



# Nanoteknoloji ve Bilgisayar Modellemeleri

## *Studies on Structure and Dynamics from Nucleus to Clusters, Yozgat 16–18 Mayıs 2013*

Cem Özdoğan

ozdogan@cankaya.edu.tr <http://siber.cankaya.edu.tr>

Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü , Çankaya Üniversitesi, 06810 Ankara, Türkiye.



- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.

- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.

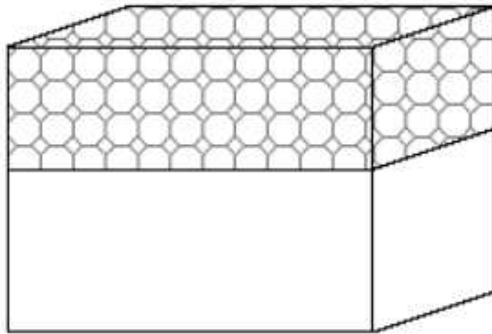
- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.

- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.
- Yaklaşık 100-1000 atom bir araya gelerek nano ölçeklerde bir nesneyi oluşturur.

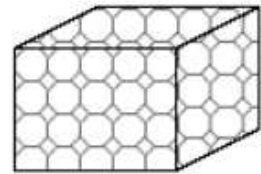
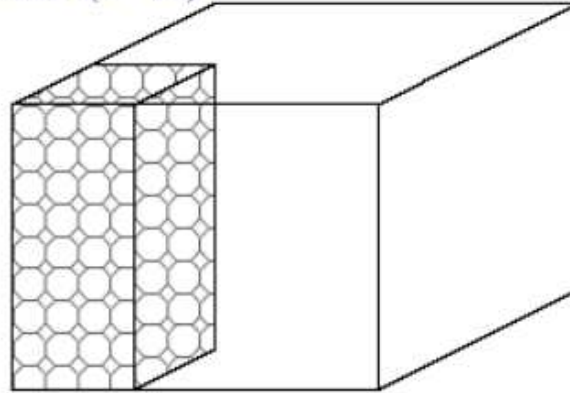
- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.
- Yaklaşık 100-1000 atom bir araya gelerek nano ölçeklerde bir nesneyi oluşturur.
- Nano ölçekte ilgi alanı elektron, atom veya moleküldür.

- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.
- Yaklaşık 100-1000 atom bir araya gelerek nano ölçeklerde bir nesneyi oluşturur.
- Nano ölçekte ilgi alanı elektron, atom veya moleküldür.
- Atomik dünyanın temel yasası ise Kuantum Mekaniğidir.

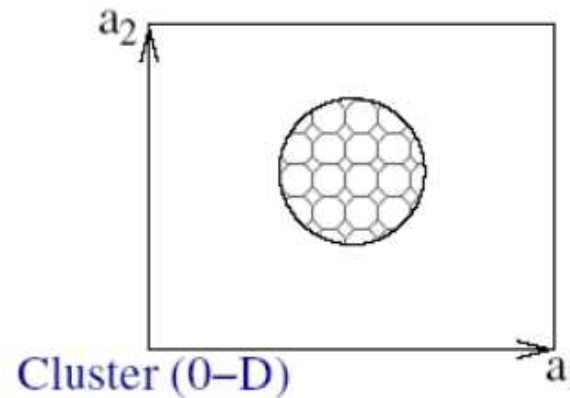
Surface (2-D)



Wire (1-D)



Crystal (3-D)



## Nano Yapıların Temsili Resimleri.

Tianshu Li, First Principle Simulations in Nano-science.





- Nanobilim;

- Nanobilim;
  - Ortaya çıkan yeni davranışların kuantum kuramı yardımı ile anlaşılması.

- Nanobilim;
  - Ortaya çıkan yeni davranışların kuantum kuramı yardımı ile anlaşılması.
  - Kuantum davranışlar bilinen klasik davranışların yerini almaktadır.

- Nanobilim;
  - Ortaya çıkan yeni davranışların kuantum kuramı yardımı ile anlaşılması.
  - Kuantum davranışlar bilinen klasik davranışların yerini almaktadır.
  - Fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerin incelenmesi.

- Nanobilim;
  - Ortaya çıkan yeni davranışların kuantum kuramı yardımı ile anlaşılması.
  - Kuantum davranışlar bilinen klasik davranışların yerini almaktadır.
  - Fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerin incelenmesi.
  - Disiplinlerarası bilim dalıdır.

- Nanobilim;
  - Ortaya çıkan yeni davranışların kuantum kuramı yardımı ile anlaşılması.
  - Kuantum davranışlar bilinen klasik davranışların yerini almaktadır.
  - Fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerin incelenmesi.
  - Disiplinlerarası bilim dalıdır.
- Yapısal, Elektronik, Manyetik Özellikler



- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;



- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.
  - Bu yapılarda yeni özellikler ve işlevler.

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.
  - Bu yapılarda yeni özellikler ve işlevler.
  - Fonksiyonel malzemeler, cihazlar ve düzenekler.

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.
  - Bu yapılarda yeni özellikler ve işlevler.
  - Fonksiyonel malzemeler, cihazlar ve düzenekler.
  - Daha sağlam, dayanıklı, hafif, az atık üretimi, az enerji kullanımı.

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.
  - Bu yapılarda yeni özellikler ve işlevler.
  - Fonksiyonel malzemeler, cihazlar ve düzenekler.
  - Daha sağlam, dayanıklı, hafif, az atık üretimi, az enerji kullanımı.
- Kontrol, Gözlem, Uygulama & Üretim

- Maddenin nanometre boyutundaki fiziksel, kimyasal ve biyolojik özelliklerini kontrol edebilmek.
- Nanoteknoloji;
  - Yeni nano yapılar tasarlanması/sentezlenmesi.
  - Bu yapılarda yeni özellikler ve işlevler.
  - Fonksiyonel malzemeler, cihazlar ve düzenekler.
  - Daha sağlam, dayanıklı, hafif, az atık üretimi, az enerji kullanımı.
- Kontrol, Gözlem, Uygulama & Üretim
- Nanoteknoloji bilim ağırlıklı bir mühendislik dalıdır.



- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:

- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
  1. Üretim ve Uygulama



- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
  1. Üretim ve Uygulama
    - "Aşağıdan yukarıya" olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.

- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:

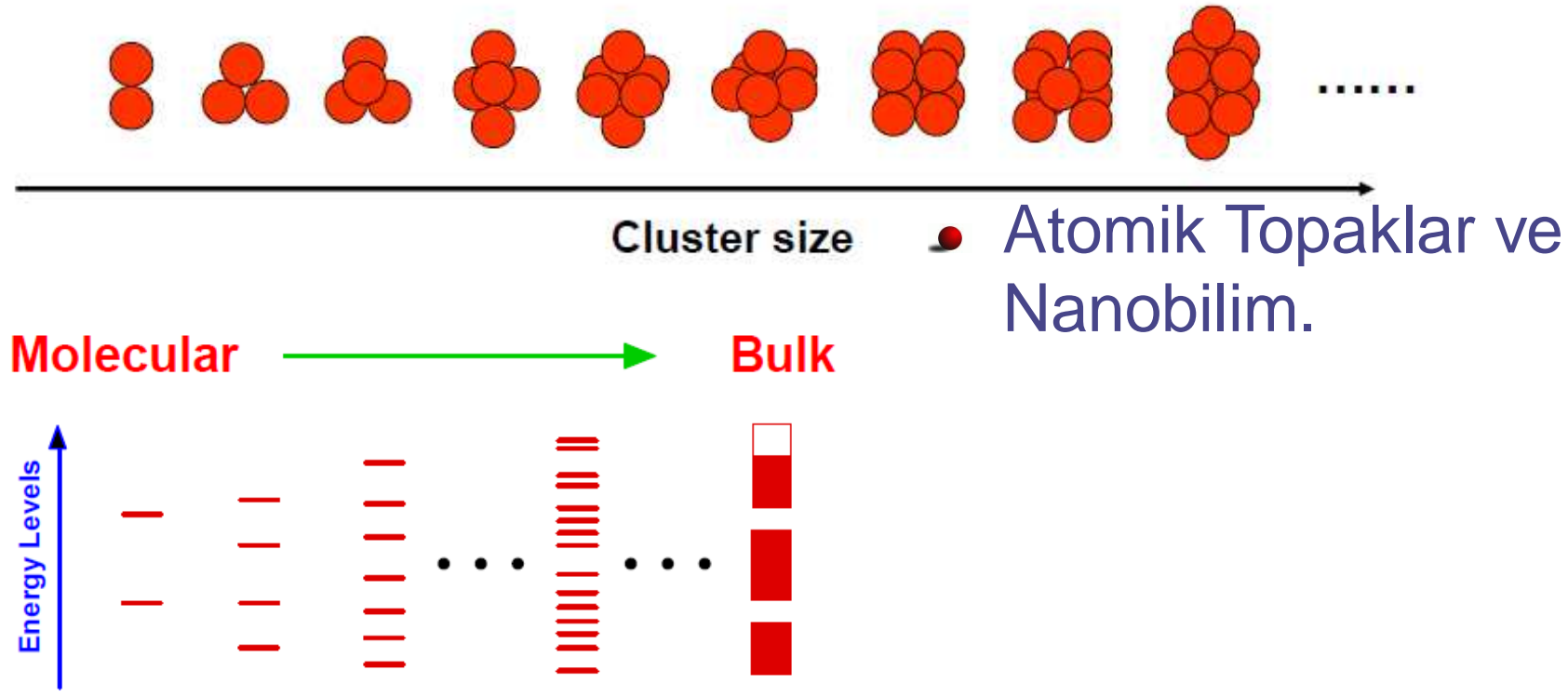
1. Üretim ve Uygulama

- "Aşağıdan yukarıya" olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.
- "Yukarıdan aşağıya" (lithography) olan yaklaşım; atomik seviyede kontrol olmaksızın daha büyük parçalardan yapılır.

