sonraki çalışmada ise önce birim hücre sabit tutularak, dış basınç uygulamadan geometri optimizasyon yapıldı. Elde edilen sonuç Şekil 3.22' de gösterildi.



Şekil 3.22. İçinde tek nikel atomu bulunan BN (3,0) nano tüpün optimize olduktan sonraki a) yandan ve b) süper hücre gösterimi

Son olarak tüm parametreler aynı alınarak, birim hücre sabit tutulup, (2,6 GPa) dış basınç uygulanarak geometri optimizasyon yapıldı.

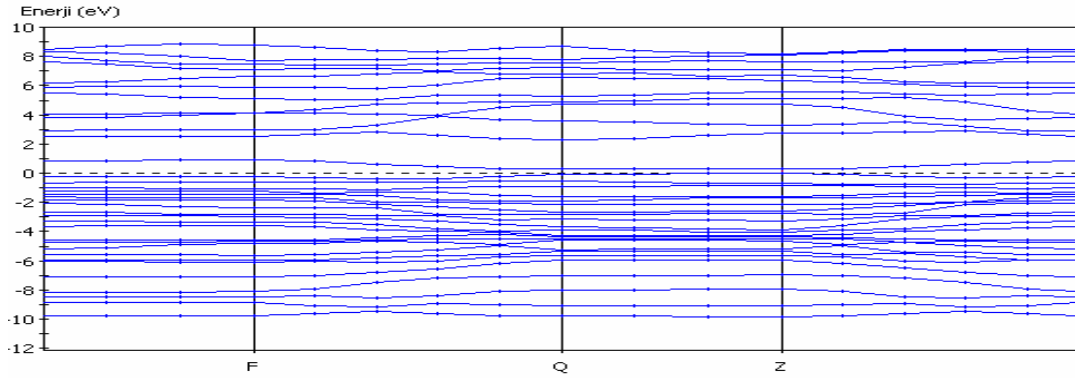
Sonuçları karşılaştırılacak olursak, elde edilen atomlar arası uzaklıklar Çizelge 3.9' da gösterilmektedir.

Çizelge 3.9. İçinde tek nikel atomu bulunan BN (3,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki atomlar arası uzaklıkları

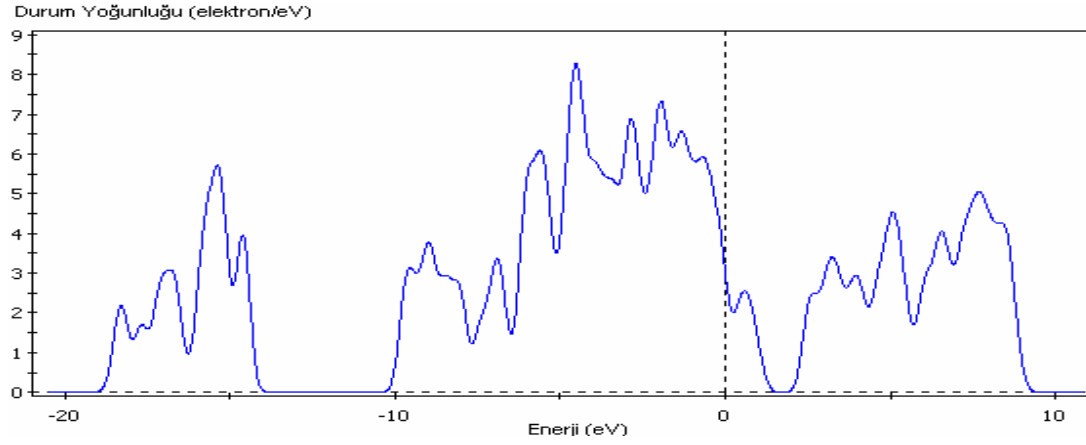
Geometri Parametre	Dış Basınç (0 GPa)	Dış Basınç (2,6 GPa)
Ni - B(1) _{üst}	1,88	1,90
Ni - N(1) _{üst}	5,52	5,60
Ni - B(2) _{üst}	4,51	4,78
Ni - N(2) _{üst}	3,94	4,24
Ni - B(3) _{üst}	3,40	3,81
Ni - N(3) _{üst}	3,60	3,99
Ni - N(1) _{alt}	1,79	1,85
Ni - B(1) _{alt}	5,97	6,06
Ni - N(2) _{alt}	5,53	5,68
Ni - B(2) _{alt}	4,58	4,76
Ni - N(3) _{alt}	4,68	4,84
Ni - B(3) _{alt}	4,04	4,34

Bu iki çalışmada da nano tüplerde atomlar arasındaki uzaklıklar az olduğundan dolayı (B-B ve N-N atomları arasındaki uzunluklara Çizelge 3.5' e bakacak olursak) nano tüp içine nikel atomunu konulduğunda nano tüp açıldı. Çünkü nikel atomu bor ve azotla yapmış olduğu bağlarda en yakın $1,9 \text{ \AA}$ ile bağlanma yaptı. Burada birim hücre serbest tutularak geometri optimizasyon yaptığımızda programdan sonuç alınamadı. Serbest olarak bıraktığımızda çok adım attığı ve çok zaman aldığı halde optimize olmadı. Sabit olarak veya basınç uygulayarak çalıştırdığımızda ise Şekil 3.22' de gösterildiği gibi nano tüp bozuldu ve düzlem şeklini aldı.

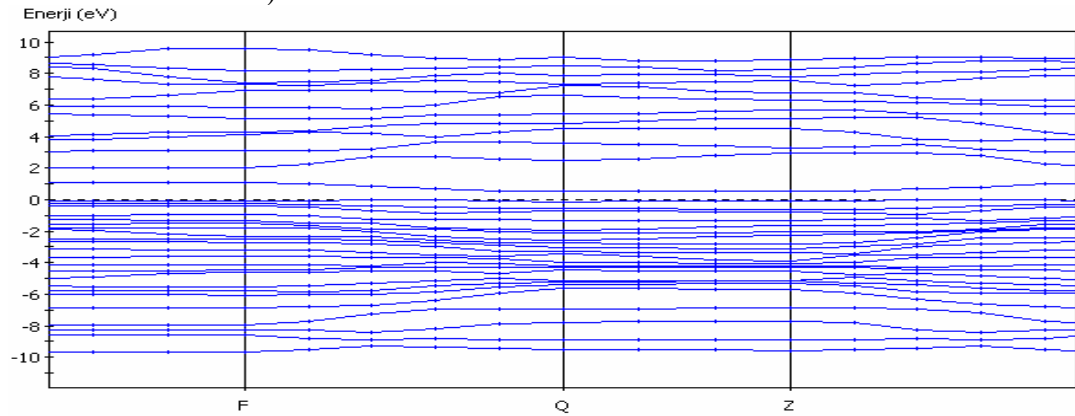
BN (3,0) nano tüp (basınçlı ve basınç uygulanmadan) geometri optimizasyon yapıldıktan sonra, band yapısı ve durum yoğunluğu hesaplandı. Sonuçlar Şekil 3.23 – Şekil 3.26' da gösterildi.



