



Nanobilimde Modelleme ve Simülasyon Uygulamaları

Kocaeli Nanoteknoloji Günleri'11, Kocaeli

Cem Özdoğan

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

Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Bölümü , Çankaya Üniversitesi, 06530 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.

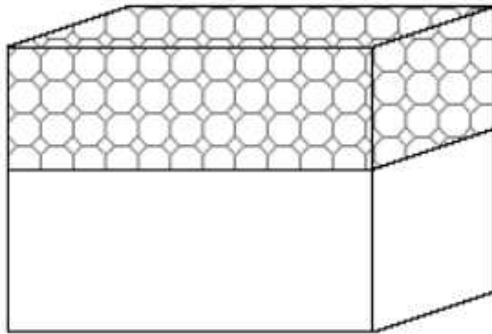
- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.

- 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.

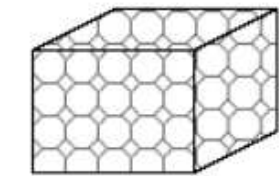
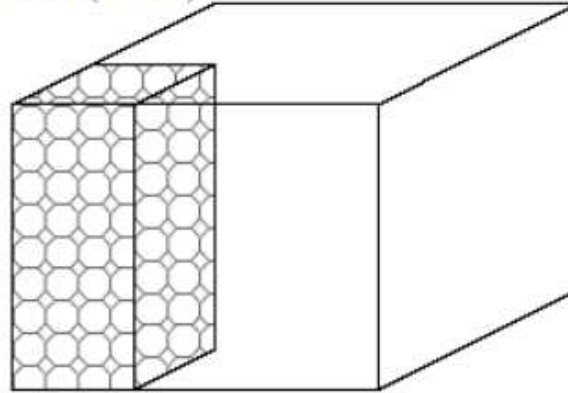
- Nano ölçek seviyesinde malzemelerin özellikleri makroskopik ölçekten tamamen farklıdır.
- Malzemenin büyüklüğü nanometre boyutuna inince, birçok özel ve yeni kimyasal ve fiziksel özellikler ortaya çıkmaktadır.
- Bir nanometre içine yan yana ancak 2-3 atom dizilebilir.
- Yaklaşık 100-1000 atom bir araya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

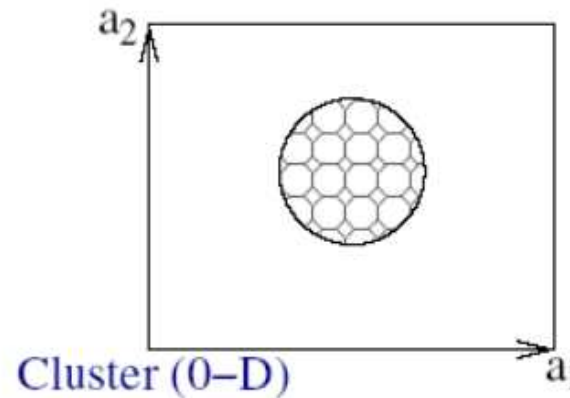
Surface (2-D)



Wire (1-D)



Crystal (3-D)



Cluster (0-D)

Nano Yapıların Temsili Resimleri.

Tianshu Li, First Principle Simulations in Nano-science.



- Nanobilim;

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

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

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

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

- Nanobilim;
 - Ortaya çıkan yeni davranışların kuvantum kuramı yardımı ile anlaşılması.
 - Kuvantum 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/sentezlemesi.

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

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

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

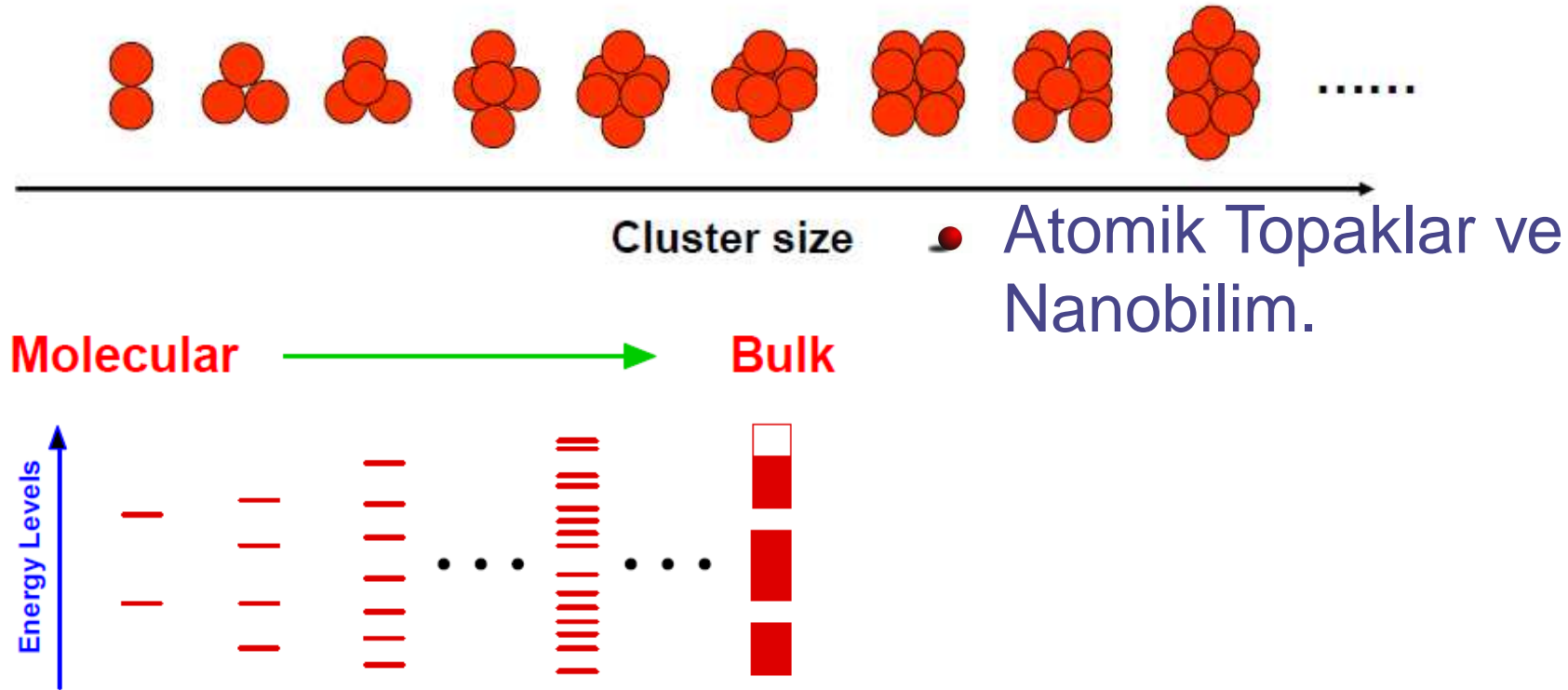
1. Üretim ve Uygulama

- "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.

