



**NANOTÜPLERİN DAVRANIŞLARININ FARKLI
YÜKLER ALTINDA SONLU ELEMANLARLA
İNCELENMESİ**

Sümeyya Hilal YILDIZ

Danışman: Prof.Dr. Sadri ŞEN

Yüksek Lisans Tezi

Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı

2022

(Her hakkı saklıdır)

T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

**NANOTÜPLERİN FARKLI YÜKLER ALTINDA DAVRANIŞLARININ SONLU
ELEMENLARLA İNCELENMESİ**

(Investigation of Behavior of Nanotubes Under Different Loads with Finite Elements)

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Sümeyya Hilal YILDIZ

Danışman: Prof. Dr. Sadri ŞEN

Erzurum
Haziran, 2022



FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Graduate School of Natural and
Applied Sciences

T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü
TEZ KABUL VE ONAY TUTANAĞI

**NANOTÜPLERİN DAVRANIŞLARININ FARKLI YÜKLER ALTINDA SONLU
ELEMENLARLA İNCELENMESİ**

Prof.Dr. Sadri ŞEN danışmanlığında, Sümeyya Hilal YILDIZ tarafından hazırlanan bu çalışma, .../.../20... tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Makine Mühendisliği Anabilim Dalı Konstrüksiyon ve İmalat Bilim Dalı'nda Yüksek Lisans tezi olarak **oybirliği / oy çokluğu** (.../...) ile kabul edilmiştir.

Jüri Başkanı: Prof.Dr.Sadri ŞEN
Atatürk Üniversitesi

Aslı Islak İmzalıdır

Danışman: Prof.Dr.Sadri ŞEN
Atatürk Üniversitesi

Aslı Islak İmzalıdır

Jüri Üyesi: Prof.Dr. Ferhat Bülbül
Erzurum Teknik Üniversitesi

Aslı Islak İmzalıdır

Jüri Üyesi: Dr.Ögr.Üyesi Ruhi YEŞİLDAL
Atatürk Üniversitesi

Aslı Islak İmzalıdır

Enstitü Yönetim
Kurulunun .../.../... tarih
ve sayılı kararı.

Bu tezin Atatürk Üniversitesi Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği'nin ilgili maddelerinde belirtilen şartları yerine getirdiğini onaylarım.

Prof.Dr. Saltuk Buğrahan CEYHUN

Enstitü Müdürü

Aslı Islak İmzalıdır

T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ REKTÖRLÜĞÜ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ

ETİK BİLDİRİM VE İNTİHAL BEYAN FORMU

Yüksek Lisans Tezi olarak Prof.Dr. Sadri ŞEN danışmanlığında sunulan “Nanotüplerin Davranışlarının Farklı Yükler Altında Sonlu Elemanlarla İncelenmesi” başlıklı çalışmanın tarafımızdan bilimsel etik ilkelere uyularak yazıldığını, yararlanılan eserlerin kaynakçada gösterildiğini, Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından belirlenmiş olan Turnitin Programı benzerlik oranlarının aşılmadığını ve aşağıdaki oranlarda olduğunu beyan ederiz.

Tez Bölümleri	Tezin Benzerlik Oranı (%)	Maksimum Oran (%)
Giriş	0	30
Kuramsal Temeller	16	30
Materyal ve Metot	9	35
Araştırma Bulguları ve Tartışma	0	20
Sonuçlar ve Öneriler	0	20
Tezin Geneli	9	25

Not: Yedi kelimeye kadar benzerlikler ile Başlık, Kaynakça, İçindekiler, Teşekkür, Dizin ve Ekler kısımları tarama dışı bırakılabilir. Yukarıdaki azami benzerlik oranları yanında tek bir kaynaktan olan benzerlik oranlarının %5'den büyük olmaması gerekir.

Sunulan bilgilerin doğru olduğunu, aksi halde doğacak hukuki sorumlulukları kabul ettiğimizi beyan ederiz.

Tez Yazarı (Öğrenci)	Tez Danışmanı
SÜMEYYA HİLAL YILDIZ	PROF.DR.SADRI ŞEN
24.6.2022	24.6.2022
İmza: Aslı Islak İmzalıdır	İmza: Aslı Islak İmzalıdır

* Tez ile ilgili YÖKTEZ’de yayınlamasına ilişkin bir engelleme var ise aşağıdaki alanı doldurunuz.

☐ Tezle ilgili patent başvurusu yapılması / patent alma sürecinin devam etmesi sebebiyle Enstitü Yönetim Kurulunun/....../.... tarih ve sayılı kararı ile teze erişim 2 (iki) yıl süreyle engellenmiştir.

☐ Enstitü Yönetim Kurulunun/....../.... tarih ve sayılı kararı ile teze erişim 6 (altı) ay süreyle engellenmiştir.

TEŞEKKÜR

Öncelikle yüksek lisansa başladığım günden beri desteğini bir an olsun eksiltmeyen hem akademisyen hem de mühendis olarak örnek aldığım ve meslek hayatım boyunca örnek almaya devam edeceğim değerli danışman hocam Prof. Dr. Sadri ŞEN'e en içten teşekkürlerimi sunuyorum.