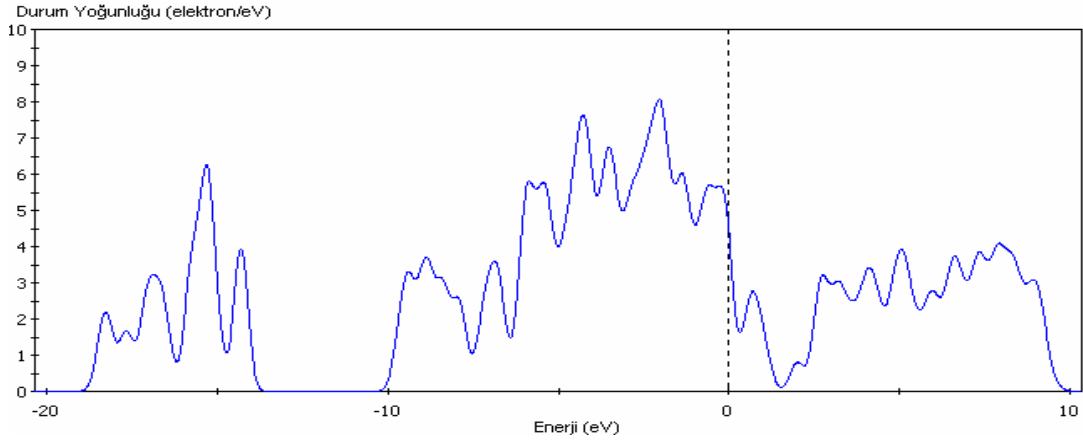
Şekil 3.23. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tütün band yapısının gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)



Şekil 3.24. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tütün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)



Şekil 3.25. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tütün band yapısının gösterimi (Dış basınç = 2,6 GPa)

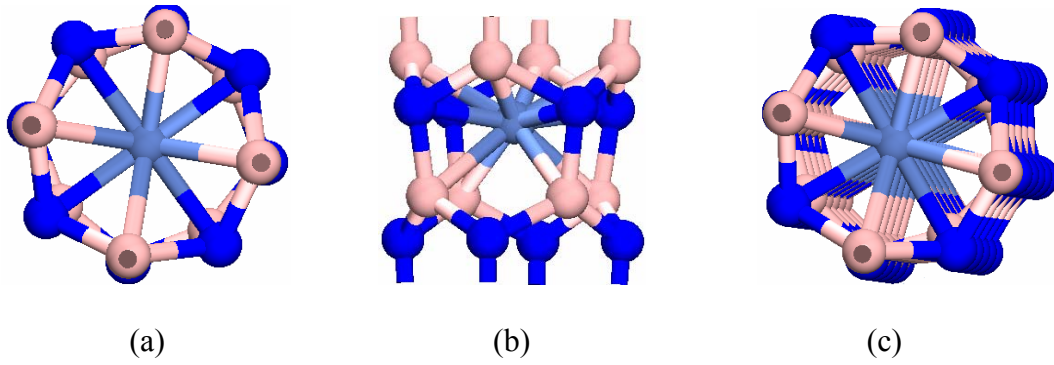


Şekil 3.26. İçinde tek nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (3,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç = 2,6 GPa)

Bu sonuçlara göre dış basınç uygulamadan hesaplanan BN (3,0) nano tüpün yasak enerji aralığı 0,54 eV' dur. Dış basınç (2,6 GPa) uyguladıktan sonraki band yapısı hesaplandığında ise yasak enerji aralığının 0,27 eV görüldü. Dış basınç uygulandığında yasak enerji aralığı azalmaktadır. Sonuç olarak iki çalışmada da yasak enerji aralığına sahip olduğundan dolayı bu yapının yarı iletken olduğunu söyleyebiliriz.

3.2.3. İçinde tek nikel atomu bulunan Boron Nitrit (4,0) nano tüp

İlk olarak BN (4,0) nano tüp içerisine tek nikel atomu yerleştirerek, dış basınç uygulanmadan birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapıldı. Optimizasyon sonucunda Şekil 3.27' de gösterilen sonuçlar elde edildi.



Şekil 3.27. BN (4,0) nano tütün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (Dış basınç uygulanmadığı durumda)

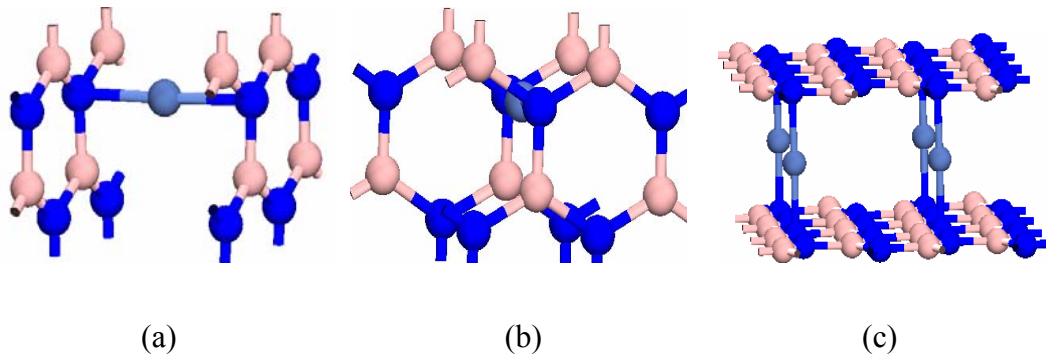
Bu hesaplamalar sonucunda elde edilen bağ uzunlukları Çizelge 3.10' da verildi.

Çizelge 3.10. İçinde tek nikel atomu konulan BN (4,0) nano tütün geometri optimizasyon sonucundaki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (Birim hücre sabit tutulduğunda)

Geometri Parametre	Dış Basınç (0 GPa)
$N_{üst}$ (1)- Ni	1,92
$B_{üst}$ (1)- Ni	2,00
$N_{üst}$ (2)- Ni	1,92
$B_{üst}$ (2)- Ni	2,00
$N_{üst}$ (3)- Ni	1,92
$B_{üst}$ (3)- Ni	2,00
$N_{üst}$ (4)- Ni	1,92
$B_{üst}$ (4)- Ni	2,00
B_{alt} (1)- Ni	2,05
B_{alt} (2)- Ni	2,05
B_{alt} (3)- Ni	2,05
B_{alt} (4)- Ni	2,05

Daha sonra 2,6 GPa dış basınç uygulanarak hesaplama yapıldı. Sonuçta basınç uygulanmadan yapılan çalışma ile hemen hemen aynı sonuçları (bazı değerlerde $0,01\text{\AA}$ kadar değişiklik görülmektedir) vermektedir.

Sonraki aşamada ise; yukarıda yapılan çalışmadaki verileri aynı alınıp, sadece dış basınç değiştirilerek (4 GPa) geometri optimizasyon yapıldı. Sonuçta Şekil 3.28' de gösterildiği gibi düzlem şeklinde bir sonuç elde edildi.