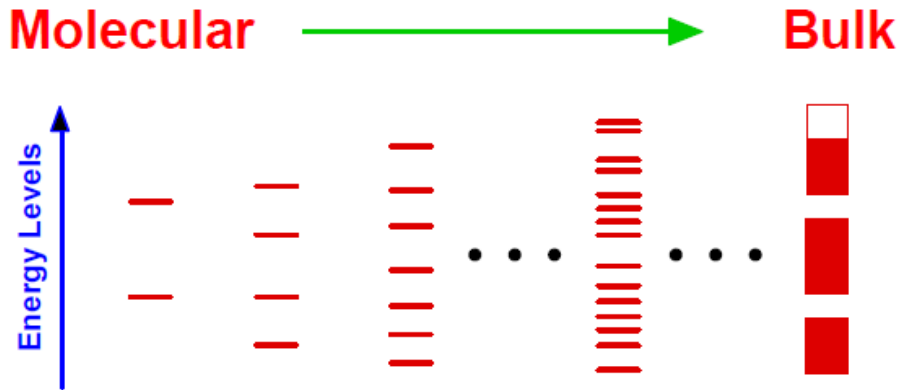
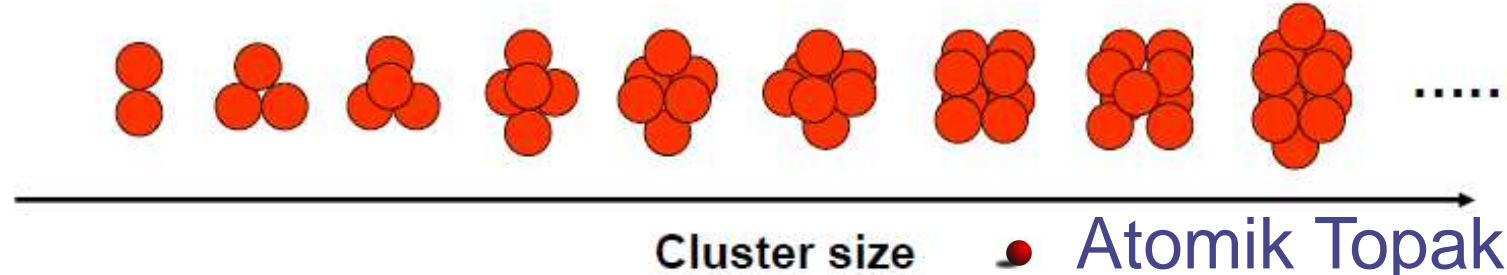
- Nanobilim/teknolojide temel yaklaşımlar:
 1. Üretim ve Uygulama
 - "Aşağıdan yukarıya" olan yaklaşım; malzemeler ve cihazlar kimyasal olarak monte edilmiş moleküler bileşenlerden yapılır.
 - "Yukarıdan aşağıya" (lithography) olan yaklaşım; atomik seviyede kontrol olmaksızın daha büyük parçalardan yapılır.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



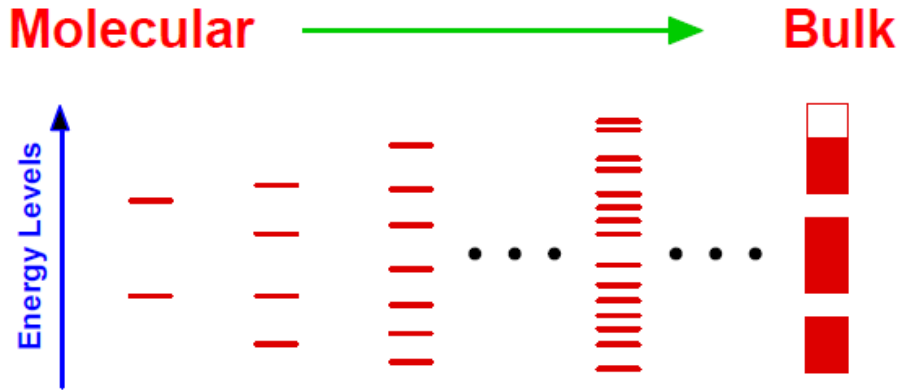
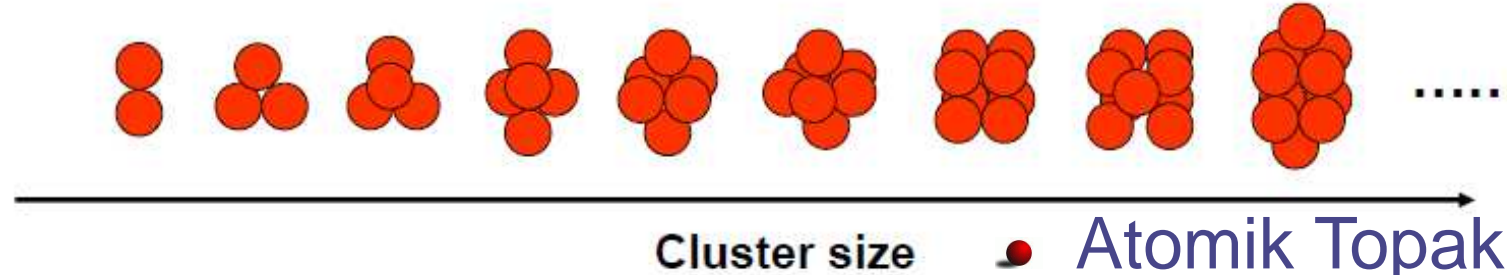
Lai-Sheng Wang, Probing the Electronic Structure and Chemical Bonding of Boron Clusters Using Photoelectron Spectroscopy of Size-Selected Cluster Anions.



• Atomik Topaklar ve Nanobilim.

• Nanobilimin "Aşağıdan yukarıya" yaklaşımı.