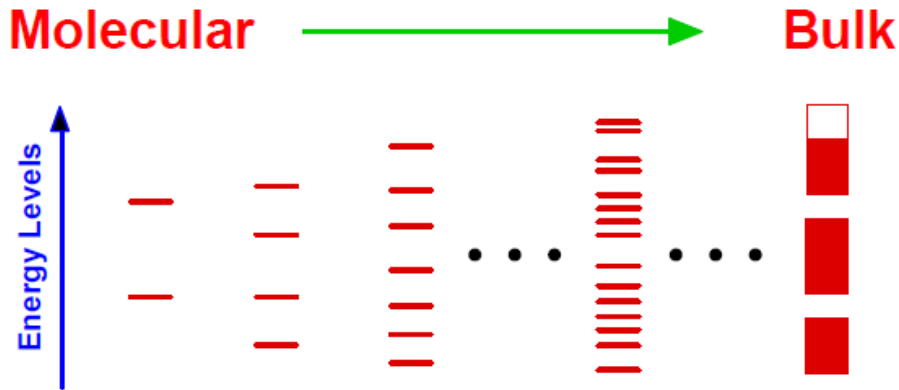
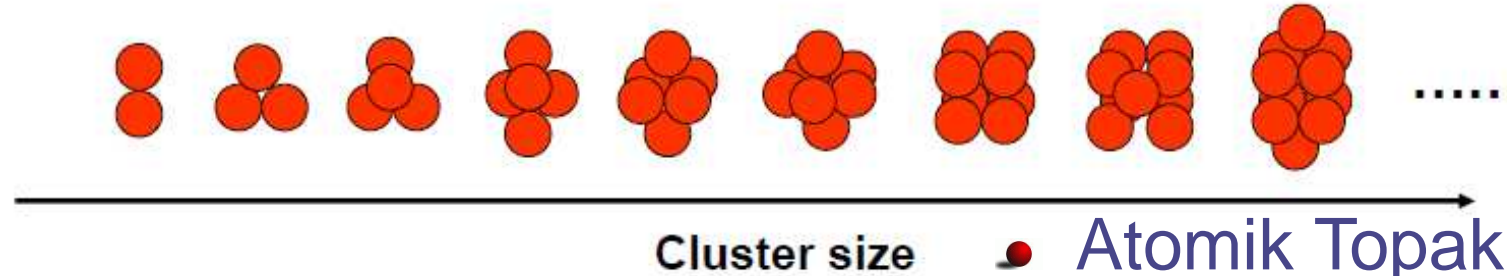
- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
  1. Üretim ve Uygulama
    - "Aşağıdan yukarıya" olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.
    - "Yukarıdan aşağıya" (lithography) olan yaklaşım; atomik seviyede kontrol olmaksızın daha büyük parçalardan yapılır.
  2. Uygun mikroskopların geliştirilmesi: Ölçüm, karakterizasyon ve görüntüleme.

- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
  1. Üretim ve Uygulama
    - "Aşağıdan yukarıya" olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.
    - "Yukarıdan aşağıya" (lithography) olan yaklaşım; atomik seviyede kontrol olmaksızın daha büyük parçalardan yapılır.
  2. Uygun mikroskopların geliştirilmesi: Ölçüm, karakterizasyon ve görüntüleme.
  3. Gelişen bilgisayar kapasiteleri: Modelleme .

- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
  1. Üretim ve Uygulama
    - "Aşağıdan yukarıya" (self-assembly) olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.
    - "Yukarıdan aşağıya" (lithography) olan yaklaşım; atomik seviyede kontrol olmaksızın daha büyük parçalardan yapılır.
  2. Uygun mikroskopların geliştirilmesi: Ölçüm, karakterizasyon ve görüntüleme.
  3. Gelişen bilgisayar kapasiteleri: Modelleme ve simülasyon. Hesaplamalı Nanobilim.



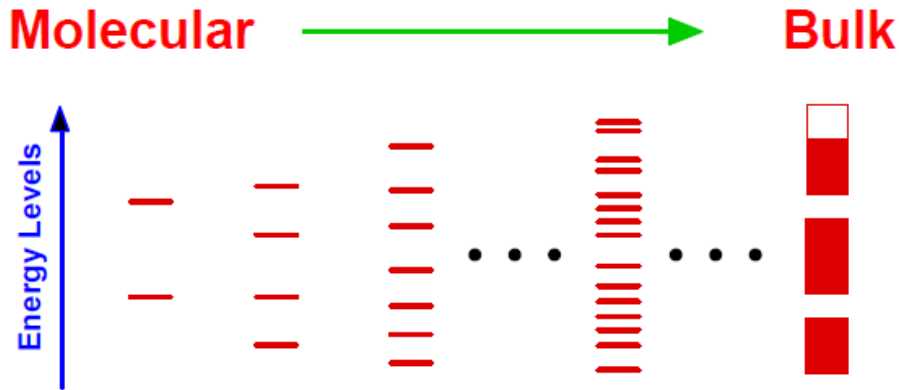
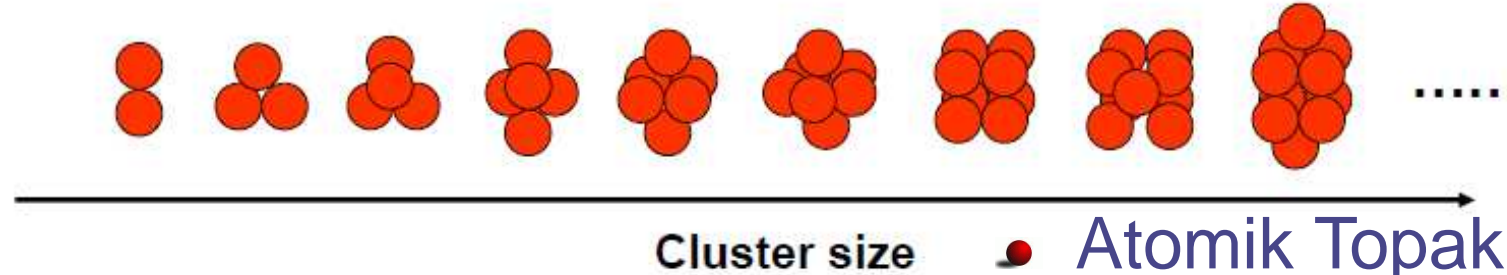
Lai-Sheng Wang, Probing the Electronic Structure and Chemical Bonding of Boron Clusters Using Photoelectron Spectroscopy of Size-Selected Cluster Anions.



• Atomik Topaklar ve Nanobilim.

• Nanobilimin "Aşağıdan yukarıya" yaklaşımı.

Lai-Sheng Wang, Probing the Electronic Structure and Chemical Bonding of Boron Clusters Using Photoelectron Spectroscopy of Size-Selected Cluster Anions.