Şekil 3.28. BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki ((a) önden (b) yandan ve (c) süper hücre) gösterimleri (4 GPa dış basınç uygulandığı durumda)

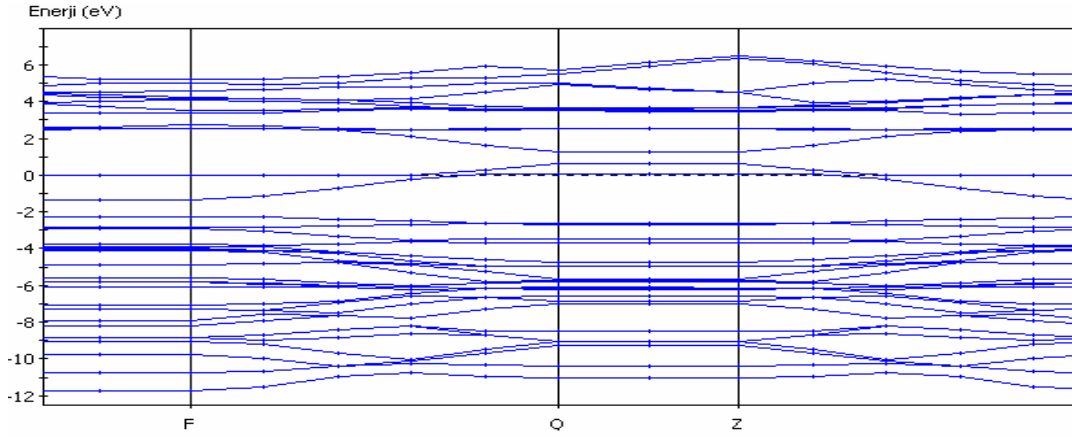
Sonuç olarak; BN (4,0) nano tüp içine tek nikel atomu konularak dış basınç uygulanmadan ve 2,6 GPa dış basınç uygulanarak geometri optimizasyon yapıldı ve sonuçlar arasında fazla bir farklılık görülmedi. Optimizasyondan sonra nano tüp bozulmadı. Fakat bu nano tüp süper hücre haline getirildiğinde nano tüp duvarları içinde nano tel oluşmadı. Bunun nedeni ise süper hücrede nikel atomlarının birbirine çok uzak olmalarıdır. Nikelin diğer nikel atomları ile yapmış olduğu bağ uzunluğu en fazla $2,42\text{\AA}$ olduğu BN (6,0) nano tüple yapılan diğer çalışmalarda verildi. Ancak bu çalışmada süper hücrede Ni-Ni arası uzaklıklar $4,31\text{\AA}$ olarak ölçüldü. Bu nedenle BN (4,0) nano tüp içine tek nikel atomu konulduğunda nano tel oluşmadı.

Çizelge 3.11. İçinde tek nikel atomu konulan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon sonucundaki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (4 GPa dış basınç uygulandığı durumda)

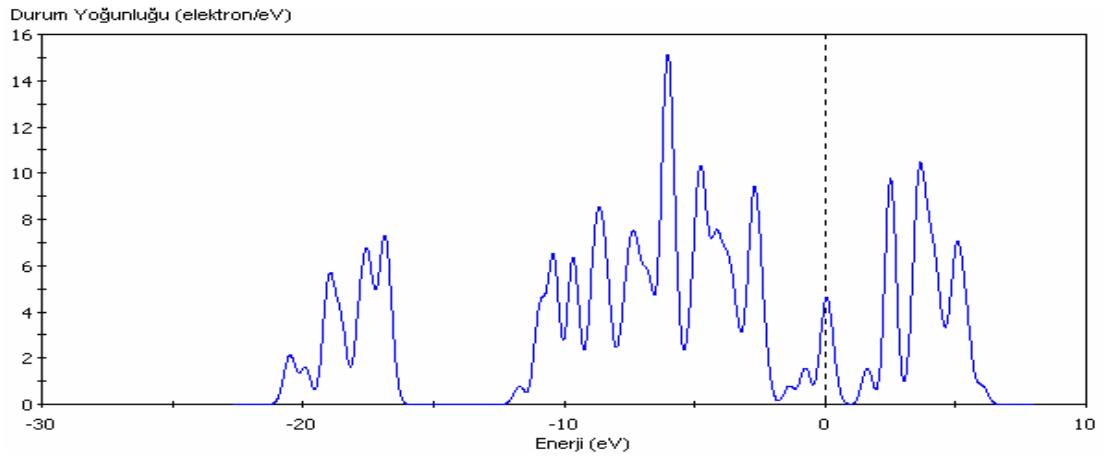
Geometri Parametre	PBE Modeli (A^0)
$N_{üst}$ (1)- Ni	3,18
$B_{üst}$ (1)- Ni	2,40
$N_{üst}$ (2)- Ni	1,91
$B_{üst}$ (2)- Ni	2,33
$N_{üst}$ (3)- Ni	1,91
$B_{üst}$ (3)- Ni	2,30
$N_{üst}$ (4)- Ni	3,24
$B_{üst}$ (4)- Ni	2,45
B_{alt} (1)- Ni	3,50
N_{alt} (1)- Ni	3,17
B_{alt} (2)- Ni	2,36
N_{alt} (2)- Ni	3,12
B_{alt} (3)- Ni	2,34
N_{alt} (3)- Ni	3,06
B_{alt} (4)- Ni	3,54
N_{alt} (4)- Ni	3,17

Daha sonra dış basınç artırılarak (4 GPa) geometri optimizasyon yapılan çalışmada ise; düzlem şeklinde (Şekil 3.28) bir yapı oluşturdu. Nano tüp üzerindeki basınç arttığından dolayı atomlar arasındaki uzaklıklar artmıştır. Örgü parametreleri azalmıştır. Örgü parametreleri Çizelge 3.14' de ve toplam enerjileri ise Çizelge 3.15' de verildi.

Şekil 3.29 ve Şekil 3.30' da, 2,6 dış basınç uygulanarak hesaplanan içinde tek nikel bulunan BN (4,0) nano tüpün band yapısı ve durum yoğunluğu verildi.



Şekil 3.29. İçinde tek nikel atomu bulunan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (2,6 GPa dış basınç uygulandığı durumda)

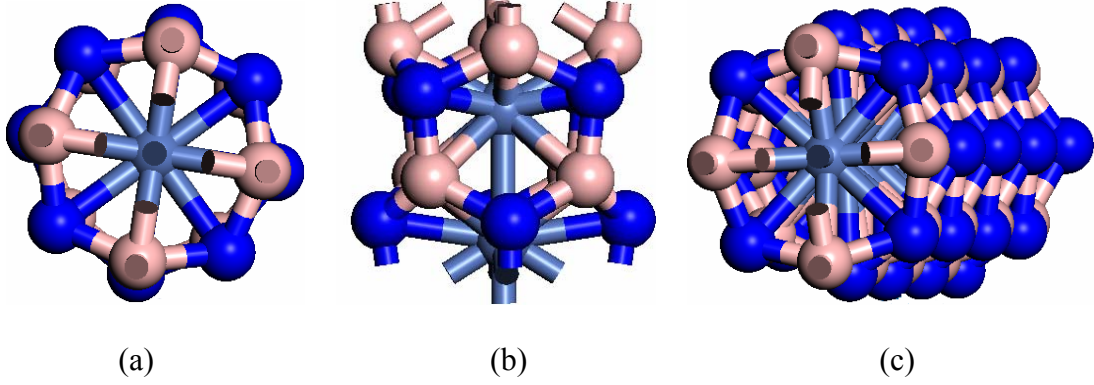


Şekil 3.30. İçinde tek nikel atomu bulunan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (2,6 GPa dış basınç uygulandığı durumda)

Yasak enerji aralığı 1,58 eV olarak hesaplandı. Bu sonuç yukarıda 2,6 GPa basınç ile hesaplanan çalışma ile karşılaştırıldığında yasak enerji aralığının olmadığı görüldü. Bu yapı iletken özelliği göstermektedir. 4 GPa uygulanarak çalışılan programda ise yasak enerji aralığı 0,83 eV ölçüldü.