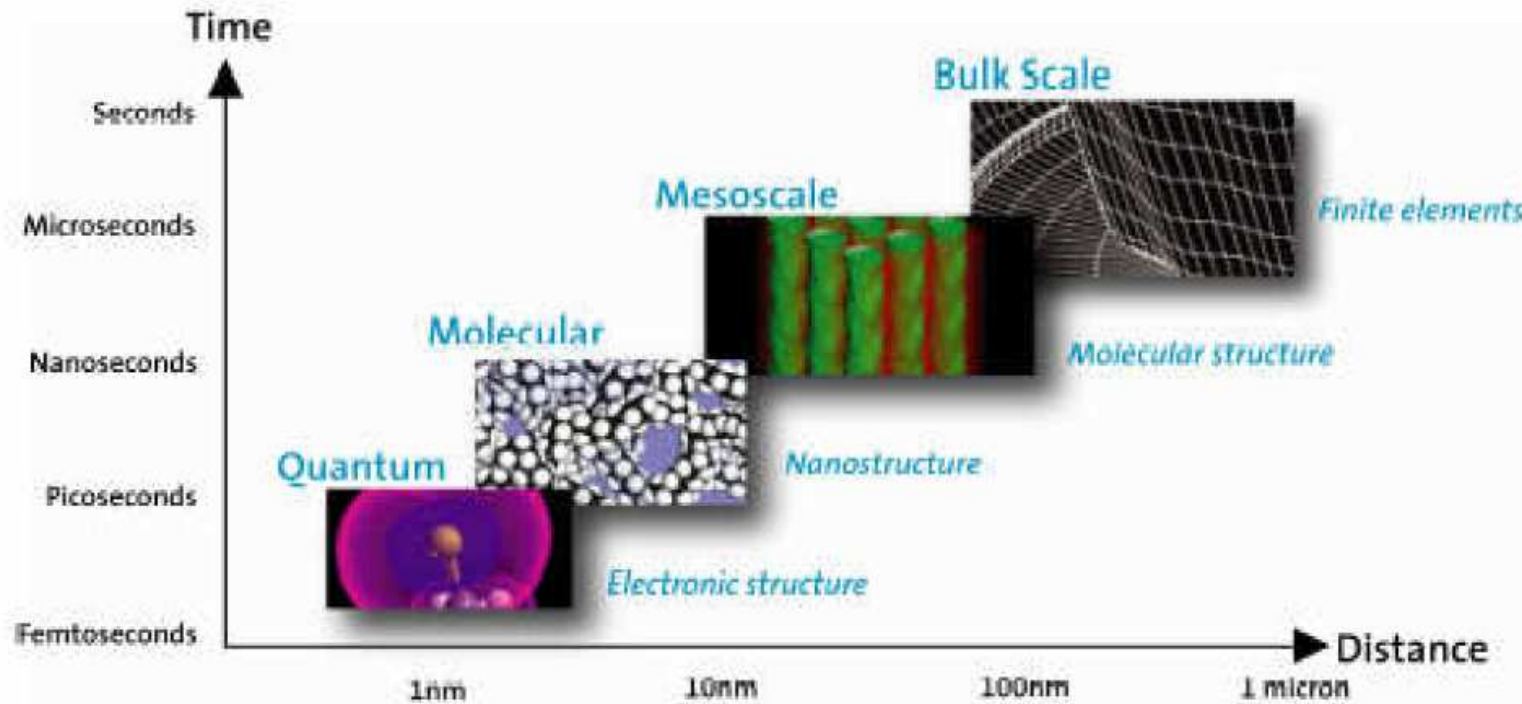
Lai-Sheng Wang, Probing the Electronic Structure and Chemical Bonding of Boron Clusters Using Photoelectron Spectroscopy of Size-Selected Cluster Anions.



- 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 kuvantum mekaniği yasalarından bulunabilir.

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

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

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

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

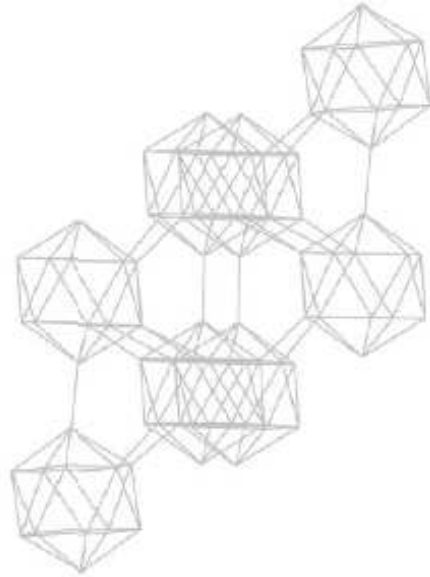
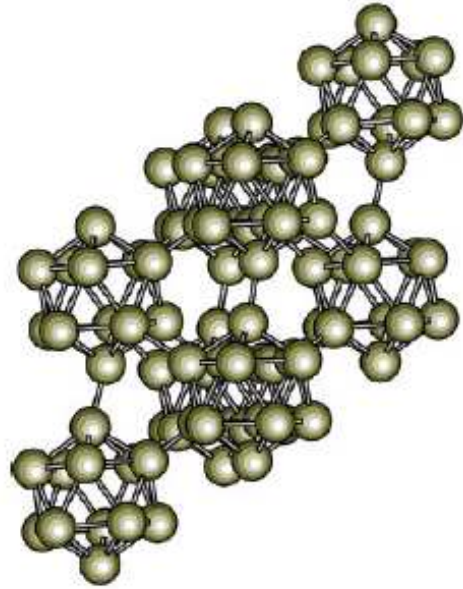
- En geniş ve çok kullanılan yöntemdir.
- Sonlu sistemler; molekül.
- İstatiksel çok-cisim yöntemi.

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.
- İstatiksel çok-cisim yöntemi.
- Kuantum Ölçeği.