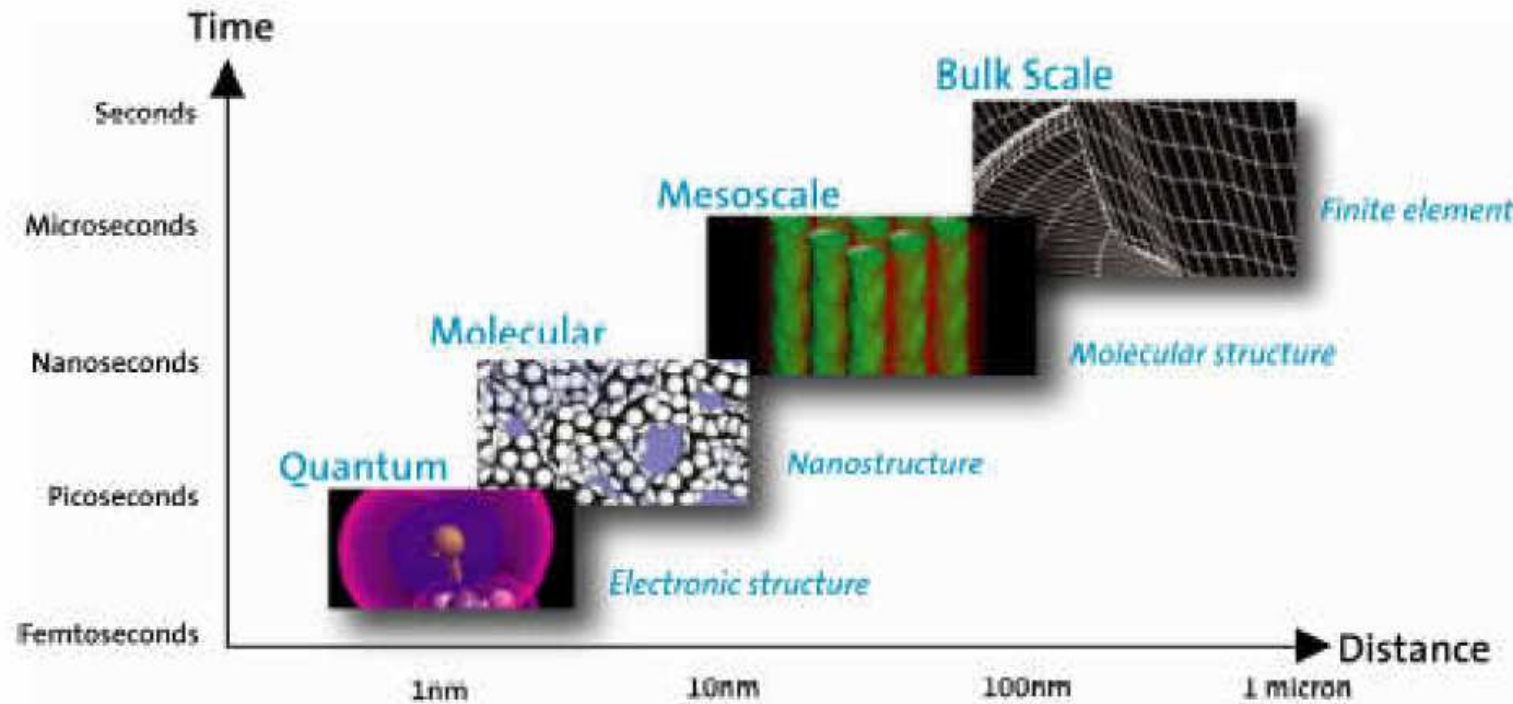


- Atomik Topaklar ve Nanobilim.
- Nanobilimin "Aşağıdan yukarıya" yaklaşımı.
- Özellikleri topak sistemi büyüklüğüne bağlı olarak değişiyor.

Lai-Sheng Wang, Probing the Electronic Structure and Chemical Bonding of Boron Clusters Using Photoelectron Spectroscopy of Size-Selected Cluster Anions.



Different modeling and simulation methods address a range of time and size scales



Risto Nieminen, The role of modeling and simulation in nanoscience and –technology research 2007.

- Fiziksel özelliklerin çoğu kuantum mekaniği yasalarından bulunabilir.

- Fiziksel özelliklerin çoğu kuantum mekaniği yasalarından bulunabilir.
- "Ab initio"; kelime manası "başlangıçtan itibaren"

- Fiziksel özelliklerin çoğu kuantum mekaniği yasalarından bulunabilir.
- "Ab initio"; kelime manası "başlangıçtan itibaren"
- "Temel ilkeler" yöntemleri; başka bir teoriden gelmezler. Gereken tek bilgi atom numarasıdır.

- Fiziksel özelliklerin çoğu kuantum mekaniği yasalarından bulunabilir.
- "Ab initio"; kelime manası "başlangıçtan itibaren"
- "Temel ilkeler" yöntemleri; başka bir teoriden gelmezler. Gereken tek bilgi atom numarasıdır.
- Kuantum Ölçeği. En hassas simülasyon yöntemleridir.

- Fiziksel özelliklerin çoğu kuantum mekaniği yasalarından bulunabilir.
- "Ab initio"; kelime manası "başlangıçtan itibaren"
- "Temel ilkeler" yöntemleri; başka bir teoriden gelmezler. Gereken tek bilgi atom numarasıdır.
- Kuantum Ölçeği. En hassas simülasyon yöntemleridir.
- Geniş Ölçekli Hesaplama Yöntemleri.

$$H = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (1)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Hamiltonian denklemi.

$$H = - \underbrace{\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (2)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Hamiltonian denklemi.
- Elektronların kinetik enerjisi.



$$H = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (3)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Hamiltonian denklemi.
- Elektronların kinetik enerjisi.
- Elektron-iyon etkileşimi.

$$H = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (4)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Homiltonian denklemi.
- Elektronların kinetik enerjisi.
- Elektron-iyon etkileşimi.
- Elektron-electron etkileşimi.

$$H = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (5)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Homiltonian denklemi.
- Elektronların kinetik enerjisi.
- Elektron-iyon etkileşimi.
- Elektron-electron etkileşimi.
- İyon-iyon etkileşimi.

$$H = \underbrace{-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2}_{T_{el}} - \underbrace{\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|r_i - R_I|}}_{V_{el-ion}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}}_{V_{el-el}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I^2 Z_J^2 e^2}{|R_I - R_J|}}_{V_{ion-ion}} \quad (6)$$

- Electron-iyon sisteminin toplam Hamiltonian denklemi.
- Elektronların kinetik enerjisi.
- Elektron-iyon etkileşimi.
- Elektron-electron etkileşimi.
- İyon-iyon etkileşimi.
- Çözüm yok/karmaşık.

Yöntem
- Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
Kuantum Kimyası
Kuantum Monte Carlo
“Ab initio“ Moleküler Dinamiği (MD)
Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
Ampirik MD (AMD)

- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.

Yöntem
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
- Kuantum Kimyası
Kuantum Monte Carlo
“Ab initio“ Moleküler Dinamiği (MD)
Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
Ampirik MD (AMD)

- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.
- Sonlu sistemler; molekül.

Yöntem
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
Kuantum Kimyası
- Kuantum Monte Carlo
“Ab initio“ Moleküler Dinamiği (MD)
Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
Ampirik MD (AMD)

- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.
- Sonlu sistemler; molekül.
- İstatistiksel çok-cisim yöntemi.

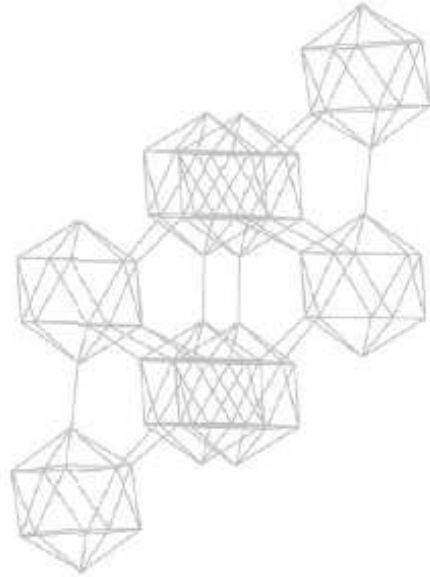
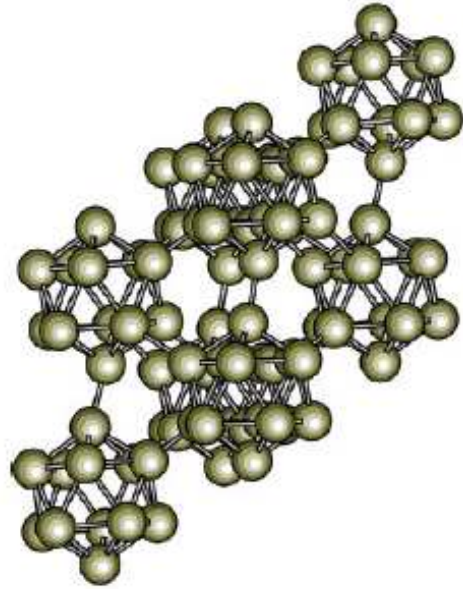
Yöntem
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
Kuantum Kimyası
Kuantum Monte Carlo
- "Ab initio" Moleküler Dinamiği (MD)
Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
Ampirik MD (AMD)

- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.
- Sonlu sistemler; molekül.
- İstatistiksel çok-cisim yöntemi.
- Kuantum Ölçeği.



