

7.5.3

Karbon Nanotüp Simülasyonu: $O(N)$, Paralel, Sıkıbağ Moleküler Dinamik Yöntemi

Gülay Dereli^a, Cem Özdoğan^b

^aODTU Fizik Bölümü, 06531 Ankara

^bÇankaya Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, 06530 Ankara

9 Kasım 2001

Abstract

- Mekanik özellikleri (Hafifliği, yüksek elastik modüsü, yüksek ısı ve elektrik iletkenliği ve gözüken en dayanıklı fiber olma ihtimalleri)
- Elektronik özellikleri (Yapılarındaki değişikliğe (chirality) bağlı olarak metalik ya da yarı iletken özellik göstermesi, elastik/plastik yapı deformasyonları ile elektronik özellikleri değiştirebilmesi)

Bu özellikleri ile Karbon Nanotüpler yüksek bir teknolojik potansiyele sahiptirler.

- Sıkıbağ Moleküler Dinamik simülasyonunda matris diyagonalleştirme veya dalga fonksiyonlarının ortogonalasyonu sonucunda eldeki algoritmaların karmaşıklığı (complexity) N^3 gibidir (N atom sayısı olmak üzere). Bu bilgisayar kapasitesi açısından incelenen sistem büyüklüğünü kısıtlamaktadır