Benim ve kardeşlerimin iyi bir eğitim alabilmemiz için büyük çaba sarf eden rahmetli babam Bahattin YILDIZ'a sonsuz şükranlarımı sunuyorum.

Yüksek lisansa başladığım günden beri desteklerini esirgemeyen amcam Prof. Dr. Erol FEYZULLAHOĞLU'na da teşekkürü borç bilirim.

Başta annem Hülya YILDIZ, ablam Feyza Nur YILDIZ, kardeşim Başak Betül YILDIZ, halam Aysel YILDIZ, dayım Murat ALTUNKAYNAK, amcalarım Adnan FİDAN ve Oğuz FEYZULLAHOĞLU'na her zaman yanımda olup beni destekledikleri için sonsuz teşekkürlerimi sunuyorum.

Sümeyya Hilal YILDIZ

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

NANOTÜPLERİN FARKLI YÜKLER ALTINDA DAVRANIŞLARININ SONLU ELEMANLARLA İNCELENMESİ

Sümeyya Hilal YILDIZ

Danışman: Prof. Dr. Sadri ŞEN

Amaç: Bu çalışmada tek duvarlı karbon nanotüplerin ve çift duvarlı karbon nanotüplerin farklı yükler altında ve farklı koşullarda elastiklik modülü değerindeki değişimi sonlu elemanlar yöntemi kullanarak incelemek amaçlanmıştır.

Yöntem: Bu çalışma sonlu elemanlar yönteminin bilgisayar destekli uygulaması olan ANSYS Mechanical APDL programı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Çalışma üç kısımdan oluşmaktadır. Birinci kısımda karbon nanotüpler Nanotube Modeler programında oluşturulmuştur ve analiz aşamasında kullanılacak forma getirilmiştir. İkinci kısımda oluşturulan modeller ANSYS Mechanical APDL programında input kodu girilerek analiz edilmiştir ve son aşamada program çıktısı olarak alınan reaksiyon kuvveti yardımıyla elastiklik modülü değerleri hesaplanmış ve sonuçlar incelenmiştir.

Bulgular: Tek duvarlı KNT’lerde zikzak tip için tüp boyu 4nm olduğu durumda elastiklik modülü 2,883TPa ile en yüksek değerini, 8nm olduğu durumda 2,821TPa ile en düşük değerini almıştır. Koltuk tip için tüp boyu 4nm olduğunda elastiklik modülü 2,907TPa ile en yüksek değerini, 10nm tüp boyunda 2,829TPa ile en düşük değerini almıştır. Tüp çapına göre değerlendirme yapıldığında en yüksek değer 2,907TPa en düşük değer 2,825TPa’dır. Çift duvarlı zikzak karbon nanotüplerde en yüksek elastiklik modülü değeri 4,28 TPa civarında en düşük elastiklik modülü değeri 4 TPa civarında gözlemlenmiştir. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde elastiklik modülünün en yüksek değeri 4,20 TPa civarında en düşük değeri 4,103 TPa civarındadır.

Sonuç: Tek duvarlı KNT’lerde elastiklik modülü değerleri tüp çapı büyüdükçe genel olarak artmış, tüp boyu uzadıkça genel olarak azalmıştır. Çift duvarlı KNT’lerde elastiklik modülü değerleri iç tüp çapı büyüdükçe artmıştır. Çift duvarlı koltuk KNT’lerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri başlangıçta azalmış daha sonra artmıştır, zikzak tip çift duvarlı KNT’lerde ise başlangıçta artmış daha sonra azalmış ve yeniden artmıştır.

Anahtar Kelimeler: karbon nanotüpler, çok duvarlı karbon nanotüpler, sonlu elemanlar, elastiklik modülü.

Haziran 2022, 140 sayfa

ABSTRACT

MASTER'S THESIS

INVESTIGATION OF BEHAVIOR OF NANOTUBES UNDER DIFFERENT LOADS WITH FINITE ELEMENTS

Sümeyya Hilal YILDIZ

Supervisor: Prof. Dr. Sadri ŞEN

Purpose: In this study, it is aimed to study the change in the modulus of elasticity of single-walled carbon nanotubes and double-walled carbon nanotubes under different loads and under different conditions using the finite element method.

Method: This study was carried out using the ANSYS Mechanical APDL program, which is a computer-aided application of the finite element method. The study consists of three parts. In the first part, carbon nanotubes were created in the Nanotube Modeler program and put into the form to be used in the analysis stage. The models created in the second part were analyzed by entering the input code in the ANSYS Mechanical APDL program and the elasticity modulus values were calculated with the help of the reaction force obtained as the program output at the last stage and the results were examined.