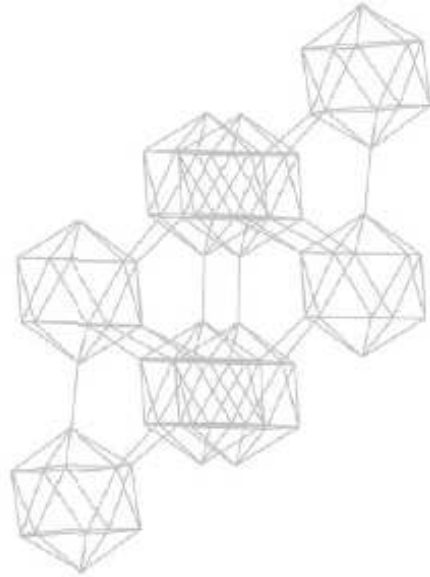
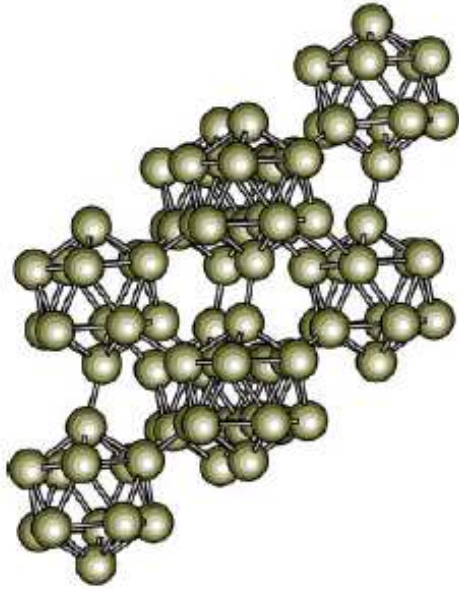
Yöntem
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
Kuantum Kimyası
Kuantum Monte Carlo
“Ab initio“ Moleküler Dinamiği (MD)
- Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
- Ampirik MD (AMD)

- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.
- Sonlu sistemler; molekül.
- İstatistiksel çok-cisim yöntemi.
- Kuantum Ölçeği.
- Atomik Ölçek.



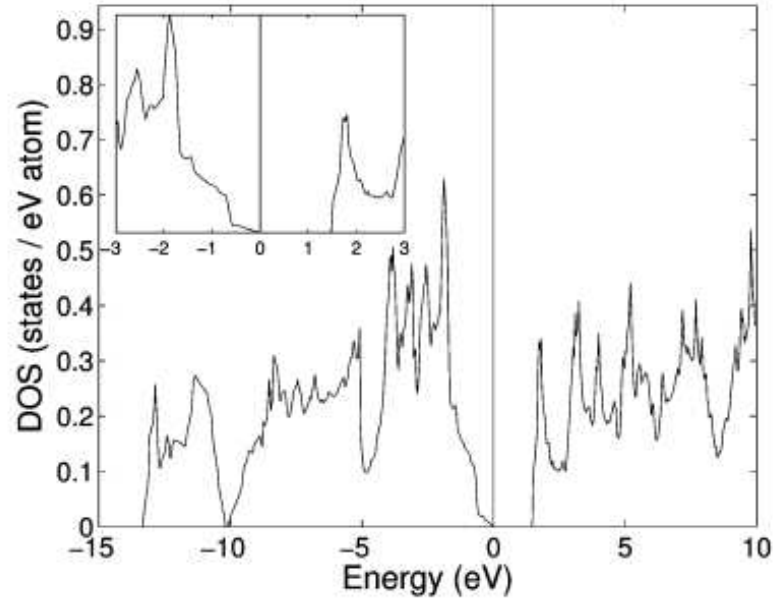
- YFT - VASP kodu.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.



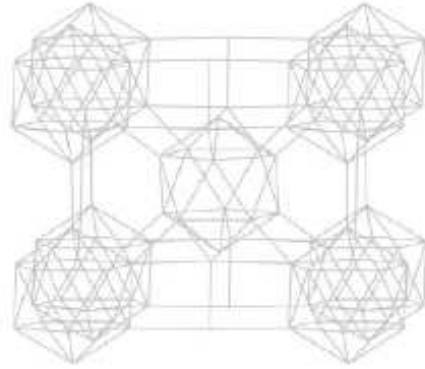
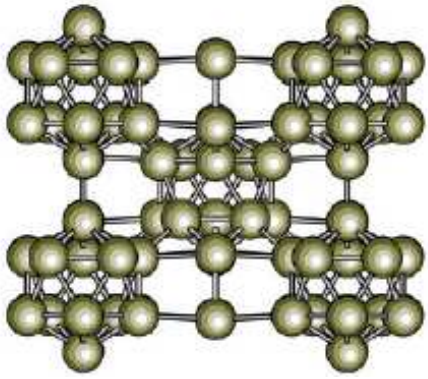
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$  rhombohedral elemental bor yapısu.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.



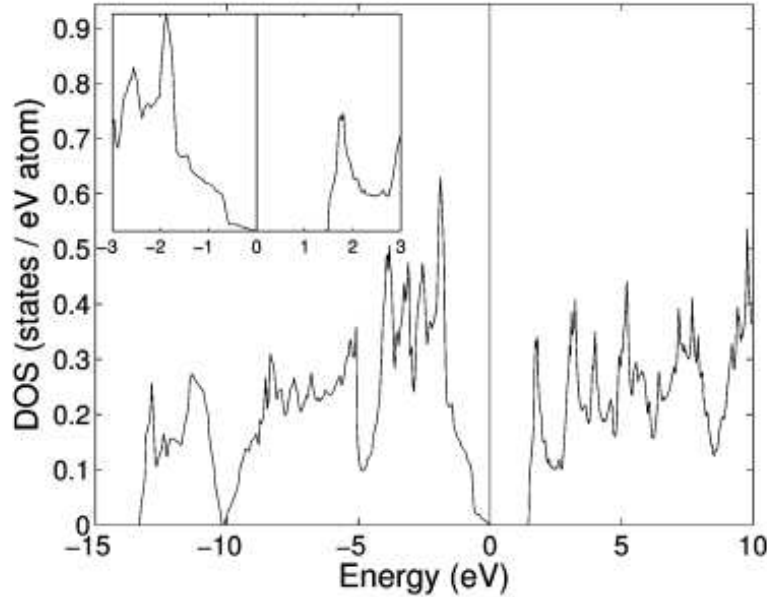
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$  rhombohedral elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.65 (1.50) eV.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.



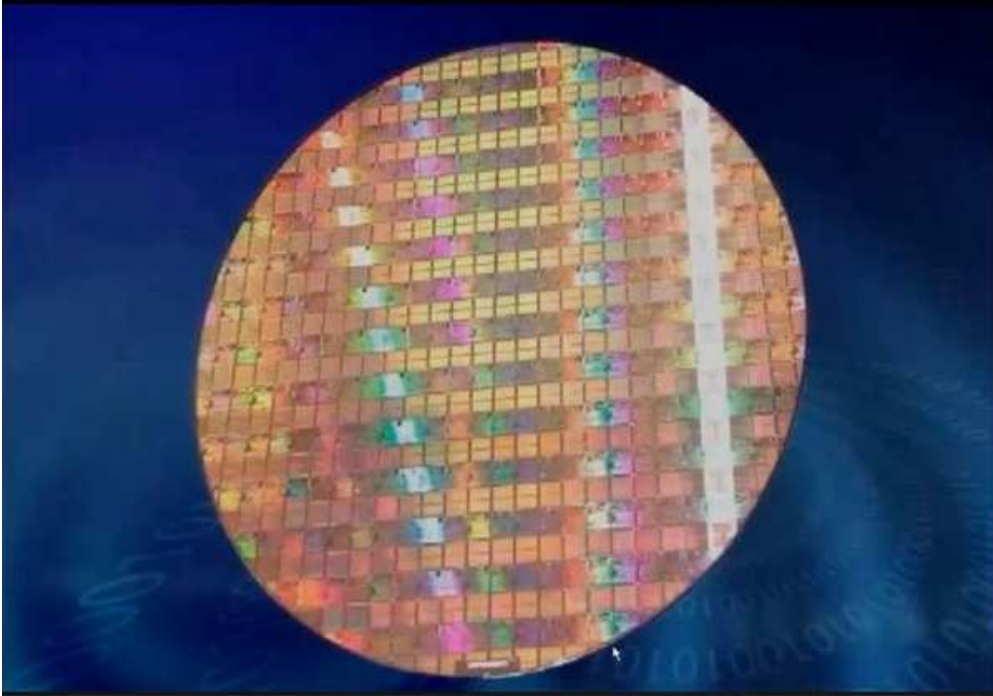
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$  rhombohedral elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.65 (1.50) eV.
- $\gamma$  elemental bor yapısı.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.