3.2.4. İçinde iki tane nikel atomu bulunan Boron Nitrit (4,0) nano tüp

BN (4,0) nano tüp içerisine iki tane nikel konulup hücre sabit tutularak dış basınç uygulanmadan optimize edildi ve Şekil 3.31' de gösterilen sonuçlar elde edildi.



Şekil 3.31. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tütün geometri optimizasyon yapılmış (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi

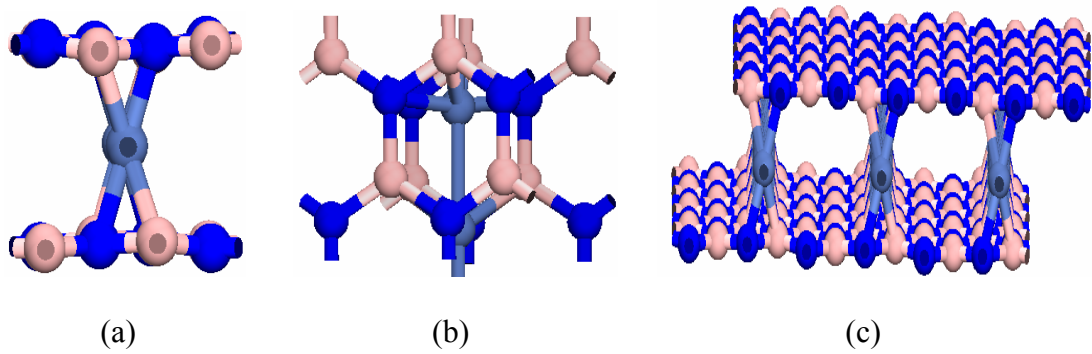
Şekil 3.31' de verilen yapının atomları arası bağ uzunlukları Çizelge 3.12' de verildi.

Çizelge 3.12. İçinde iki tane nikel atomu konulan ve sabit tutulan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi

Geometri Parametre	Dış Basınç (0 GPa)
$B_{üst}$ (1)- Ni (1)	2,04
$N_{üst}$ (1)- Ni (1)	2,02
$B_{üst}$ (2)- Ni (1)	2,04
$N_{üst}$ (2)- Ni (1)	2,01
$B_{üst}$ (3)- Ni (1)	2,04
$N_{üst}$ (3)- Ni (1)	2,02
$B_{üst}$ (4)- Ni (1)	2,04
$N_{üst}$ (4)- Ni (1)	2,01
$B_{üst}$ (1)- Ni (1)	2,11
$B_{üst}$ (2)- Ni (1)	2,10
$B_{üst}$ (3)- Ni (1)	2,10
$B_{üst}$ (4)- Ni (1)	2,10
N_{alt} (1)- Ni (2)	2,04
B_{alt} (1)- Ni (2)	2,02
N_{alt} (2)- Ni (2)	2,04
B_{alt} (2)- Ni (2)	2,02
N_{alt} (3)- Ni (2)	2,02
B_{alt} (3)- Ni (2)	2,04
N_{alt} (4)- Ni (2)	2,02
B_{alt} (4)- Ni (2)	2,04
Ni (1)- Ni (2)	2,11

Sonra tüm parametreler aynı alınarak 2,6 GPa dış basınç altında birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapıldı. Yukarıdaki çalışma ile karşılaştırıldığında ise aralarında önemli bir farklılık görülmedi.

Daha sonra parametreler aynı fakat birim hücre serbest bırakılarak ve (2,6 GPa) basınç uygulanarak çalıştırdığımızda Şekil 3.28' deki sonuçlar elde edildi. Daha sonra basınç (4 GPa) artırılarak tekrar hesaplandı.



Şekil 3.32. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimleri (2,6 GPa uygulandığında)

İçinde farklı sayılarda nikel atomları bulunan BN (4,0) nano tüplerin bağ uzunlukları, örgü parametreleri, toplam enerjileri, Çizelge 3.13 - Çizelge 3.15' de gösterilmektedir.

Çizelge 3.13. İçinde iki tane nikel atomu konulan ve serbest olarak çalıştırılan BN (4,0) nano tüpün geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi

Geometri Parametre	Dış basınç (2,6 GPa)	Dış Basınç (4 GPa)
$B_{üst}$ (1)- Ni (1)	2,12	2,14
$N_{üst}$ (2)- Ni (1)	2,00	2,00
$N_{üst}$ (3)- Ni (1)	2,01	2,01
$B_{üst}$ (4)- Ni (1)	2,03	2,13
N_{alt} (1)- Ni (2)	2,00	2,01
B_{alt} (2)- Ni (2)	2,13	2,13
B_{alt} (3)- Ni (2)	2,14	2,14
N_{alt} (4)- Ni (2)	2,00	2,01
Ni (1)- Ni (2)	2,20	2,21

Çizelge 3.14. İçinde farklı sayılarda nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki şeklinin birim örgü parametreleri

Nikel Sayısı	a	b	c	α	β	γ	Dış Basınç	Birim Hücre
1	10,08	10,47	4,31	90,2	90,2	122,1	0	Sabit
1	10,09	10,47	4,31	90,2	90,3	122,1	2,6	Serbest
1	4,99	8,98	4,31	98,4	90,0	126,7	4	Serbest
2	7,92	8,38	4,23	90,3	90,2	120,4	0	Sabit
2	7,91	8,37	4,23	90,3	90,2	120,3	2,6	Sabit
2	5,01	8,00	4,41	91,3	89,9	111,6	2,6	Serbest
2	5,00	7,72	4,41	91,3	89,9	111,3	4	Serbest

Çizelge 3.15. İçinde farklı sayılarda nikel bulunan BN (4,0) nano tüplerin geometri optimizasyon yapıldıktan sonraki toplam enerjisi

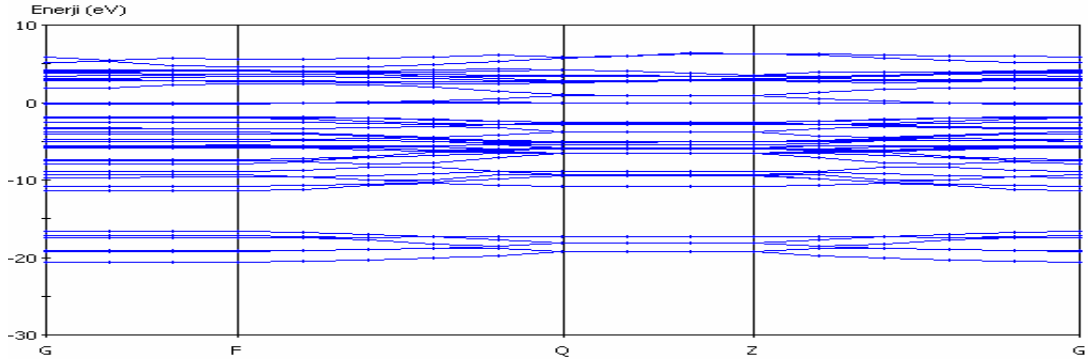
Nikel Sayısı	Enerji (eV)	Dış Basınç (GPa)	Birim hücre
1	-4162,063	0	Sabit
1	-4162,061	2,6	Serbest
1	-4174,606	4	Serbest
2	-5511,421	0	Sabit
2	-5511,421	2,6	Sabit
2	-5528,758	2,6	Serbest
2	-5528,684	4	Serbest

Bu çalışmada hücre serbest bırakılarak, sabit tutularak ve basınç değerleri değiştirilerek geometri optimizasyon yapıldı. Hücre sabit tutulduğunda Şekil 3.31' de gösterildiği gibi nano tüp bozulmadı. Sonra hücre sabit tutulup, basınç değerleri değiştirilerek program çalıştırıldı. Fakat sonuçta önemli bir değişiklik görülmedi. Süper hücre olarak seçildiğinde nano tüp içinde nano tel oluştuğu görüldü.