Findings: In single-walled KNTs, the elasticity modulus was the highest value with 2,883TPa in the case where the tube length was 4nm for the zigzag type, and the lowest value with 2,821TPa in the case where it was 8nm. For this type, when the tube length is 4nm, the modulus of elasticity has received its highest value with 2,907TPa, and the lowest value with 2,829TPa with a tube length of 10 nm. When evaluating according to the tube diameter, the highest value is 2,907 TPa and the lowest value is 2,825TPa. In double-walled zigzag carbon nanotubes, the highest modulus of elasticity was observed around 4,28 TPa, and the lowest modulus of elasticity was observed around 4 TPa. In this type of double-walled carbon nanotubes, the highest value of the modulus of elasticity is around 4,20 TPa, and the lowest value is around 4,103 TPa.

Results: In single-walled CNTs, the modulus of elasticity values increased in general as the tube diameter increased, and decreased in general as the tube length increased. In double-walled KNTs, the modulus of elasticity values increased as the inner tube diameter increased. As the tube length length increased in double-walled seat KNTs, the modulus of elasticity values decreased initially and then increased, while in zigzag type double-walled KNTs, they initially increased, then decreased and increased again.

Keywords: carbon nanotubes, multi-walled carbon nanotubes, finite element, modulus of elasticity.

June 2022, 140 pages

İÇİNDEKİLER

TEZ KABUL TUTANAĞI	i
ETİK BİLDİRİM VE İNTİHAL BEYAN FORMU	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
İÇİNDEKİLER	vi
TABLolar DİZİNİ	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
KISALTMALAR ve SEMBOLLER DİZİNİ	xvi
GİRİŞ	1
KURAMSAL TEMELLER	2
Nanoteknoloji	2
Nanoteknoloji nedir?	2
Nanoteknoloji'nin amacı ve kullanım alanları	2
Nanotüp	3
Karbon Nanotüp	3
Karbon Nanotüplerin Atomik Yapısı	5
Karbon Nanotüp Çeşitleri ve İlgili Yapılar	8
Karbon Nanotüplerin Sentezlenme Yöntemleri (Küçükoyıldırım 2012)	11
Geçmişte Yapılmış Çalışmalar	15
Yapılan Bazı Çalışmaların Konulara Göre Dağılımı	27
Sonlu Elemanlar Yöntemi (SEY)	27
Sonlu Elemanlar Problem Tipleri (Liu,2003)	30
Sonlu Elemanlar Eleman Tipleri	31
Çubuk Eleman Hesabı	34
Kiriş Eleman Formülasyonu	36
Kiriş Elemanların Elastik Modülünün Hesaplanması	39
Modellemeler	42
Sonlu Elemanlar Modelleri	42
MATERYAL VE METOD	45
Modellerin Oluşturulması	45
ANSYS Mechanical APDL	45
Nanotube Modeler	50

Modelleme Aşamaları	51
Karbon Nanotüplerin Adlandırılması.....	51
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Adlandırılması	51
Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Adlandırılması	54
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Oluşturulması Ve ANSYS Mechanical APDL’e Aktarılması.....	56
Çift duvarlı karbon nanotüplerin oluşturulması ve ANSYS Mechanical APDL’e aktarılması	78
ARAŞTIRMA BULGULARI	89
Analiz Verileri.....	89
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Analiz Sonunda Elde Edilen Veriler.....	89
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Boyundaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi	95
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Çapındaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi	100
Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Analiz Sonunda Elde Edilen Veriler.....	105
Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Boyundaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi	110
Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Çapındaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi	112
SONUÇLAR VE ÖNERİLER	116
KAYNAKÇA	119

TABLÖLAR DİZİNİ

Tablo 1. KNT'lerin sınıflandırması	7
Tablo 2. 1 nm'lik tüp çapına sahip koltuk ve zikzak KNT'lerde boyca değişimin elastiklik modülüne etkisi.....	25
Tablo 3. Yapılan çalışmaların konulara göre dağılımı	27
Tablo 5. Oluşturulan nanotüplerin n,m ve L değerleri.....	52
Tablo 6. Oluşturulan nanotüplerin adlandırılması	53
Tablo 7. Oluşturulan zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi.....	55
Tablo 8. Oluşturulan koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi.....	55
Tablo 9. 1. GRUP modellerinin tüp çapı, tüp boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik modülü değerleri.....	90
Tablo 10. 2. GRUP modellerinin tüp çapı, tüp boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik modülü değerleri.....	90
Tablo 11. 3. GRUP modellerinin tüp çapı, tüp boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik modülü değerleri.....	91
Tablo 12. 4. GRUP modellerinin tüp çapı, tüp boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik modülü değerleri.....	91
Tablo 13. 5. GRUP modellerinin tüp çapı, tüp boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik modülü değerleri.....	92
Tablo 14. 1.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	93
Tablo 15. 2.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	93
Tablo 16. 3.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	94
Tablo 17. 4.GRUP Modellerinin Tüp Boyu, Kesit Alanı, Deplasmanı, Uygulanan Reaksiyon Kuvveti ve bu değerlerden elde edilen Elastiklik Modülü değerleri	94
Tablo 18. 5.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	95
Tablo 19. 1.GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri.....	101
Tablo 20. 2. GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri.....	101