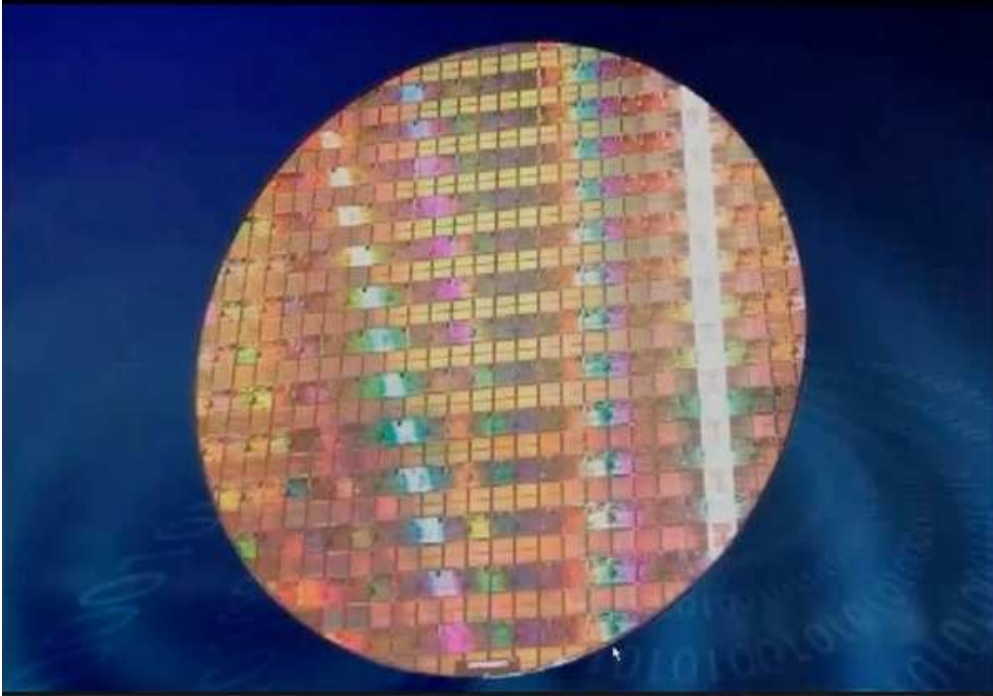


- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$  rhombohedral elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.65 (1.50) eV.
- $\gamma$  elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.50 (1.63) eV.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.

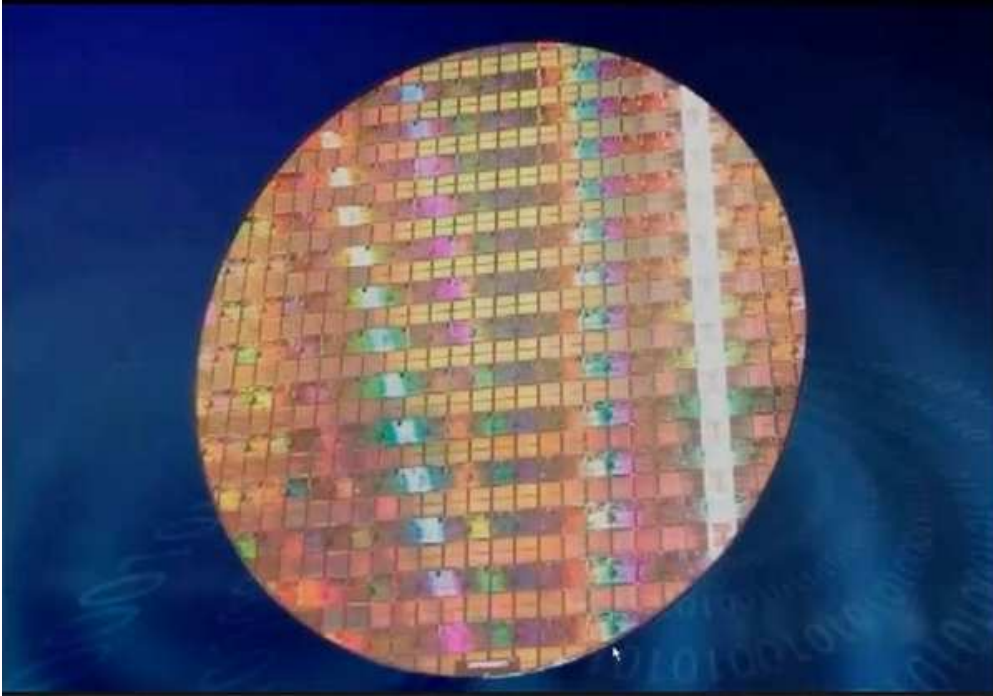


- Intel Chip Design

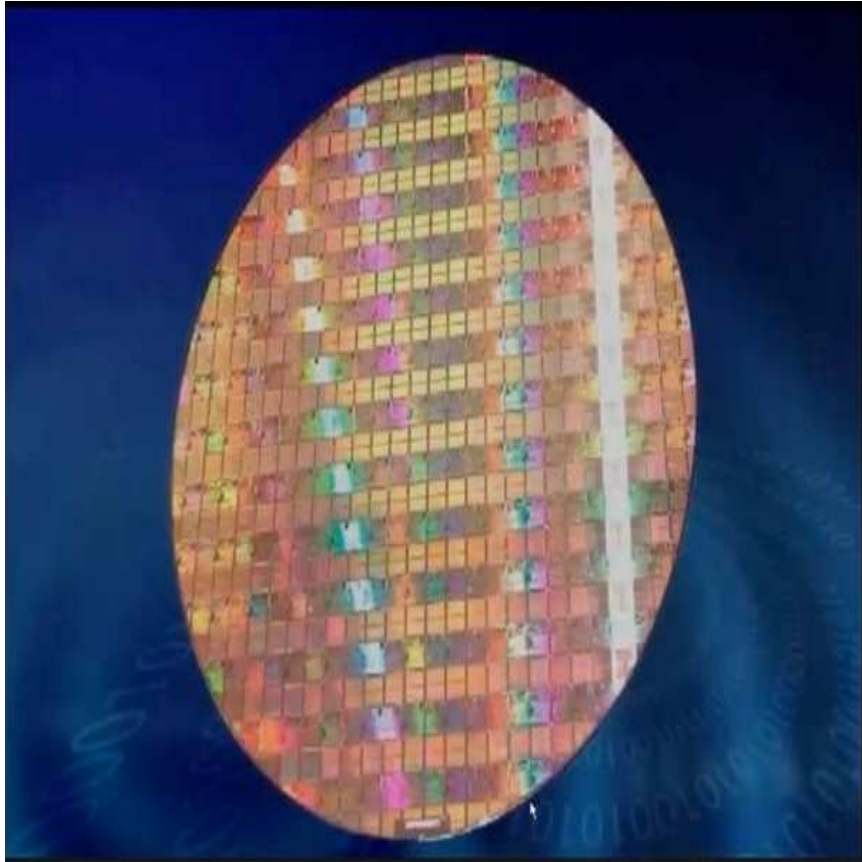


- Intel Chip Design
- Transistor iç yapısı

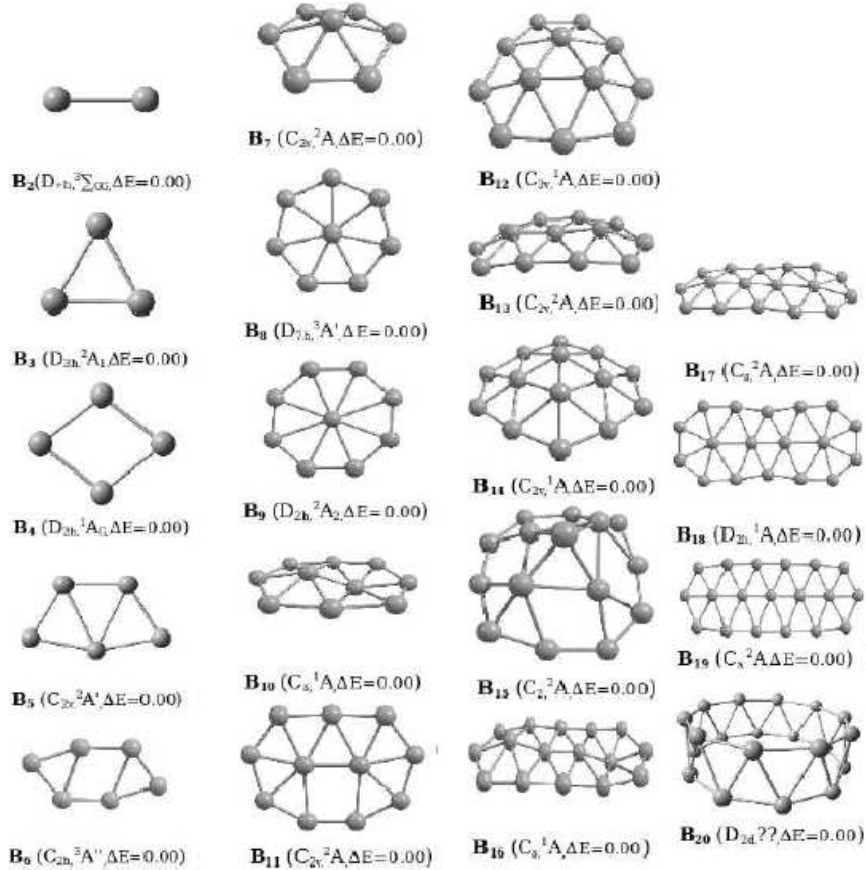




- Intel Chip Design
- Transistor iç yapısı
- Gate Electrode, Gate Dielectric ve Semiconducting Layer