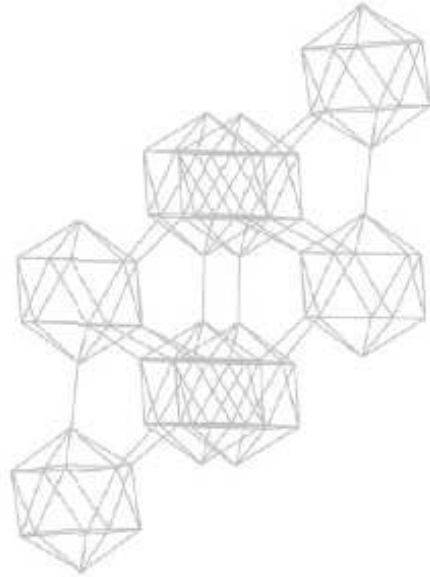
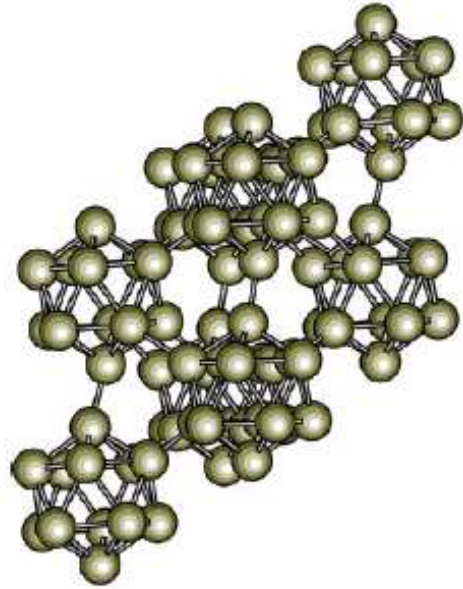
Yöntem
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (YFT)
Kuantum Kimyası
Kuantum Monte Carlo
“Ab initio“ Moleküler Dinamiği (MD)
- Sıkı Bağ MD Yöntemi (SBMD)
- Ampirik MD (AMD)

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



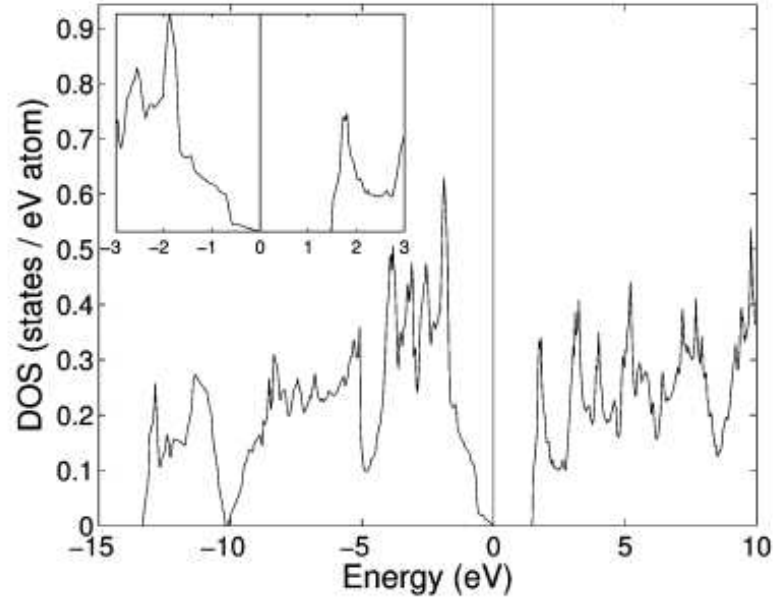
- YFT - VASP kodu.

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



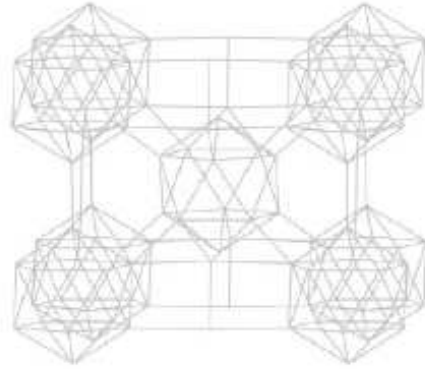
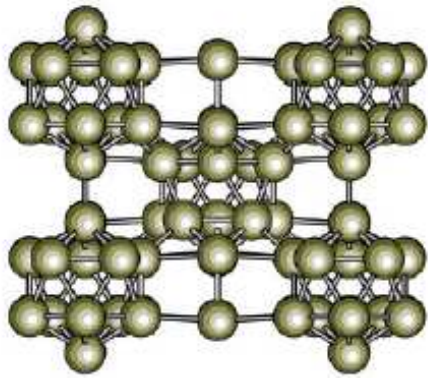
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$ rhombohedral elemental bor yapısu.

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



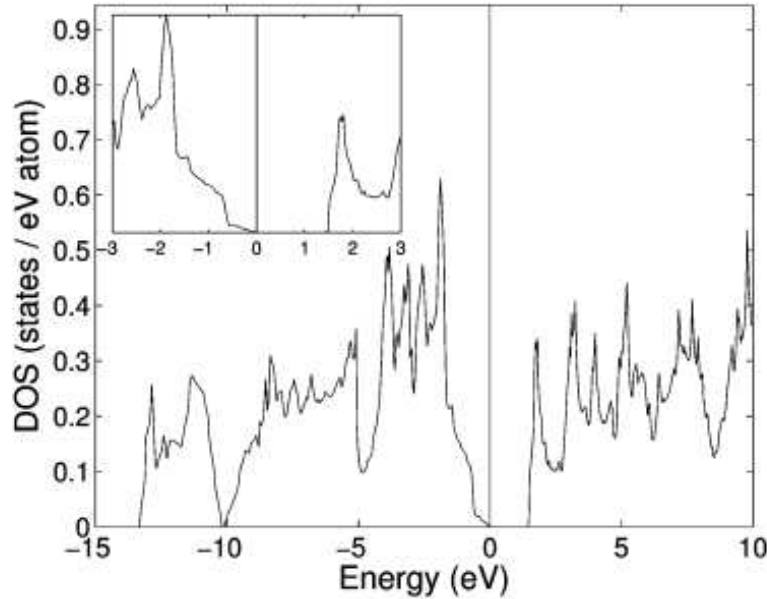
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$ rhombohedral elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.65 (1.50) eV.