Tablo 21. 3. GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri.....	102
Tablo 22. 4. GRUP için edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri	102
Tablo 23. 5. GRUP için edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri	103
Tablo 24. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp boyu, iç tüp çapı, dış tüp çapı ve elastiklik modülü değerleri	106
Tablo 25. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp boyu, iç tüp çapı, dış tüp çapı ve elastiklik modülü değerleri	107
Tablo 26. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp düğüm sayısı, dış tüp düğüm sayısı ve toplam düğüm sayısı değerleri.....	107
Tablo 27. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp düğüm sayısı, dış tüp düğüm sayısı ve toplam düğüm sayısı değerleri.....	107
Tablo 28. Zizak tip modellerin iç tüp çapı, dış tüp çapı, kesit alanı, tüp boyu, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	109
Tablo 29. Koltuk tip modellerin iç tüp çapı, dış tüp çapı, kesit alanı, tüp boyu, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri	110
Tablo 30. Çift duvarlı knt'lerde iç tüp çapına göre normalize edilmiş iç tüp çapı değerleri ve bunlara karşılık gelen elastiklik modülü değerleri	113

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1. Karbon nanotüp tipleri	6
Şekil 2. Ch vektörü.....	6
Şekil 3. Karbon Nanotüp Tipleri (a) Koltuk (b) Zikzak (c) Kiral	7
Şekil 4. Karbon nanotüplerin çeşitleri	8
Şekil 5. Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler	8
Şekil 6. Çok Duvarlı Karbon Nanotüp	9
Şekil 7. NanoHorn örnekleri	9
Şekil 8. Nanobud örneği.....	10
Şekil 9. Nano koni örneğ.....	10
Şekil 10. Lazerle aşındırma yöntemi şematik gösterimi	11
Şekil 11. Ark boşaltma yöntemi	12
Şekil 12. Kimyasal buhar biriktirme yöntemi	13
Şekil 13. Isıl kimyasal buhar biriktirme yöntemi	14
Şekil 14. Plazmayla güçlendirilmiş kimyasal buhar çökeltme yöntemi.....	15
Şekil 15. Farklı olarlarda KNT katkılı AlMg/KNT kompozitlerinin mikroyapıları.....	15
Şekil 16. Çekme testi öncesi ve sonrası numuneler	17
Şekil 17. Yükleme altında sırasıyla koltuk, zikzak ve kirial karbon nanotüplerin SE modeli. 20	
Şekil 18. Sonlu elemanlar modelinin genel yükleme durumu	23
Şekil 20. Analizden örnek görseller	24
Şekil 21. Tek duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modülüne tüp çapının değişiminin etkisi.....	26
Şekil 22. Fiziki problemde sonlu elemanlar yöntemine geçiş.....	28
Şekil 23. Sonlu elemanlar yöntemi ile dişli çark dişli	29
Şekil 24. 1 boyutlu problem örnek gösterim	30
Şekil 25. 1 boyutlu eleman (yay, kiriş, çubuk, boru)	30
Şekil 26. 2 boyutlu yüzey eleman örnek gösterim	31
Şekil 27 3 boyutlu Hacim Eleman Örnek Gösterimi.....	31
Şekil 28. Eksenel bir kuvvet etkisindeki, uniform prizmatik kiriş.....	32
Şekil 29. Cisme Farklı Yönlerden Kuvvet Uygulama.....	33
Şekil 30. 2018 Yılına kadar yayınlara ilişkin istatistikler: karbon nanoyapılarını temsil etmek için kullanılan çeşitli element türleri	34
Şekil 31. Çubuk elemanın yay gösterimi.....	34
Şekil 32. Kuvvet-Uzama diyagramı	35

Şekil 33. Basit düzlem kiriş eleman	36
Şekil 34. 2B ve 3B elemanların direngenlik eşitlikleri	37
Şekil 35. Moleküler mekanik teorisinde atomlar arası etkileşimler.....	40
Şekil 36. Atom Kinetiği	40
Şekil 37. Modelleme teknikleri (a) Moleküler dinamik yöntemi (b) Sürekli kabuk modeli (c) Sürekli katı model	44
Şekil 38. Preprocessor menüsü.....	47
Şekil 39. Solution menüsü.....	48
Şekil 40. POST 1 (General postprocessor).....	49
Şekil 41. POST26 (Time history postprocessor).....	49
Şekil 42. Nanotube modeller programı	50
Şekil 43. Nanotube Modeller Programından Tüp Çapı ve Düğüm Sayısı Okuma.....	51
Şekil 44. Tek duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi.....	52
Şekil 45. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi	54
Şekil 46. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi	54
Şekil 47. Nanotube modeller verilerin kaydedilmesi	56
Şekil 48. Düğüm noktalarının koordinatları.....	56
Şekil 49. Aktarma penceresi 1/3.....	57
Şekil 50. Aktarma penceresi 2/3.....	57
Şekil 51. Aktarma penceresi 3/3.....	58
Şekil 52. Birimleri nanometre' ye çevrilmiş düğüm koordinatları ve düğüm numaraları	58
Şekil 53. Düğüm koordinatlarının .csv uzantısıyla kaydedilmesi	59
Şekil 54. Noktalı virgülün virgüle dönüştürülmesi	59
Şekil 55. ANSYS APDL 111 isimli nanotüpün yükleme öncesi Görünümü-1.....	60
Şekil 56. ANSYS APDL 111 isimli nanotüpün yükleme öncesi görünümü-2	60
Şekil 57. 111 Nanotüpünün sınır şartları ve yüklemeler	61
Şekil 58. (a) 112 Nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) 113 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	61
Şekil 59. (a) 114 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 121 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	62
Şekil 60. (a) 122 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 123 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	62
Şekil 61. (a) 124 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 131 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	63