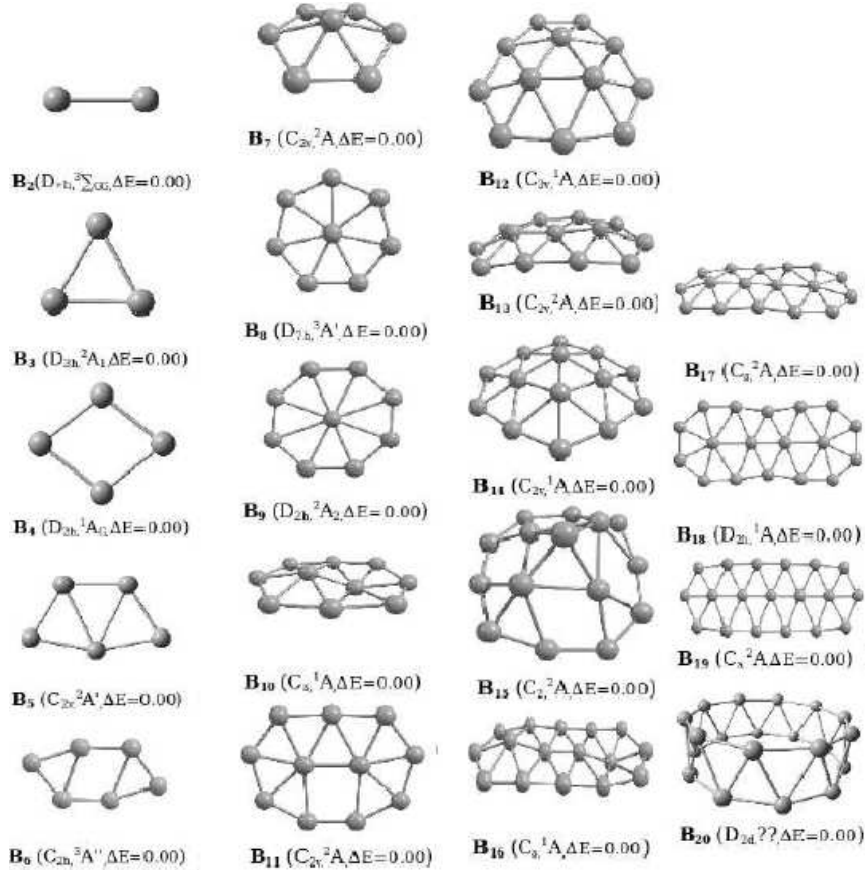
- Intel Chip Design
- Transistor iç yapısı
- Gate Electrode, Gate Dielectric ve Semiconducting Layer
- Conduction Band



- YFT - Gaussian03 kodu.

M. Atış et al. "Density Functional Study of Physical and Chemical Properties of Nano Size Boron Clusters:  $B_n$  ( $n = 13 - 20$ )" Chin. J. Chem. Phys 2009, **22**, 380.

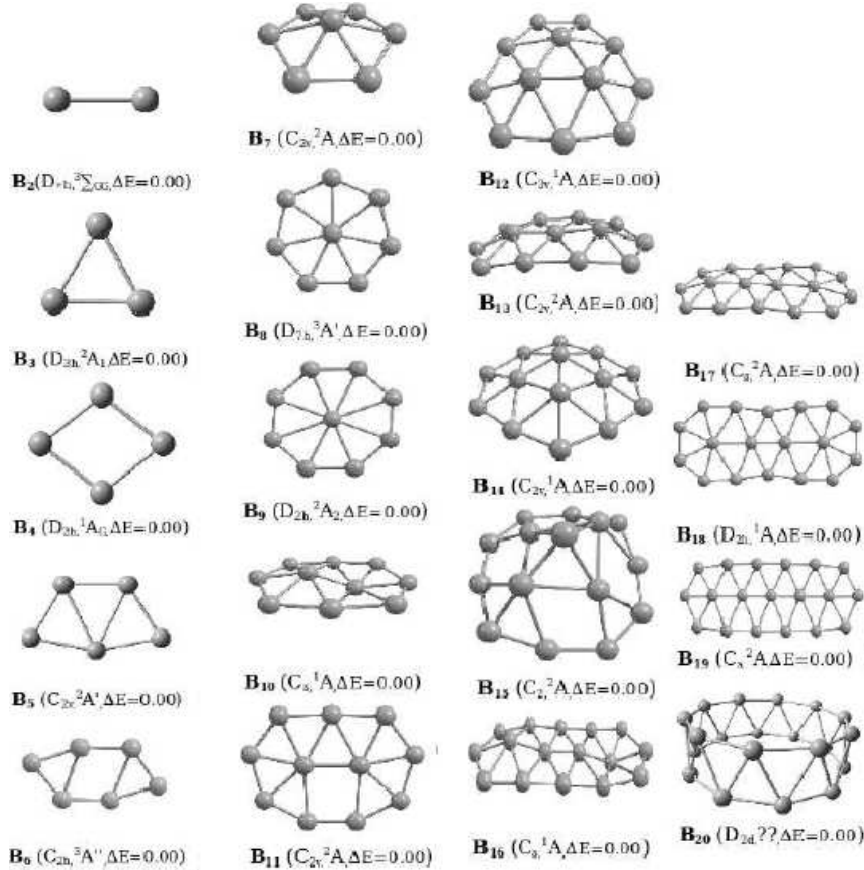
"Structure and Energetic of  $B_n$  ( $n = 2 - 12$ ) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.



- YFT - Gaussian03 kodu.
- Bor atom topakları (2-20 aralığı).

M. Atış et al. "Density Functional Study of Physical and Chemical Properties of Nano Size Boron Clusters:  $B_n$  ( $n = 13 - 20$ )" Chin. J. Chem. Phys 2009, **22**, 380.

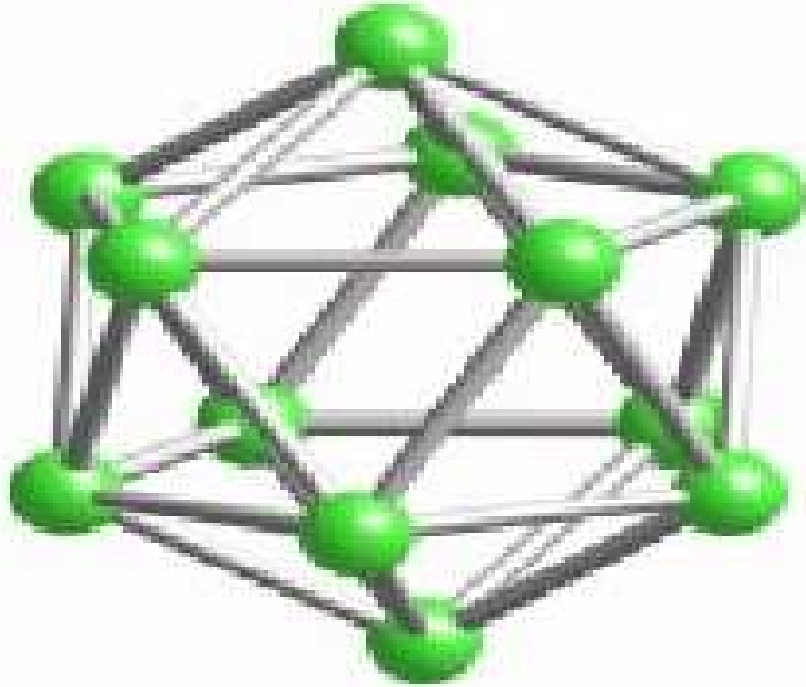
"Structure and Energetic of  $B_n$  ( $n = 2 - 12$ ) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.



- YFT - Gaussian03 kodu.
- Bor atom topakları (2-20 aralığı).
- Düzlemsel ve Metalik.

M. Atış et al. "Density Functional Study of Physical and Chemical Properties of Nano Size Boron Clusters:  $B_n$  ( $n = 13 - 20$ )" Chin. J. Chem. Phys 2009, **22**, 380.

"Structure and Energetic of  $B_n$  ( $n = 2 - 12$ ) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.



