

Special Issue

BSW2016

**Fifth Bozok Science Workshop: Nano Carbon Materials and
Their Applications**

Bozok Science Workshop 2016, Yozgat, April 28-29, 2016.

**FARKLI BOYLARDAKİ ZİGZAG TEK DUVARLI KARBON
NANOTÜPLERİN ELEKTRONİK YAPILARI**

Necati VARDAR *

*KTO Karatay Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi Malzeme Bilimi ve Nanoteknoloji
Mühendisliği Bölümü, Konya / Türkiye.*

Abstract: Tek Duvarlı Karbon Nanoteüplerin (TDKNT) günümüz teknolojisinde hedeflenen ve/veya kullanımda olan hidrojen depolama, strain sensör, biyo-sensör ve uzay araştırmaları vb. bir dizi kullanım alanı mevcuttur[1]. Ultra uzun TDKNT'lerin elektriksel özellikleri farklı deneysel gruplar tarafından çalışılmış olup karbon nanotüplerin hafif, yüksek mukavemetli kullanımlarına ek olarak, yeni uzun metalik karbon nanotüplerin nano-ölçekli elektromekanik sistemlerde kullanılması hedeflenmektedir[3-6].

Nanoyapılı malzemelerin özellikle karbon nanotüplerin simülasyonlarına başarıyla uygulanan Paralel N-Mertebe Sıkı-Bağ Moleküler Dinamik Simülasyon Yöntemi [7-8] çalışmamızda kullanılmış olup, çalışmada öncelikle seçilen farklı kiraliteye sahip zigzag TDKNT'lerin ortalama enerjilerinin katman sayısına göre değişimine bakılmış, ardından TDKNT'lerin boyunun enerji bant aralığına etkisi 300K sıcaklık değerinde incelenmiştir. Çalışma sonucunda, seçilen zigzag TDKNT'lerin enerji bant aralığının kiraliteye nasıl bağlı olduklarına dair bir çıkarım yapılmıştır.

Keywords: Moleküler Dinamik Simülasyonu, Karbon Nanotüp, Tek Duvarlı Karbon Nanotüp, Kiralite, Enerji Band Aralığı.

References:

- [1] Su, C.C., *et. al.*, Sens. and Act., A176: 124-129 (2012); Ferreira, *et. al.*, Sens. and Act., A 178: 10-16 (2012).
- [2] Hong, B.H., *et. al.*, J. Am. Chem. Soc. 127: 15336-15337 (2005); Durkop, T., *et. al.*, Nano Lett., 4: 35-39 (2004); Li, S., Yu, Z., *et. al.*, Nano Lett., 4: 2003-2007 (2004); Zheng, L.X., *et. al.*, Nat. Mat. 3: 673-676 (2004).
- [3] Özdoğan, C., *et. al.*, Comp. Phys. Commun., 148: 188-205 (2002); Dereli G., Özdoğan C., Phys. Rev. B, 67: 0354415 (1-7) (2003).

* Corresponding author; Tel.: +(90) 555 3899559, E-mail: necati.vardar@karatay.edu.tr