[illegible]

Şekil 79. (a) 334 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 342 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	72
Şekil 80. (a) 343 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 344 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	72
Şekil 81. (a) 411 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 412 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	73
Şekil 82. (a) 413 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 414 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	73
Şekil 83. (a) 421 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 422 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	74
Şekil 84. (a) 423 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 424 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	74
Şekil 85. (a) 432 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 433 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	75
Şekil 86. (a) 434 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 444 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	75
Şekil 87. (a) 512 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 513 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	76
Şekil 88. (a) 514 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 523 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	76
Şekil 89. (a) 524 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	
(b) 534 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	77
Şekil 90. 544 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi	77
Şekil 91. Z11 çift duvarlı karbon nanotüpünün üst görünümü	78
Şekil 92. Z11 Çift Duvarlı Nanotüpünün Yükleme ve Sınır Şartları	79
Şekil 93.(a) Z11 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z12	
nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	79
Şekil 94. (a) Z23 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z24	
nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	80
Şekil 95. (a) Z31 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z32	
nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	80
Şekil 96.(a) Z33 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z34	
nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	81
Şekil 97. (a) Z41 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z42	
nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	81

Şekil 98.(a) Z43 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z44	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	82
Şekil 99. (a) Z51 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z52	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	82
Şekil 100. (a) Z53 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z54	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	83
Şekil 101. (a) K11 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K12	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	83
Şekil 102.(a) K13 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K14	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	84
Şekil 103. (a) K21 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K22	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	84
Şekil 104.(a) K23 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K24	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	85
Şekil 105. (a) K31 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K32	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	85
Şekil 106. (a) K33 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K34	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	86
Şekil 107. (a) K41 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K42	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	86
Şekil 108. (a) K43 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K44	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	87
Şekil 109. (a) K51 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K52	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	87
Şekil 110.(a) K53 nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K54	
nanotüpünün çözünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi	88
Şekil 111. Zikzak (n,0) tip nanotüpler için tüp boyu- elastiklik modülü grafiği.....	96
Şekil 112. Koltuk (n,n) tip nanotüpler için tüp boyu- elastiklik modülü grafiği.....	96
Şekil 113. 1. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği	98
Şekil 114. 2. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği	98
Şekil 115. 3. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği	99
Şekil 116. 4. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği	99
Şekil 117. 5. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği ..	100
Şekil 118. L=10 nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi	103
Şekil 119. L=8 nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi	104

Şekil 120. $L=6$ nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi	104
Şekil 121. $L=4$ nm Tüp Boyunda Tüp Çapı- Elastiklik Modülü Değişimi	105
Şekil 122. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisi.....	111
Şekil 123. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisi.....	111
Şekil 124. $L= 10$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi.....	114
Şekil 125. $L= 8$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi	114
Şekil 126. $L= 6$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi	115
Şekil 127. $L= 4$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi	115

KISALTMALAR ve SEMBOLLER DİZİNİ

A	Tüp kesit alanı
AYD	Atom Yerleşim Düzeni
CNT	Carbon Nanotube
ÇDKNT	Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
d	Tüp Çapı
$d_{dış}$	Dış tüp çapı
$d_{iç}$	İç tüp çapı
E	Elastiklik Modülü
KÇÇ	Kafes, Çubuk, Çerçeve
KKÇ	Kiriş, Kafes, Çerçeve
KNK	Karbon Nanokoni
KNT	Karbon Nanotüp
KNTTP	Karbon Nanotüp Takviyeli Polimer
MC	Monte Carlo
MD	Moleküler Dinamik
MPGBC	Mikrodalga, Plazmayla Güçlendirilmiş Buhar Çökeltme
SDY	Sınır Değer Yöntemi
SEM	Scanning Electron Microscope (Taramalı elektron mikroskobu)
SEY/FEM	Sonlu Elemanlar Yöntemi
SFY	Sonlu Farklar Yöntemi
t	İki tüp arası mesafe
TDKNH	Tek Duvarlı Karbon Nanohorn
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
TGS	Termal Genleşme Sayısı
TPa	Terapaskal
ε	% uzama
σ	Gerilme

GİRİŞ

Teknoloji geliřtikçe, makro boyutta olan alıřmalarla yetinilmeyip nano boyuttaki alıřmalar da hız kazanmıřtır. Nanoteknoloji olarak adlandırılan bu alıřmalar son zamanlarda yoğun ilgi gren alıřmalardır. Gnmzde nanoteknoloji, atomların diziliřleri zerinde oynamalar yapabilme kabiliyetine de sahiptir.