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



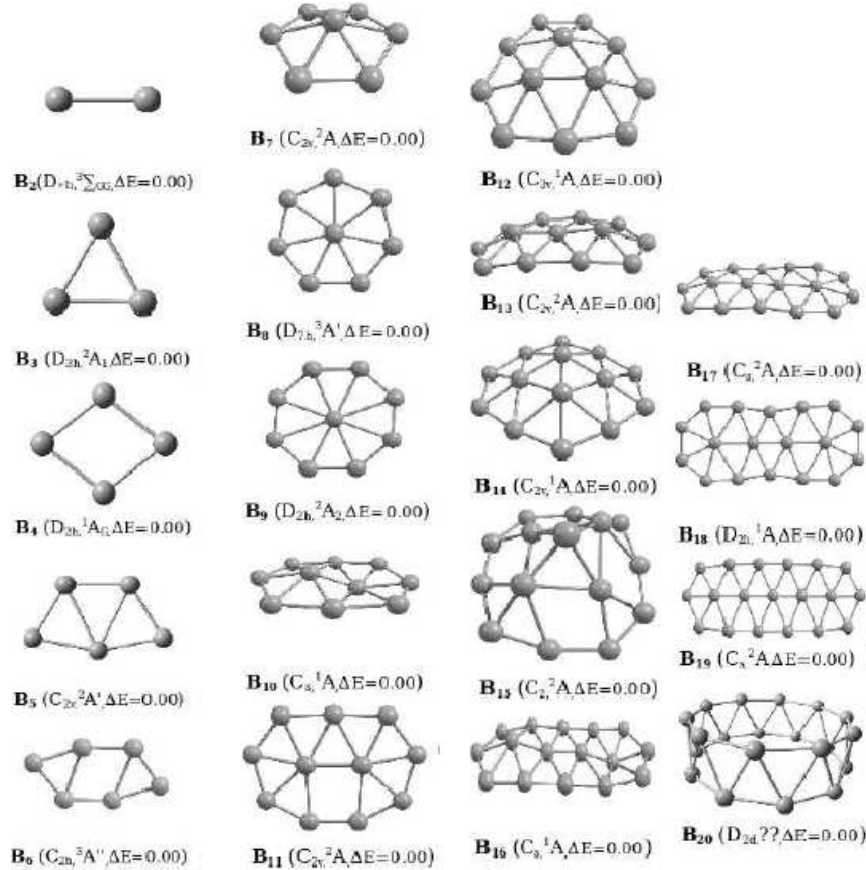
- YFT - VASP kodu.
- $\alpha - B_{12}$ rhombohedral elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.65 (1.50) eV.
- γ elemental bor yapısı.

C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of α - and γ -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.
- γ elemental bor yapısı.
- DOS. Band aralığı 2.50 (1.63) eV.

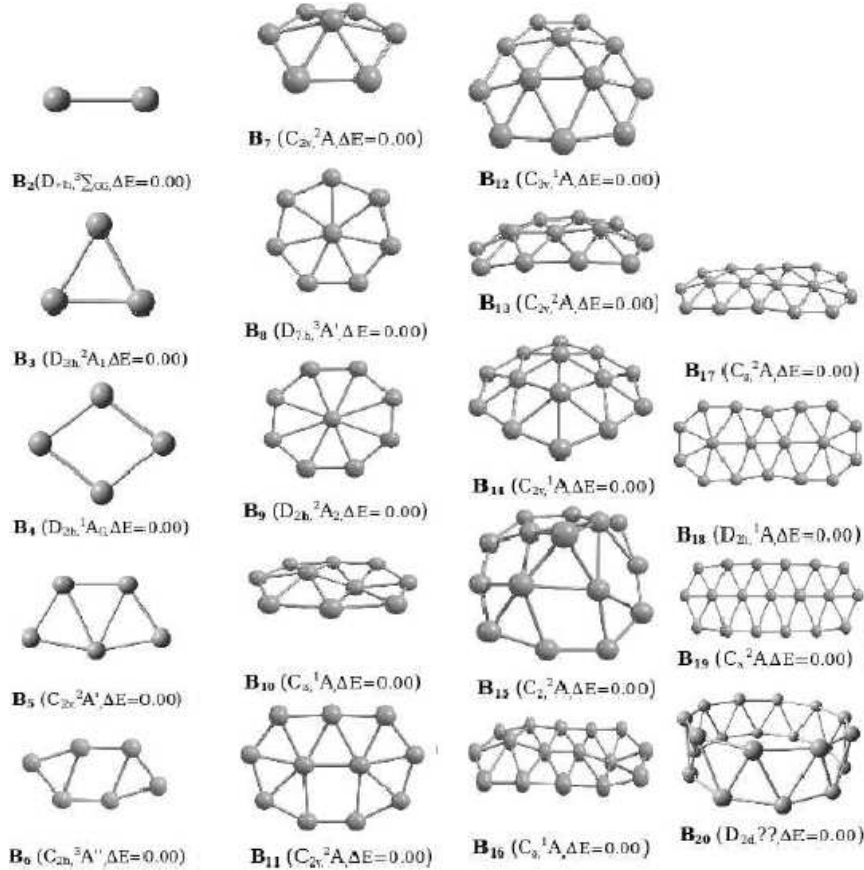
C. Özdoğan et.al. "The Unusually Stable B100 Fullerene, Structural Transitions in Boron Nanostructures, and a Comparative Study of α - and γ -Boron and Sheets", J. Phys. Chem. C 2010, **114**, 4362.



- 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.

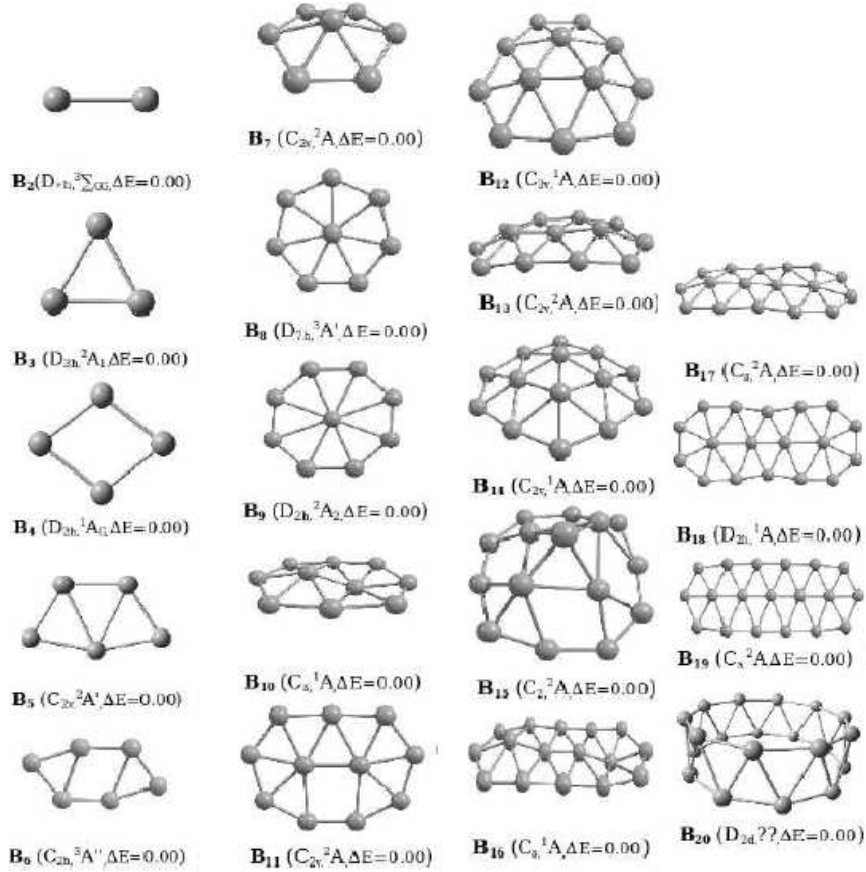
"Structure and Energetic of B_n ($n = 2 - 12$) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.