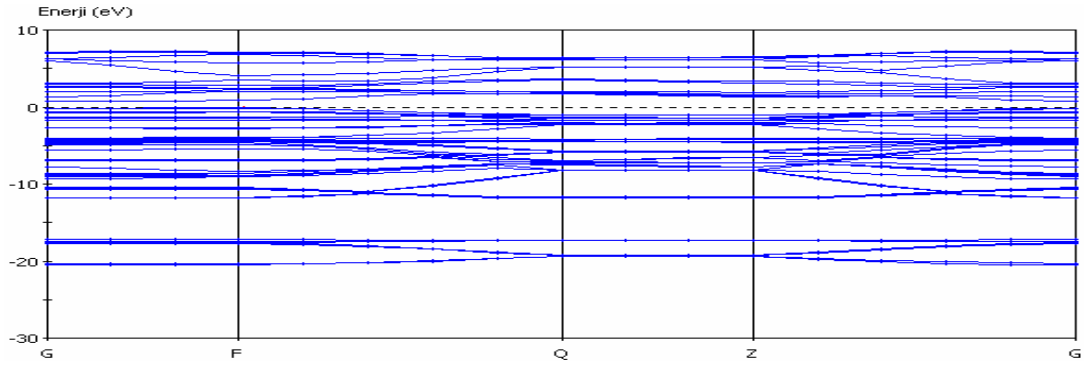
Sonraki çalışmamızda aynı parametreler alınarak ve hücre serbest bırakarak (2,6 GPa dış basınçta) optimize edildi. Geometri optimizasyondan sonra Şekil 3.32' de gösterildiği gibi düzlem şeklinde bir sonuç elde edildi.

Bu sonuçlara göre birim hücre sabit tutulduğunda Şekil 3.31' de gösterildiği gibi nano tüpün şekli fazla değişmeden optimize oldu. Çalışma serbest olarak optimize edildiğinde ise geometrisi tamamen değişti. Süper hücre olarak seçildiğinde ise yüzey şeklini aldı.

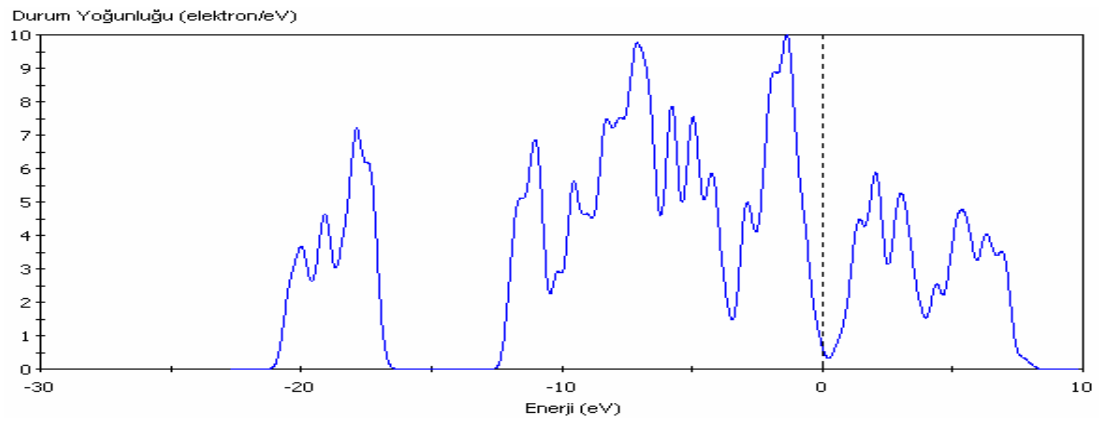
BN (4,0) nano tüplerin basınçsız ve 2,6 GPa dış basınç uygulandığı durumlarda band yapıları ve durum yoğunlukları hesaplandı ve bu sonuçlar Şekil 3.33 - Şekil 3.36' da verildi.



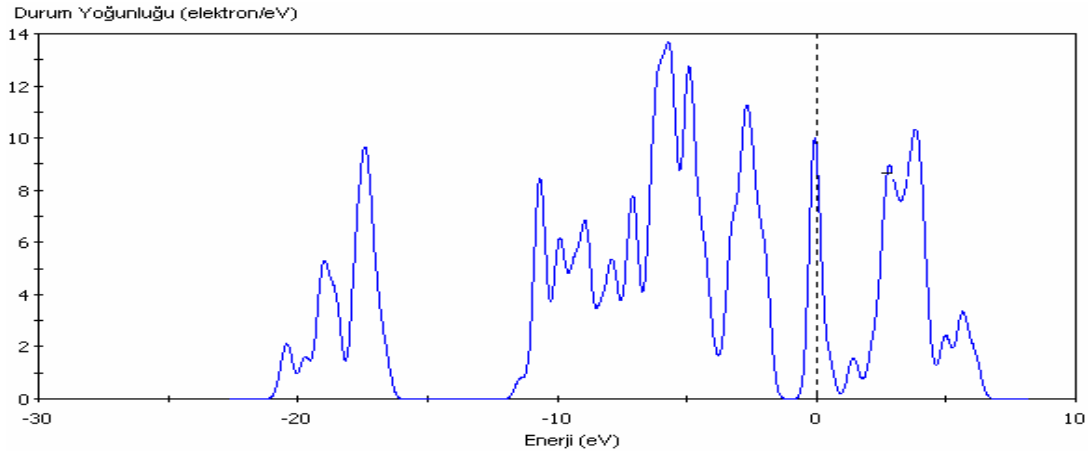
Şekil 3.33. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre sabit tutularak band yapısının hesaplanması (dış basınç uygulanmadığı durumda)



Şekil 3.34. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre serbest bırakılarak band yapısının hesaplanması (2,6 dış basınç uygulandığında)



Şekil 3.35. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tüpün birim hücre sabit tutularak durum yoğunluğunun hesaplanması (dış basınç uygulanmadığı durumda)



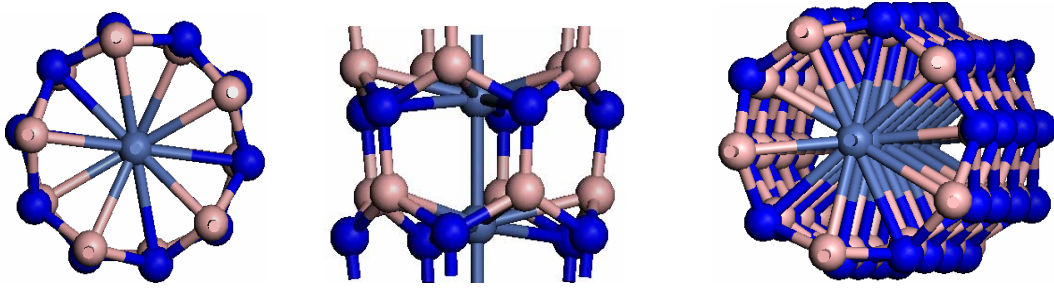
Şekil 3.36. İçinde iki nikel atomu bulunan BN (4,0) nano tütün birim hücre serbest bırakılarak durum yoğunluğunun hesaplanması (2,6 dış basınç uygulandığında)

Birim hücre sabit tutularak (dış basınç uygulanmadığı durumda) hesaplanan nano tütün yasak enerji aralığı bulunmamaktadır. Yani bu yapı iletken özelliği göstermektedir. Birim hücre serbest bırakılarak (2,6 GPa' da) yapılan çalışmada ise yasak enerji aralığı 0,84 eV' dur.