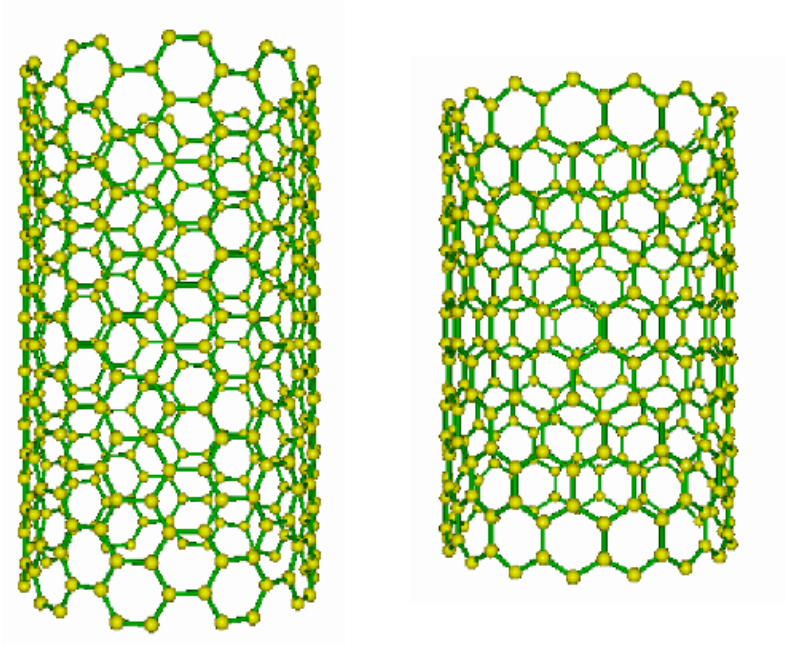
**$B_{12}$  icosahedral cluster**

- YFT - Gaussian03 kodu.
- Bor atom topakları (2-20 aralığı).
- Düzlemsel ve Metalik.
- $B_{12}$  icosohedral  $\implies$  düzlemsel yapı (LS Wang) .

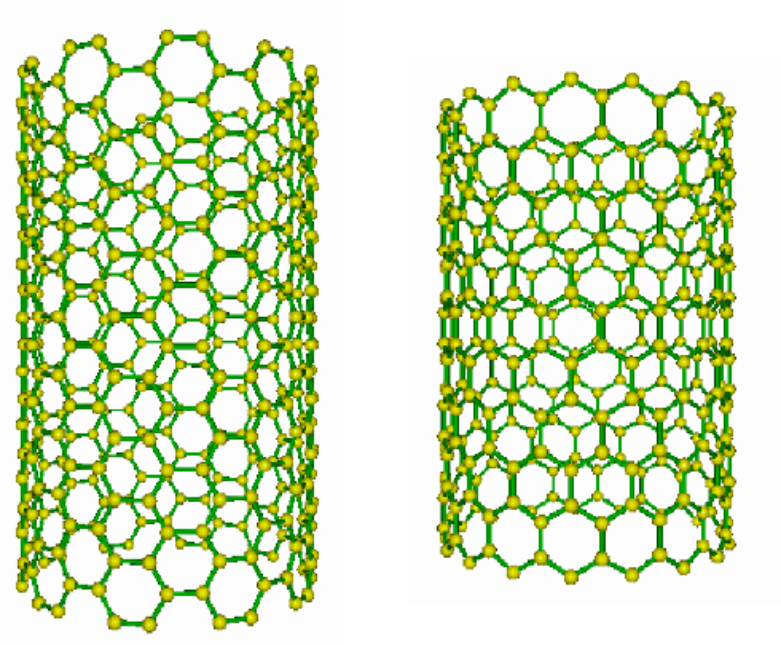
M. Atiş et al. "Density Functional Study of Physical and Chemical Properties of Nano Size Boron Clusters:  $B_n$  ( $n = 13 - 20$ )" Chin. J. Chem. Phys 2009, **22**, 380.

"Structure and Energetic of  $B_n$  ( $n = 2 - 12$ ) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.

- SBMD. Karbon Nano Tüp.



G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.

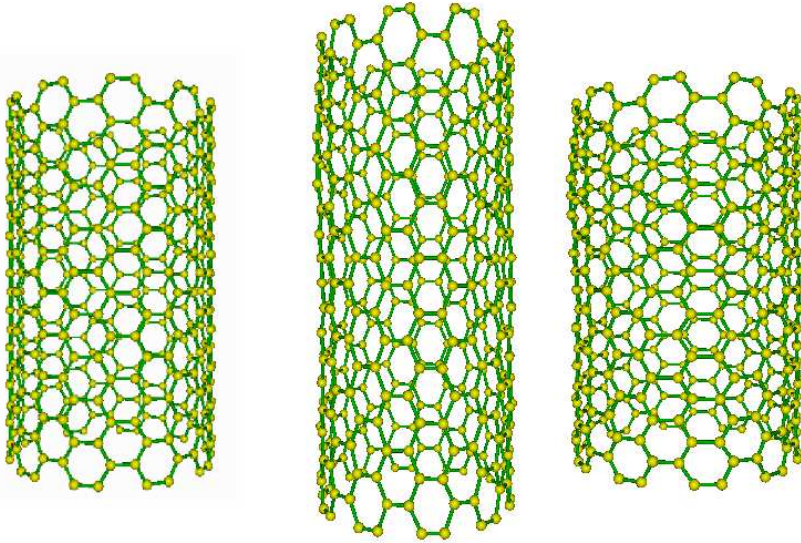


- SBMD. Karbon Nano Tüp.
- Sol:  $10 \times 10 \Rightarrow$  Metalik.  
Sağ:  $17 \times 0 \Rightarrow$  Yarı iletken.

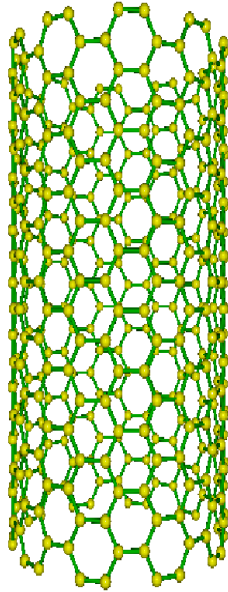
G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



- SBMD. Karbon Nano Tüp.
- Sol:  $10 \times 10 \Rightarrow$  Metalik.  
Sağ:  $17 \times 0 \Rightarrow$  Yarı iletken.
- Çelikten 100 kat daha güçlü ve ağırlığı çeliğin ağırlığının 6'da 1'i kadar.

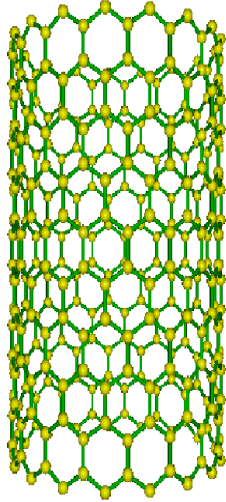


G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



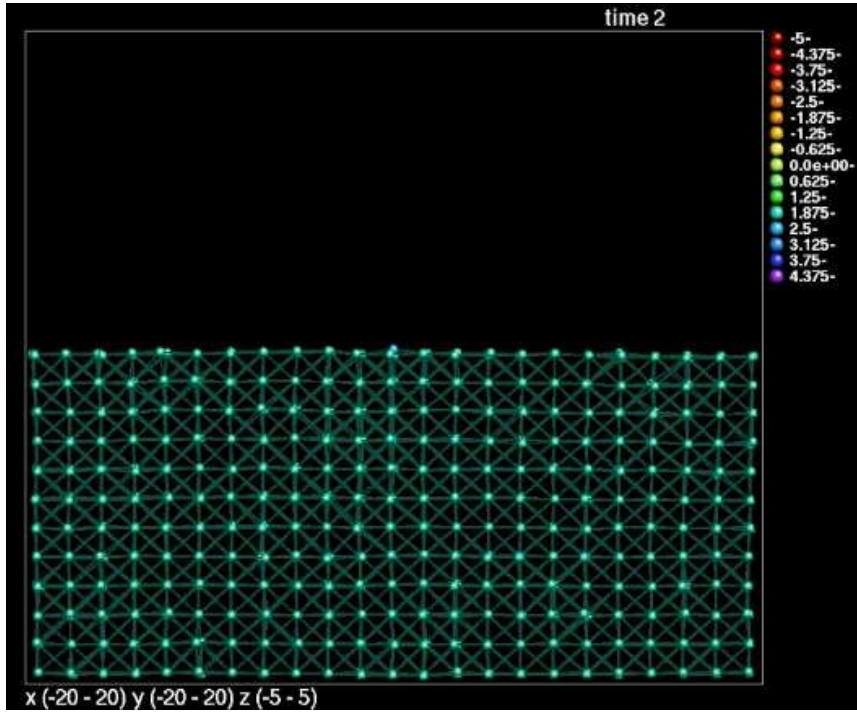
- SBMD. Karbon Nano Tüp.
- Sol:  $10 \times 10 \Rightarrow$  Metalik.  
Sağ:  $17 \times 0 \Rightarrow$  Yarı iletken.
- Çelikten 100 kat daha güçlü ve ağırlığı çeliğin ağırlığının 6'da 1'i kadar.
- %23 germe.

G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



- SBMD. Karbon Nano Tüp.
- Sol:  $10 \times 10 \Rightarrow$  Metalik.  
Sağ:  $17 \times 0 \Rightarrow$  Yarı iletken.
- Çelikten 100 kat daha güçlü ve ağırlığı çeliğin ağırlığının 6'da 1'i kadar.
- %23 germe.
- %8 bastırma.