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

M. 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.

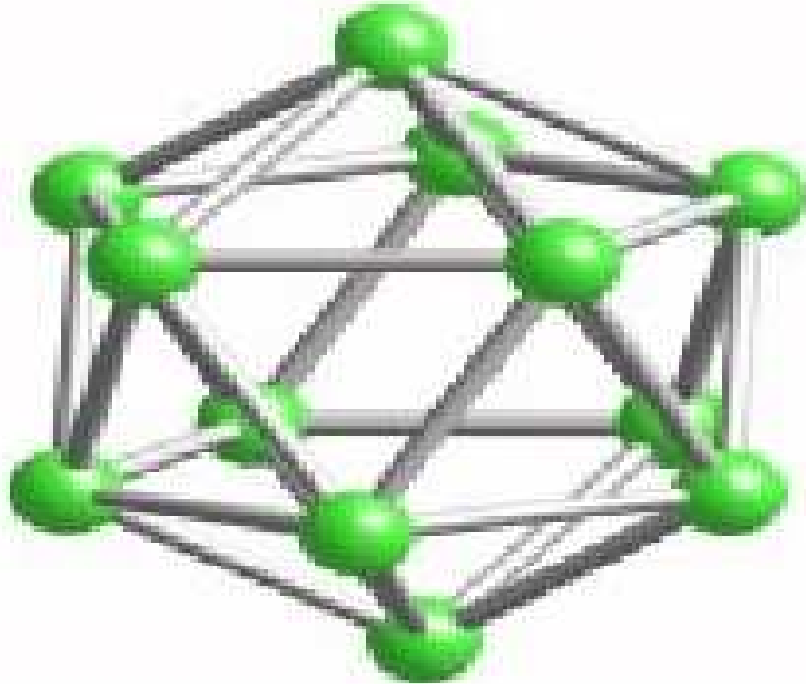
"Structure and Energetic of B_n ($n = 2 - 12$) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.



- 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.



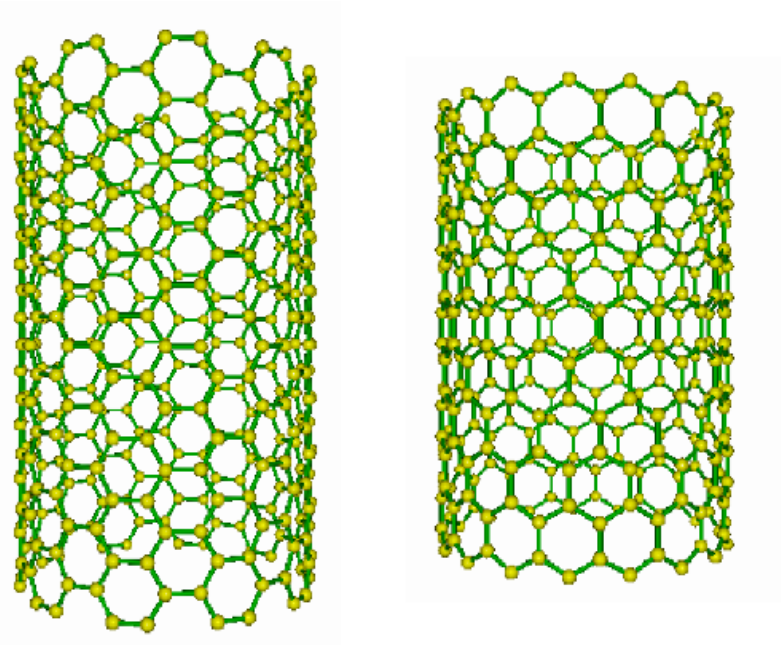
B_{12} icosahedral cluster

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

M. 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.

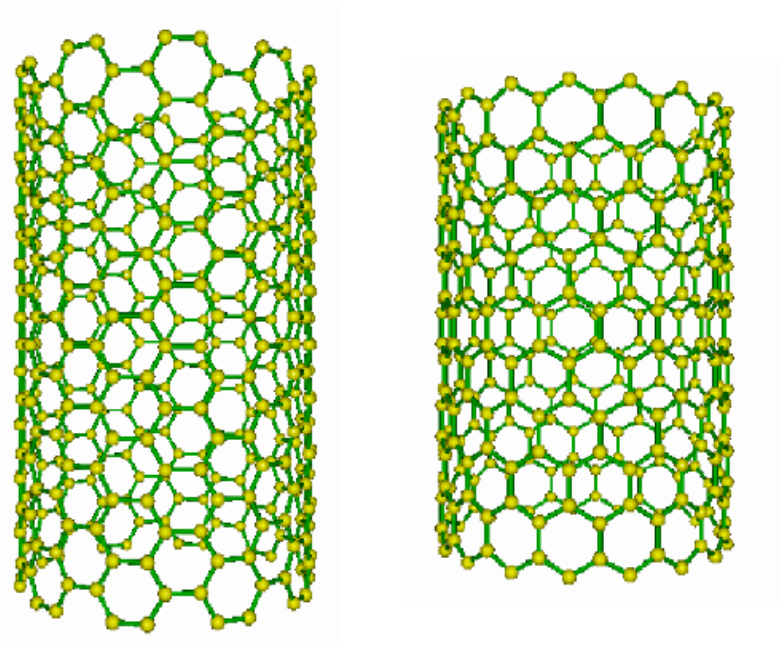
"Structure and Energetic of B_n ($n = 2 - 12$) Clusters: Electronic Structure Calculations" Int J Quantum Chem 2007, **107**, 729.