Nanoteknoloji Yunanca cce anlamına gelen *nannos*, yine yunanca el iři veya sanat anlamına gelen *tekhné* ve bir konunun alıřması anlamına gelen *logia* kelimelerinden tremiřtir. Nanoteknoloji, ok genel anlamıyla, atomik boyutlarda yapıların ticari olarak kullanılmasıdır (Kutucu, 2010).

Nanoteknoloji kavramını ilk defa kullanan kiři Dr. Eric Drexler'dir. Massachussetts Teknoloji Enstits'ndeki eęitimi sresince, laboratuvarında alıřtıęı sırada biyolojik sistemlerden esinlenerek molekler boyutta makineler yapılabileceęini nermiř ve nanoteknolojik alıřmalar yapan Foresight Enstits'n Kaliforniya'da kurmuřtur (Anonim,2021, Kutucu 2010).

NASA bařta olmak zere, dnyanın birok yerinde uygulamada olan arařtırma merkezleri ve teknoloji enstitleri, arařtırmalarını nanoteknoloji alanında yrtmektedir.

Nonotp ise silindirik fullerencelerdir. Fullerence allotropik karbon modifikasyonudur. 60 karbon atomunun futbol topu řeklinde dzenlenerek oluřturulmuř malzemelerdir. Termodinamik aısından karbonun en kararlı formu normal kořullar altındaki grafen levhalar ve grafittir. Her atomun,  komřu atom ile baęı vardır (Anonim,2021).

Karbon nanotpler kabaca bir kenarı etrafında bklerek silindir řekli verilmiř grafen yapı olarak dřnlebilir. Karbon atomundan bařka atom iermez. 1991 yılında S. Iijima tarafından bulunmuřtur.

KURAMSAL TEMELLER

Nanoteknoloji

Nanoteknoloji 1959 yılında Richard Feynman adında bir fizikçi tarafından ortaya çıkmıştır. Nanoteknoloji 1 ile 100 nm skalasında çalışmaktadır ve nanoteknoloji sayesinde kaliteli, uzun ömürlü, ağır olmayan, küçük cihazlar üretilmektedir (Seyman,2010).

Nanoteknoloji nedir?

Nano, matematiksel bir ölçü basamağı olarak kullanılır ve herhangi bir ölçü biriminin milyarda biri anlamına gelmektedir. Nanoteknoloji ise maddeyi nano boyutta kullanma işlemidir.

Nano teknoloji; maddenin nanometre ölçeğinde yani moleküler düzeyde denetlenmesi yoluyla gerçekleştirilen yeni malzeme, cihaz ve sistemlerin tasarlanması ve ürün haline getirilmesine olanak sağlayan bir teknoloji dalıdır (Seyman,2010).

Nanoteknoloji'nin amacı ve kullanım alanları

Nanoteknoloji birçok bilim dalında kullanılmaktadır. Her bilim kendi alanında atomik boyutta çalışmalar göstermektedir. Bu nanoteknolojinin, hemen hemen her alanda kullanıldığının kanıtıdır. Elektron mikroskopunun bulunması ile, malzemeyi oluşturan elementlerin atomlarının diziliş şekilleri değiştirilerek malzeme üretilmeye başlanmıştır (Seyman,2010).

Nanoteknolojinin amacı kısaca aşağıdaki gibidir (Seyman,2010).

- Nano boyutta yapı analizleri
- Nano ölçekli yapı imalatı
- Nano hassasiyet
- Uygun yöntemler kullanılarak nano boyut ve makro boyutta bağın kurulması.

Nanoteknoloji'nin bazı kullanım alanları şöyledir (Seyman,2010);

- Malzeme Bilimi
- Elektronik
- Bilgisayar
- Eczacılık
- Tıp
- Biyoloji

- Kimya
- Fizik
- Matematik

Nanotüp

Teknolojinin hızlı bir biçimde gelişmesi ve nanoteknolojinin ortaya çıkmasıyla çağın en önemli konularından biri nano boyutu makro boyuta taşımak oldu. Nano parçacıklar, ince filmler, nanotüpler, nanotoplar ve nano halkalar gösterdikleri değişik fiziksel özellikleriyle çok geniş bir kullanım yelpazesine sahiptirler. Karbon nanotüpler önemli özelliklere sahip nano yapılardır (Seyman,2010).

Karbon Nanotüp

Evrende bulunan malzemelerin neredeyse tamamı üç boyutludur. Grafen ise teknolojiye önemli ölçüde gelişmelere yol açan bir element olan karbon allotropudur ve bal peteği benzeri yapısıyla iki boyutlu bir malzemedir. Bu malzemenin en önemli özelliği iletken olmasıdır. Elektrik, bu bal peteği şeklindeki grafen levha üzerinden çok hızlı iletim gücüne sahiptir. İletken malzemelerin çoğu metalik yapıdadır, ancak grafeni oluşturan atomlar karbon olduğundan grafen ametal yapıdadır. Bu yüzden, metal malzeme kullanmadan elektrik iletkenliği sağlanabilecek bir malzeme olan grafen yapı, araştırmalara büyük ölçüde konu olmuştur. Grafen malzeme iyi iletken özelliği dolayısıyla çok küçük alanlarda elektrik iletimi sağlamaktadır. Bu yüzden minyatürize edilmiş süper hızlı bilgisayar ve transistör uygulamalarında oldukça önemlidir.