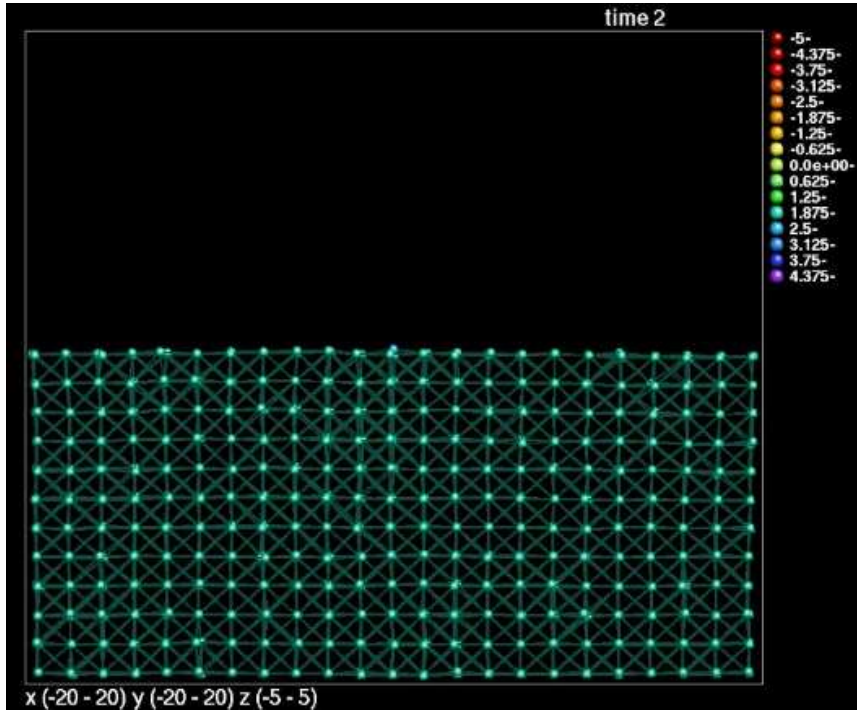
G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



AMD. İyon-yüzey.

M. Atiş et al. "Surface modification by 1 keV ion impact: molecular dynamics study of an  $Ar^+ - Ni(100)$  collision system" Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2008, **16** 035003 .

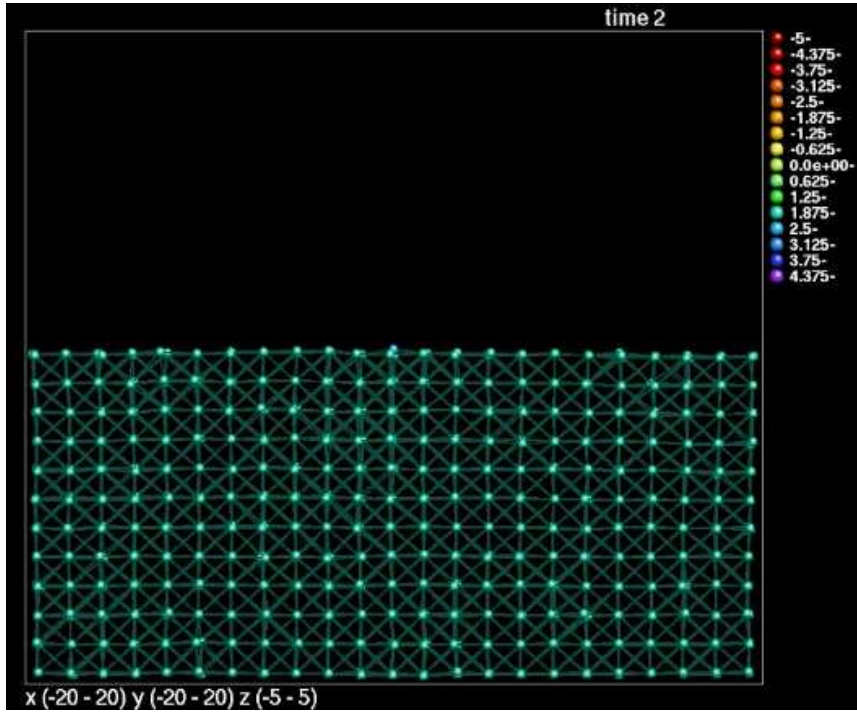
"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)"  
Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.



- AMD. İyon-yüzey.
- $Ar^+ - Ni(100)$  çarpışma sistemi.

M. Atış et al. "Surface modification by 1 keV ion impact: molecular dynamics study of an  $Ar^+ - Ni(100)$  collision system" Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2008, **16** 035003 .

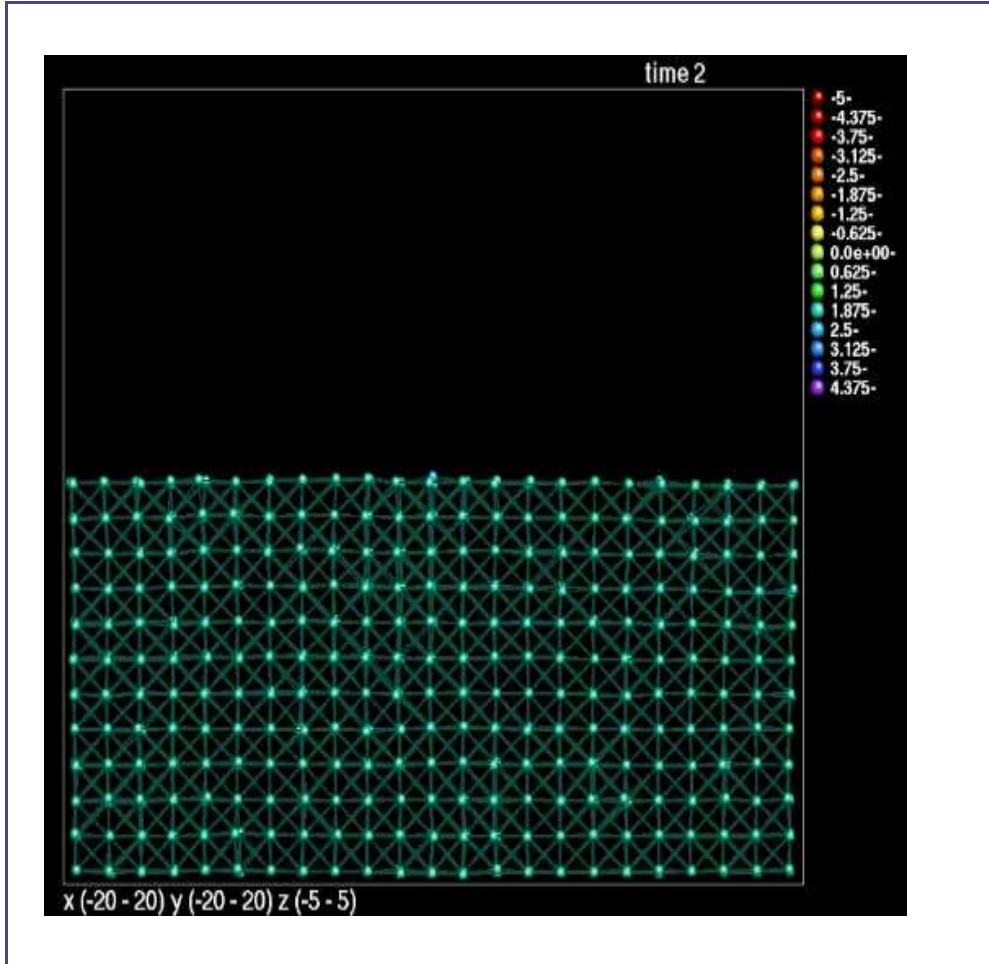
"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)" Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.



- AMD. İyon-yüzey.
- $Ar^+ - Ni(100)$  çarpışma sistemi.
- 1 keV enerjili Ar iyonu

M. Atış et al. "Surface modification by 1 keV ion impact: molecular dynamics study of an  $Ar^+ - Ni(100)$  collision system" Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2008, **16** 035003 .

"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)" Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.



- AMD. İyon-yüzey.
- $Ar^+ - Ni(100)$  çarpışma sistemi.
- 1 keV enerjili Ar iyonu
- Kopartma miktarı (sputtering yield); 3.2

M. Atış et al. "Surface modification by 1 keV ion impact: molecular dynamics study of an  $Ar^+ - Ni(100)$  collision system" Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2008, **16** 035003 .

"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)"

Dinlediğiniz  
için  
teşekkür  
ederim

- AMD. İyon-yüzey.
- $Ar^+ - Ni(100)$  çarpışma sistemi.
- 1 keV enerjili Ar iyonu
- Kopartma miktarı (sputtering yield); 3.2
- .

M. Atış et al. "Surface modification by 1 keV ion impact: molecular dynamics study of an  $Ar^+ - Ni(100)$  collision system" Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2008, **16** 035003 .

"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)" Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.