- SBMD. Karbon Nano Tüb.



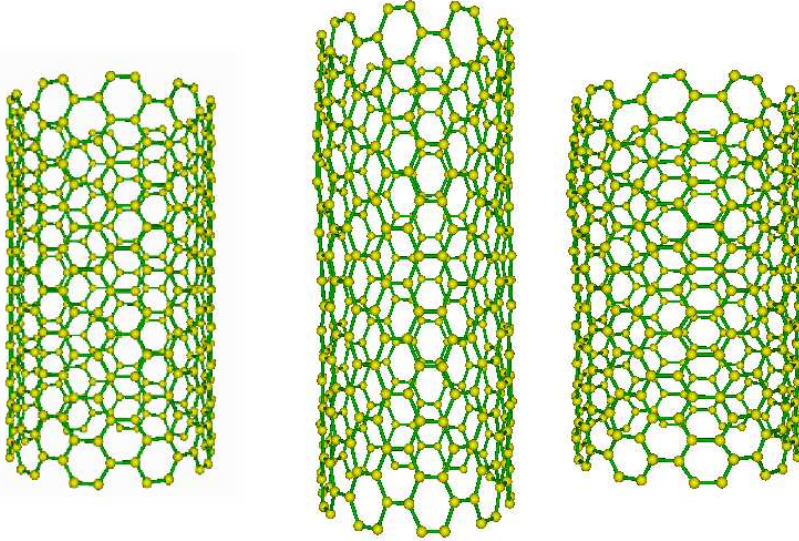
G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.

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

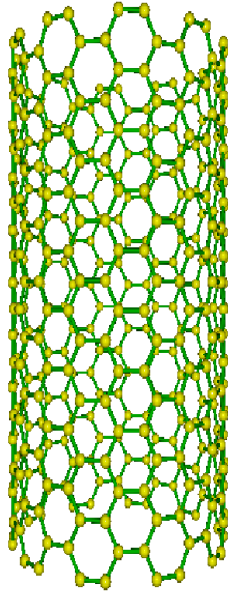


G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.

- SBMD. Karbon Nano Tüb.
- 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.

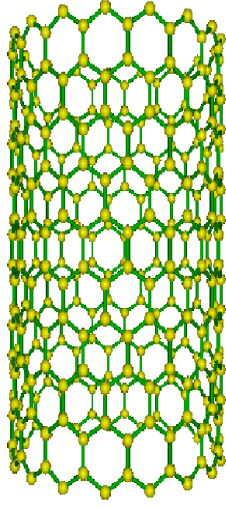


G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



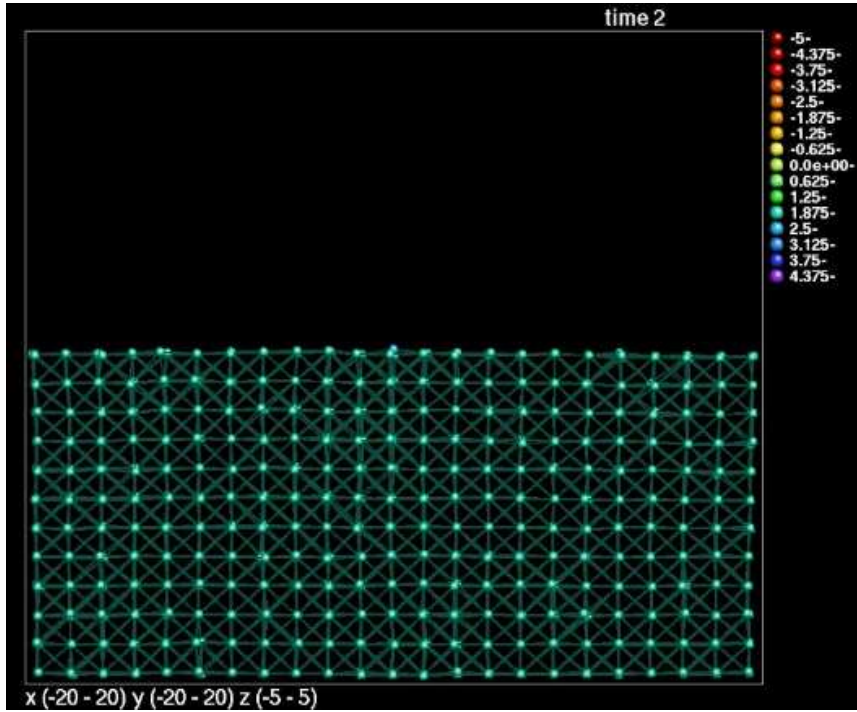
- SBMD. Karbon Nano Tüb.
- Sol: $10 \times 10 \Rightarrow$ Metalik.
Sağ: $17 \times 0 \Rightarrow$ Yarı iletken.
- Çelikten 100 kat daha güçlü ve ağırlığı çeliğin ağırlığının 6'da 1'i kadar.
- %23 germe.

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 Tüb.
- 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.

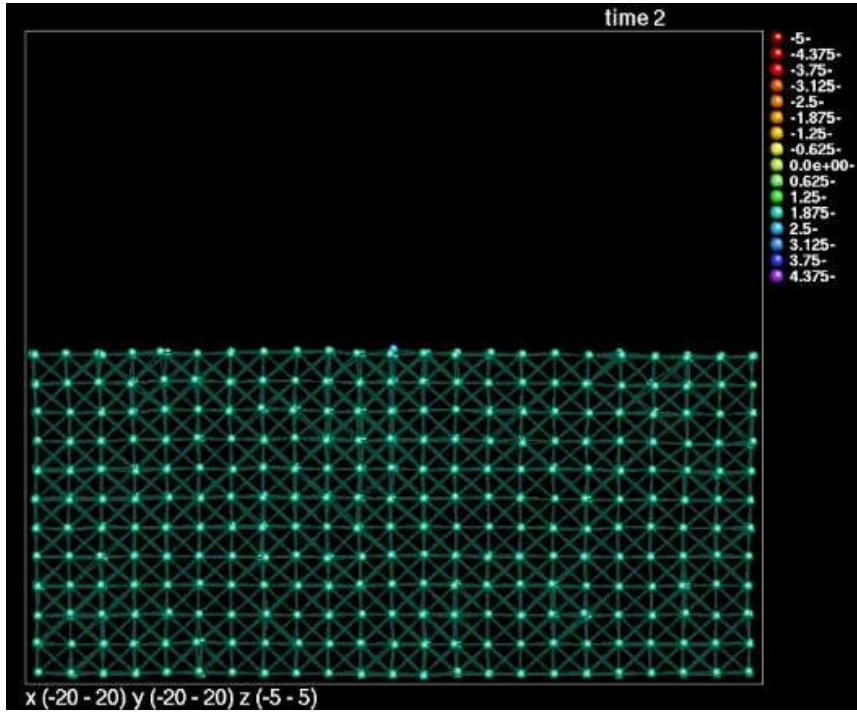
G. Dereli et al. "Structural stability and energetics of single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain" 2003, Phys. Rev. B **67**, 035416.