Karbon nanotüpler (KNT-Carbon Nanotubes (CNT)) ise 1991 yılında Fulleren sentezinin küçük bir yan ürünü olarak keşfedildi. İlerleyen 14 yıl içinde, tek ve çok duvarlı karbon nanotüpün keşfi de dahil olmak üzere önemli bir ilerleme kaydedildi (Anonim, 2021). Hasarsız bir Karbon nanotüpün sağlamlığı kendi ağırlığının 300.000.000 katına dayanabilecek kadardır.

Karbon nanotüpün yapısını grafen levha oluşturmaktadır. Grafen levha atom yerleşim düzenine göre bir kenarı etrafında bükülüp boru haline getirildiğinde bu yapı karbon nanotüp yapı şeklinde adlandırılmaktadır. Grafen levha üzerindeki parametrelere göre de adlandırılması değişmektedir (Seyman,2010).

Karbon Nanotüplerin bazı özellikleri şöyledir (Seyman, 2010);

- Yüksek mukavemetli, rijit ve oldukça sünek yapı
- Tek ve çok duvarlı yapı .
- Çekme mukavemeti : 50-200 GPa
- Elastisite modülü: 1TPa veya 103 GPa
- % uzama miktarı: 5% - 20%
- Yoğunluğu düşük.
- Yapıya bağlı elektriksel iletken özellik gösterir.
- Yüksek erime sıcaklığına sahiptir.

Karbon nanotüp tarihi

Karbon nanotüpleri kullanarak daha yüksek özelliklere ulaşma arayışı, 1952'de Radushkevich ve Lukyanovich'in Sovyet Fiziksel Kimya Dergisi'nde yaklaşık 50 nm çapında grafitik karbondan yapılmış tüplerin görüntülerini ortaya çıkarmasıyla başladı. Bu, karbon nanotüplerin araştırılması ve geliştirilmesi için güçlü bir temel oluşturdu. Daha sonra 1955'te Hofer, Sterling ve Mc Cartney, boru şeklindeki karbon yapılarının büyümesini keşfettiler. M. L. Lieberman, bükülmüş ve balon benzeri grafitik filamentlerin büyümesini bildirdi ve 1971'de transmisyon elektron mikroskobu, bu tüplerin çok duvarlı karbon nanotüpler (ÇDKNT) olduğunu gösterdi (Manikandan ve ark., 2021)

Karbon nanotüplerin uygulama alanları

Karbon nanotüplerin uygulama alanları oldukça geniştir. Bunlardan bazıları şu şekildedir (Anonim,2022).

- Bisikletlerin bileşenleri
- Rüzgâr türbinleri
- Düz panel ekranlar
- Taramalı Prob mikroskopları
- Algılama cihazları
- Kayak eşyaları
- Beysbol sopaları
- Hokey sopaları
- Okçulukta kullanılan oklar

- Sörf tahtaları
- Elektrik devreleri
- Daha uzun ömürlü piller
- Çeşitli elektronik aletler
- Transistorlar

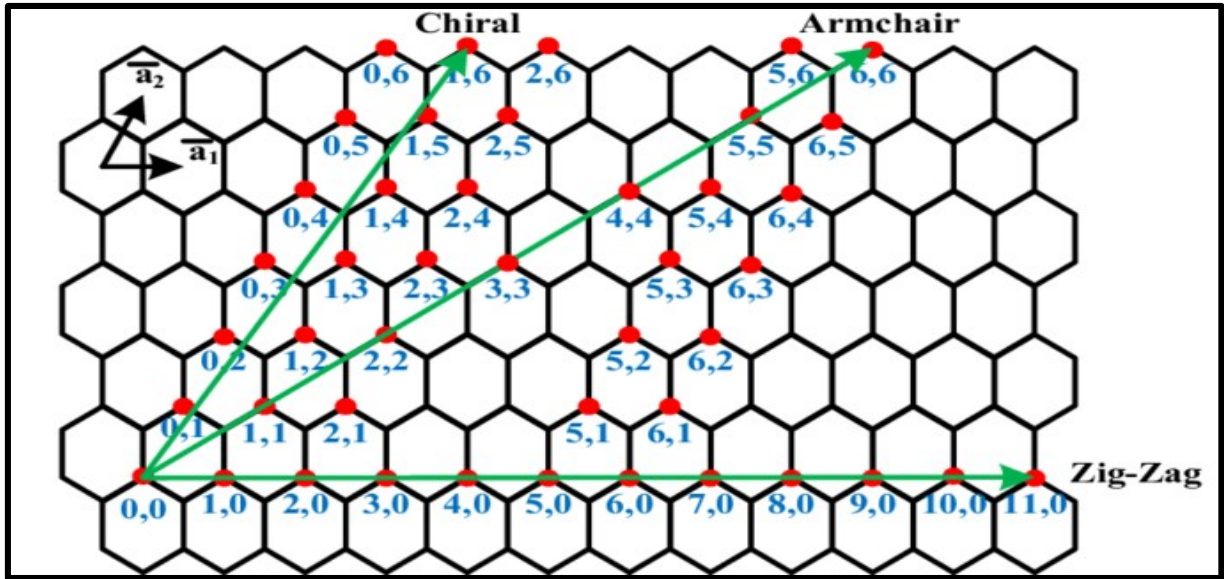
Karbon nanotüpler gelecekteki potansiyel kullanım alanları ise şu şekilde (Anonim,2022):