Basınç arttırılarak (2,6 GPa' dan 4 GPa) hesaplanan nano tütün yasak enerji aralığının (0,83 eV) ve örgü parametrelerinin (Çizelge 3.14) beklendiği gibi azaldığı görüldü.

3.2.5. İçinde iki tane nikel atomu bulunan Boron Nitrit (5,0) nano tüp

Bu çalışmada BN (5,0) nano tüp içine iki tane nikel atomu konulup, birim hücre sabit tutularak (dış basınç uygulanmadan) geometri optimizasyon yapıldı. Sonuçta Şekil.3.37' de gösterildiği gibi sonuçlar elde edildi.



Şekil 3.37. İçinde iki nikel atomu bulunan ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapılan BN (5,0) nano tüplerin (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi

Burada öncelikle birim hücre sabit tutularak çalışmaya yapıldı. Çizelge 3.16' de gösterildiği gibi atomlar arası uzunluklar hesaplandı.

Çizelge 3.16. İçinde iki tane nikel atomu bulunan BN (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki bağ uzunluklarının (A°) gösterimi (birim hücre sabit)

Geometri Parametre	Dış Basınç (0GPa)
Ni(1)-B(1) _{üst}	2,10
Ni(1)-N(1) _{üst}	2,20
Ni(1)-B(2) _{üst}	2,12
Ni(1)-B(3) _{üst}	2,13
Ni(1)-N(3) _{üst}	2,20
Ni(1)-B(4) _{üst}	2,10
Ni(1)-N(4) _{üst}	2,23
Ni(1)-B(5) _{üst}	2,16
Ni(2)-N(1) _{alt}	2,22
Ni(2)-B(1) _{alt}	2,10
Ni(2)-N(2) _{alt}	2,22
Ni(2)-B(2) _{alt}	2,16
Ni(2)-B(3) _{alt}	2,10
Ni(2)-N(4) _{alt}	2,20
Ni(2)-B(4) _{alt}	2,11
Ni(2)-B(5) _{alt}	2,13
Ni(1)-Ni(2)	2,13

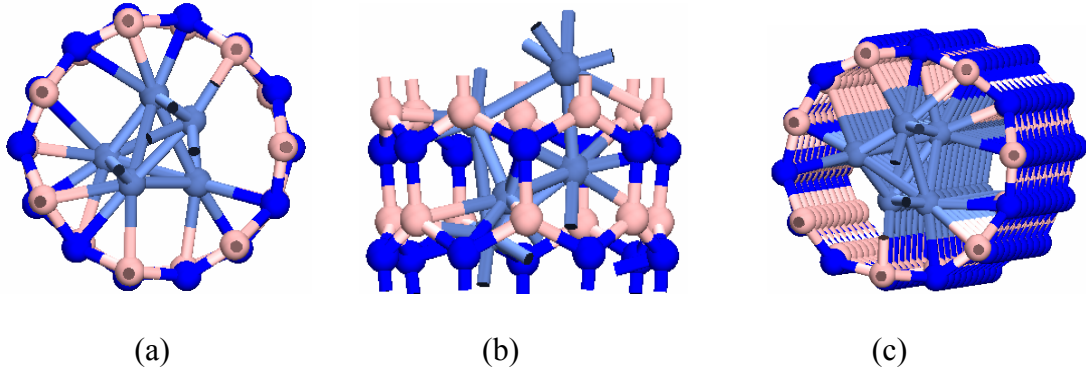
Sonraki çalışmalarda ise dış basınç arttırılarak geometri optimizasyon yapıldı. İlk olarak dış basınç 2,6 GPa alındı ve bunun sonucunda dış basınç uygulanmadan yapılan çalışma ile arasında bir fark olmadığı gözlemlendi. Aynı parametreler alınarak sadece dış basınç değiştirilerek (4 GPa alınarak) tekrar hesaplama yapıldı. Burada ise dış basınç uygulanmadan yapılan çalışma ile karşılaştırıldığında ise bağ uzunluklarında $\sim 0,01 \text{ \AA}$ kadar değişiklik görüldü. Çizelge 3.17' de toplam enerjileri ve yasak enerji aralığı gösterildi.

Çizelge 3.17. İçinde iki tane nikel atomu bulunan BN (5,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki toplam enerjisinin ve yasak enerji aralığının gösterimi

Toplam Enerji (eV)	Yasak enerji aralığı (eV)	Basınç (GPa)	Birim hücre
-6222,113	1,26	0	Sabit
-6223,768	1,25	2,6	Serbest
-6224,066	1,12	4	Serbest

3.2.6. İçinde beş tane Ni atomu bulunan Boron Nitrit (7,0) nano tüp

BN (7,0) nano tüp içine beş tane nikel atomu konulup, birim hücre sabit tutularak (dış basınç uygulanmadan) geometri optimizasyon yapıldığında Şekil 3.38' de gösterilen sonuçlar elde edilmiştir.



Şekil 3.38. İçinde beş nikel atomu bulunan ve birim hücre sabit tutularak geometri optimizasyon yapılan BN (5,0) nano tüplerin (a) üstten, b) yandan ve c) süper hücre) gösterimi

Daha sonra tüm parametreler aynı alınıp, dış basınç uygulanarak geometri optimizasyon yapıldı. Çizelge 3.18’ de bulunan BN (7,0) nano tüpün bağ uzunlukları gösterildi.

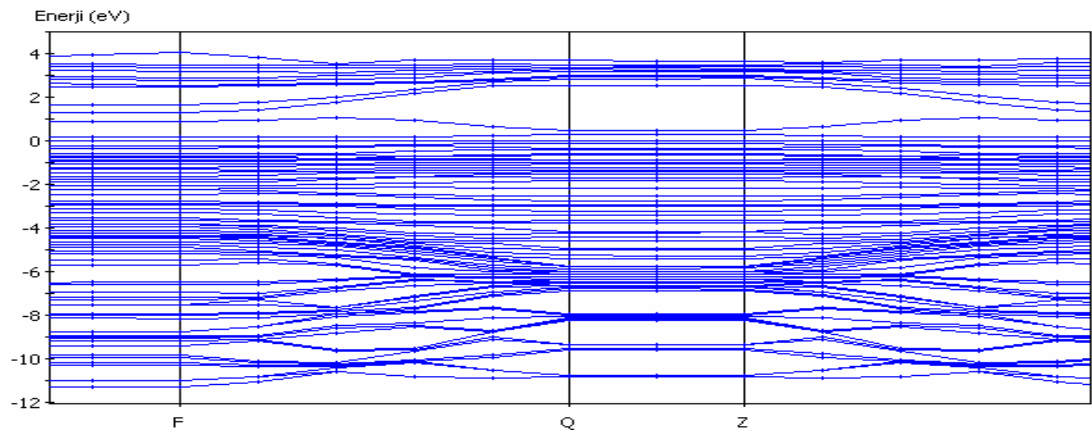
Çizelge 3.18. İçinde beş tane nikel atomu bulunan BN (7,0) nano tüpün geometri optimizasyondan sonraki bağ uzunluklarının (A^0) gösterimi (birim hücre sabit)