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 .

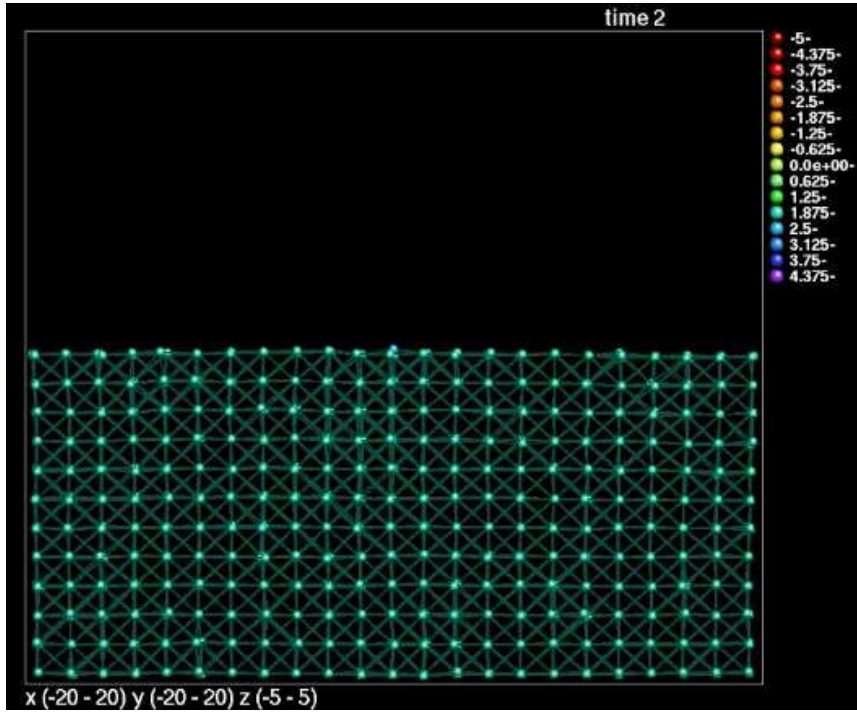
"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)" Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.



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

M. 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 .

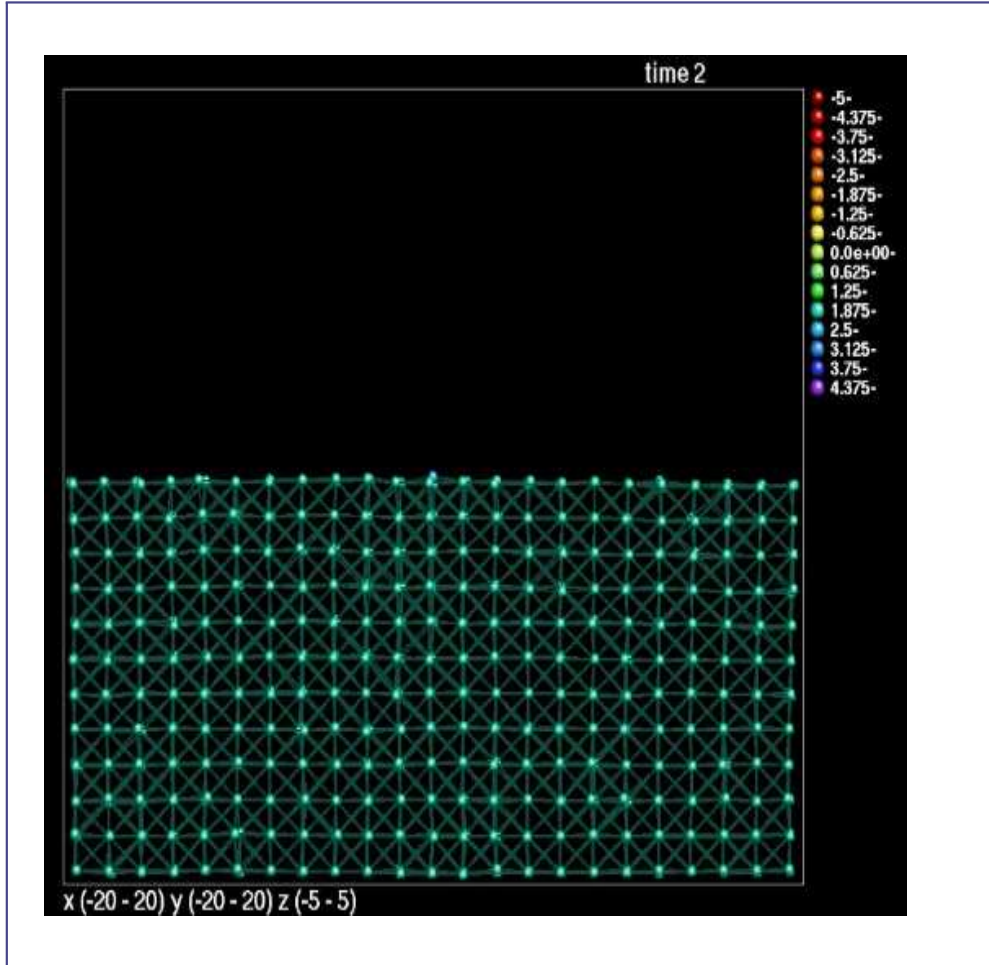
"Parallelization of a molecular dynamics simulation of an ion-surface collision system: Ar-Ni(100)" Int. J. Mod. Phys. C 2005, **16**, 969.



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

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.
- 1 keV enerjili Ar iyonu
- Kopartma miktarı; 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.