Geometri Parametre	Dış Basınç (0GPa)	Dış Basınç (2,6 GPa)
Ni(1)-B(7) _{üst}	2,11	2,12
Ni(2)-N(1) _{üst}	1,97	1,97
Ni(2)-B(1) _{üst}	2,10	2,09
Ni(2)-N(2) _{üst}	2,16	2,15
Ni(2)-B(1) _{alt}	2,05	2,07
Ni(3)-N(2) _{alt}	2,23	2,24
Ni(3)-B(3) _{alt}	1,94	1,94
Ni(3)-N(3) _{alt}	1,98	1,99
Ni(3)-N(4) _{alt}	2,09	2,09
Ni(4)-N(6) _{üst}	2,12	2,09
Ni(4)-B(5) _{alt}	2,07	2,12
Ni(4)-N(5) _{alt}	2,14	2,17
Ni(4)-B(6) _{alt}	1,94	1,94
Ni(5)-B(3) _{üst}	2,08	2,09
Ni(5)-N(4) _{üst}	2,04	2,04
Ni(5)-B(4) _{üst}	2,05	2,06
Ni(1)-Ni(2)	2,25	2,25
Ni(1)-Ni(5)	2,25	2,26
Ni(2)-Ni(5)	2,33	2,31
Ni(2)-Ni(3)	2,22	2,20
Ni(2)-Ni(4)	2,33	2,32
Ni(3)-Ni(5)	2,42	2,38
Ni(3)-Ni(4)	2,28	2,27
Ni(4)-Ni(5)	2,21	2,24

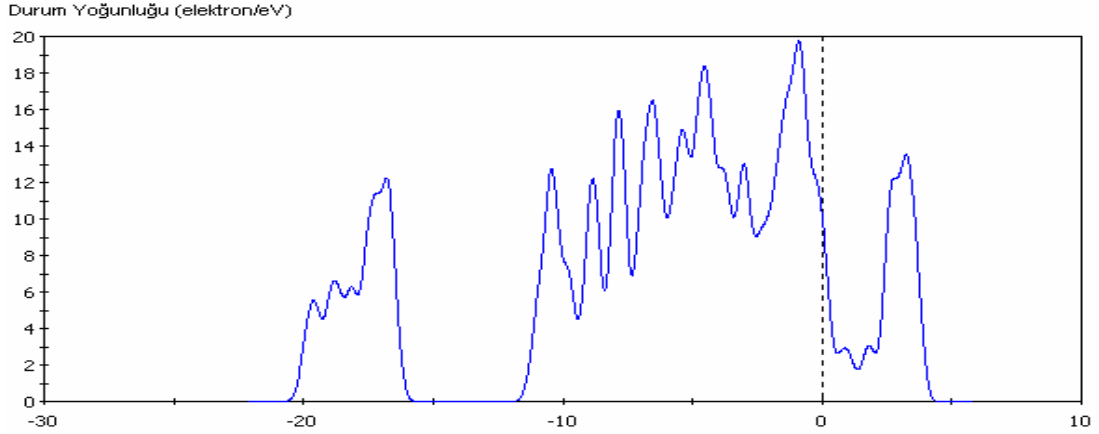
İlk olarak birim hücre sabit tutularak ve dış basınç uygulamadan geometri optimizasyon yapıldı. Sonuçta; toplam enerjisi, yasak enerji aralığı, bağlanma enerjisi, atomlar arası uzaklıklar hesaplandı.

Daha sonra aynı parametreler alınarak ve 2,6 - 4 GPa dış basınç uygulanarak hesaplamalar yapıldı. Bu iki farklı basınçta bağ uzunlukları ölçüldüğünde $0,01 \text{ \AA}$ kadar farklılıklar görüldü. Dış basınç artırılarak 6,7 ve 9 GPa basınç uygulandığında ise hiç bir değişiklik olmadı. Sonuç olarak dış basınç uygulandığında nano tüp bozulmadı. Süper hücre şekline getirildiğinde ise nano tüp içinde nano tel oluştuğu gözlenmiştir.

Nano tüpün band yapısı ve durum yoğunluğu hesaplandığında Şekil 3.39 ve Şekil 3.40' daki sonuçlar elde edildi.



Şekil 3.39. İçinde beş tane nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (7,0) nano tüpün band yapısının gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)



Şekil 3.40. İçinde beş tane nikel atomu bulunan ve sabit olarak çalıştırılan BN (7,0) nano tüpün durum yoğunluğunun gösterimi (Dış basınç uygulanmadığı durumda)

Basınç uygulanmadığı durumda band yapısını incelersek, çok az bir yasak enerji aralığına (0,11 eV) sahip olduğunu görebiliriz.

Burada basınç değerini artırarak geometri optimizasyon yaptığımızda ise yasak enerji aralığında, örgü parametrelerinde ve bağ uzunluklarında azda olsa farklılık bulunmaktadır. Yasak enerji aralığı 2,6 GPa basınç değerinde 0,14 eV iken basınç arttırıldığında (4 GPa) ise yasak enerji aralığı 0,11 eV olarak hesaplandı.

Bağ uzunluklarında ise önceki çalışmalarda görüldüğü gibi artışlar görülmektedir. Basınç arttırıldığında ise birim hücre sıkışmaktadır [13,17].

3.2.7. İçinde Ni atomu bulunan BN nano tüplerin bağlanma enerjileri

Burada ilk olarak nikel atomlarının toplam enerjileri hesaplandı ve bu sonuçlar Çizelge 3.19' da verildi.

Çizelge 3.19. Nikel atomlarının geometri optimizasyondan sonraki toplam enerjileri

Nikel Sayısı	Toplam Enerji (eV)
1	-1352,108
2	-2706,384
3	-4060,305
5	-6769,711

Daha sonra yukarıda toplam enerjileri verilen, içinde Ni atomlarıyla doldurulan BN nanotüplerin bağlanma enerjileri hesaplandı. Bu sonuçlar Çizelge 3.20' de verildi.

Çizelge 3.20. İçinde nikel atomları bulunan BN (3-8) nano tüplerin bağlanma enerjilerinin gösterimi

Nano tüpler	Nikel Sayısı	E_b (eV)	Dış Basınç (GPa)	Birim hücre
BN (3,0)	1	-3,95	0	Sabit
BN (3,0)	1	-3,85	2,6	Sabit
BN (4,0)	1	2,09	0	Sabit
BN (4,0)	1	2,10	2,6	Serbest
BN (4,0)	1	-10,45	4	Serbest
BN (4,0)	2	7,01	0	Sabit
BN (4,0)	2	7,01	2,6	Sabit
BN (4,0)	2	-10,33	2,6	Serbest
BN (4,0)	2	-10,25	4	Serbest
BN (5,0)	2	-3,21	0	Sabit
BN (5,0)	2	1,55	2,6	Serbest
BN (5,0)	2	1,25	4	Serbest
BN (6,0)	3	1,41	0	Sabit
BN (6,0)	3	1,41	2,6	Sabit
BN (6,0)	3	1,39	2,6	Serbest
BN (7,0)	5	1,63	0	Sabit
BN (7,0)	5	1,62	2,6	Sabit
BN (7,0)	5	1,62	4	Sabit

Tüm nano tüplerin bağlanma enerjileri hesaplandı. Bağlanma enerjileri pozitif ve negatif olabilir. Çünkü BN nano tüpler çok kararlıdır ve hareketsizdir. Pozitif olması bu yapıların endotermik olduğunu gösterir [13].

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu çalışmada BN (3-8) nano tüpler CASTEP paket programında, yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ile GGA yaklaşımı ve PBE modeli kullanılarak hesaplandı. Sonuçta toplam enerji değerleri, bağ uzunları, band aralıkları [18] nolu referans ile uygun sonuçlar verdi.

İlk olarak boş BN nano tüplerin geometri optimizasyonu yapıldı. Birim hücre sabit tutularak çalışıldı. Birim hücre serbest bırakıldığında ise uygun sonuçlara ulaşılmadığı için bu tercih edilmedi. Fakat basınç uygulanarak birim hücre serbest bırakılırsa [18] nolu referans ile uyumlu sonuçlar vermektedir.

Daha sonra bu hesaplanan BN nano tüplerin içine Ni atomlar konularak ne gibi sonuçlar vereceği incelendi. Nano tüplerin içerisine geçiş elementleri (Ni atomu) konulduğunda elektronik özellikleri değişmektedir. Bu çalışma için, BN nano tüplerin içine farklı sayılarda nikel atomu yerleştirilerek ve nano tüplerin birim hücrelerini serbest bırakarak yada sabit tutarak geometri optimizasyon yapıldığında farklı sonuçlar elde edildi. Hesaplamalarda dış basınç kullanılarak program çalıştırıldı. Örneğin; BN (4,0) nano tüp içine iki nikel atomu koyup, birim hücrelerini serbest bırakarak geometri optimizasyon yaptığımızda B ve N atomlarından oluşan iki düzlem arasında Ni nanoteli oluşmaktadır. Bu yapı yarı iletken bir özellik göstermektedir. Burada birim hücre sabit tutulduğunda ise nano tüpün bozulmadığı ve bu yapının süper hücre haline getirilmesi durumunda nano tüp içinde Ni nanoteli oluştuğu görüldü.

BN (4,0) nano tüp içine tek nikel atomu koyup, birim hücrelerini serbest bırakarak ve önce 2,6GPa, daha sonra 4GPa dış basınç uygulanarak geometri optimizasyon yaptığımızda ise iki farklı sonuçla karşılaşmış olduk. Düşük basınç uygulandığında nano tüp bozulmadı. Fakat basınç arttırıldığında nano tüp düzlem şeklini almış oldu. Bu hesaplamalar ilk defa bu çalışma ile literatüre kazandırılmış oldu.

Geçiş metali (Ni atomu) ile doldurulan BN nano tüpler üzerindeki basınçları arttırdığımızda yasak enerji aralığında ve örgü parametrelerinde azalma meydana gelmiştir. Basınç uygulandığında birim hücre sıkışmış, atomlar arası bağ uzunluklarında ise artış gözlemlendi [19].

KAYNAKLAR

1. Arıkan, A., and Altan, E., “Nano ölçekte talaş kaldırma”, *Mühendis ve Makina*, 46 (550): 46-54 (2005).
2. Gommersall, L., Shergill, I. S., Ahmed, H. U., Hayne D., Arya M., Hitendra, R.H., Hashizume, M., And Gill, I. S., “Nanotechnology and Its Relevance to The Urologist”, *European Urology*, baskıda (2007).
3. Höltje, H. D., Sippl, W., Rognan, D., Folkers, G., “Molecular Modelling”, *2nd ed. Wiley-VCH*, 8: 18-78 (2003).
4. Stewart, J., In "Quantum Chemistry Program Exchange Catalog", *India University*, 14: 455-488 (1983).
5. Slater, J. C., “The Theory of Complex Spectra ”, *Phys. Rev.*, 34: 1293-1305 (1929).
6. Jensen, F., "Introduction to Computational Chemistry", *John Wiley & Sons Ltd.*, Amsterdam, 120-150 (1999).
7. Gill, P. M. W., "DFT, HF and Self Consistent Field", Enc. Of Comp. Chemistry, *John Wiley & Sons Ltd*, New York, 3: 65-87(1996).
8. Pulay, P., "Ab initio Calculation of Force Constants and Equilibrium Geometries ", *Mol.Phys.*, 17: 197-205 (1969).
9. Pople, J. A., Krishnan, R., Schlegel, H. B., Binkley, J. S., " Derivative studies in Hartree-Fock and Möller-Plesset theories", *Int. J. Quantum Chem. Symp.*, 13: 225-233 (1979).
10. Durgun, E., Senger R. T., Mehrez, H., Dağ, S. And Çıracı, S., “Nanospintronic properties of carbon-cobalt atomic chains”, *Europhysics Letters*, 73(4): 642-648 (2006).
11. Gümüşderelioğlu M., Karakeçili A.G., “Yeni Ufuklara ve Biyomalzemeler”, *Bilim ve Teknik*, 3: 25-29 (2002).
12. Başaran, E. ve Ayhan, A., “Nanoteknoloji; Dünden Bugüne Türkiye’ de Bilim- Teknoloji ve Geleceğin Teknolojileri ”, *Beta Yayını*, 5: 379-388 (2002).
13. Xiang, H. J., Yang, J., ¹, Hou, J. G. and Zhu, Q., “Half-metallic ferromagnetism in transition-metal encapsulated boron nitride nanotubes”, *New Journal Physics*, 7: 39 (2005).

14. Yang, C. K., Zhao, J. and Lu, J. P., “Nanocables Made of a Transition Metal Wire and Boron Nitride Sheath: Density Functional Calculations”, *Physical Review B*, 74: 235445 (2006).
15. Bentley, A. K., Ellis, A. B., Liskensky, G. C. and Crone, W. C., “Suspensions of nickel nanowires as magneto-optical switches”, *Nanotechnology*, 16: 2193-2196 (2005).
16. Takayanagi, K., Kondo, Y. and Ohnishi, H., “Suspended Gold Nanowires: Ballistic Transport of Electrons”, *JSAP International*, 3: 3-8 (2001)
17. Srivastava, D., Menon, M. and Cho, K., “Anisotropic Nanomechanics of Boron Nitride Nanotubes: Nanostructured “Skin” Effect”, *Physical Review B*, 63: 195413 (2001).
18. Jia, J., F., Wu, H. S., Jiao, H., “The structure and electronic property of BN nanotube”, *Physical Review B*, 381: 90–95 (2006).
19. Rubio, A., Corkill, J. L. and Cohen, M. L., “Theory of Graphitic Boron Nitride Nanotubes”, *Physical Review B*, 49: 7 (1993).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ÇABUK, Pınar
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 24.10.1984 Sivas
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (346) 225 56 03
Faks : 0 (312) 282 73 16
e-mail : p_cabuk2001@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Selçuk Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2004
Lise	Ulaş Lisesi	2000

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Masa Tenisi, Programlama ile uğraşmak, Yüzmek