- Giyim (özellikle askeri alanda, kurşun geçirmez kıyafetler vb.)
- Yarı iletken materyaller
- Uzay araçları
- Uzay asansörleri
- Güneş panelleri
- Kanser tedavisi ve nanotıp
- Dokunmatik ekranlar
- Enerji depolama
- Optik
- Radar
- Biyoyakıt ve biyosensörler
- LCD'ler
- Mikroskopik test tüpleri
- Fiber internet
- Yakıt Hücreleri
- Çeşitli nanoteknolojik alanlar

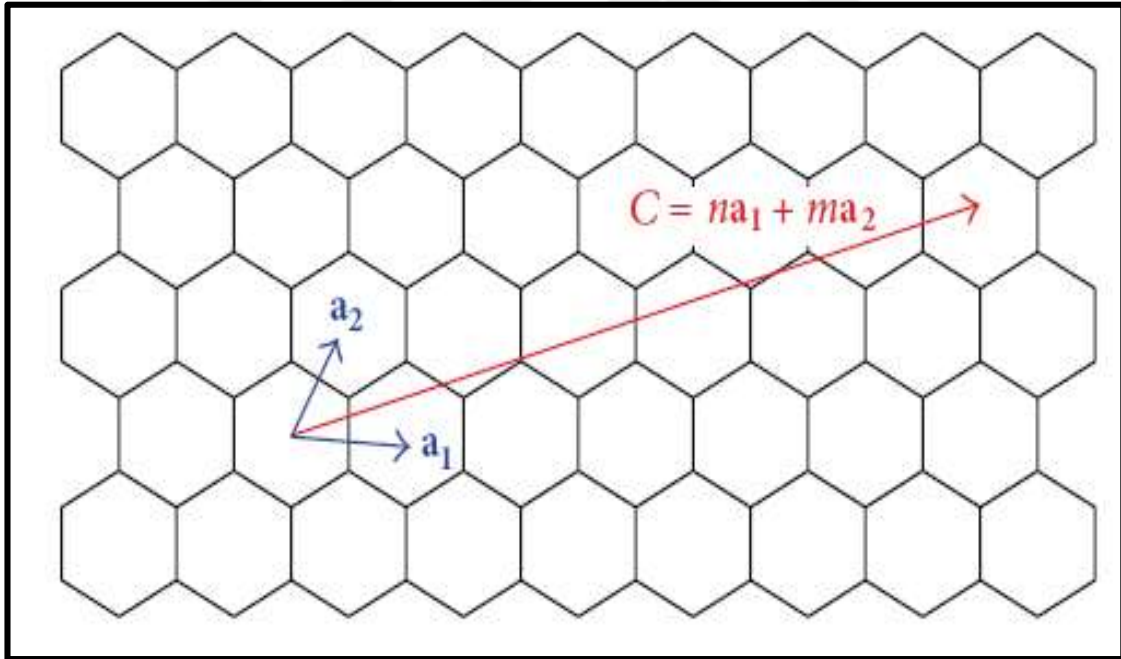
Karbon Nanotüplerin Atomik Yapısı

Yüksek çözünürlüklü mikroskopi tekniklerin kullanımıyla karbon nanotüplerin yapısal özellikleri incelenerek nanotüplerin iki boyutlu grafen levhanın rulo yapılma şekline bağlı olan "koltuk", "zikzak" ve "kiral " olmak üzere üç tip nanotüp olduğu bulunmuştur. Nanotüpün kiral vektörü yani Atom Yerleşim Düzeni (AYD) vektörü $C_h = na_1 + ma_2$, olarak tanımlanır. İki boyutlu grafen örgünün birim vektörleri a_1 ve a_2 'dir. n ve m katsayılarıdır. Diğer önemli parametre ise kiralite açısıdır. Grafen levha, nanotüpün silindirik kısmını oluşturmak üzere yuvarlandığında kiralite vektörünün uçları birbiriyle birleşir. Böylece kiralite vektörü, nanotüpün dairesel kesitinin çevresini oluşturur. m ve n 'nin farklı değerleri için farklı nanotüp yapıları oluşur.

Koltuk nanotüpler $n=m$ ve kiralite açısı 30° olduğunda, zikzak nanotüpler m ya da n 'den biri sıfır ve kiralite açısı 0° olduğunda oluşur. Kiralite açısının 0° - 30° arasında değer aldığı nanotüpler kiral nanotüpler olarak adlandırılır (Kutucu,2010).



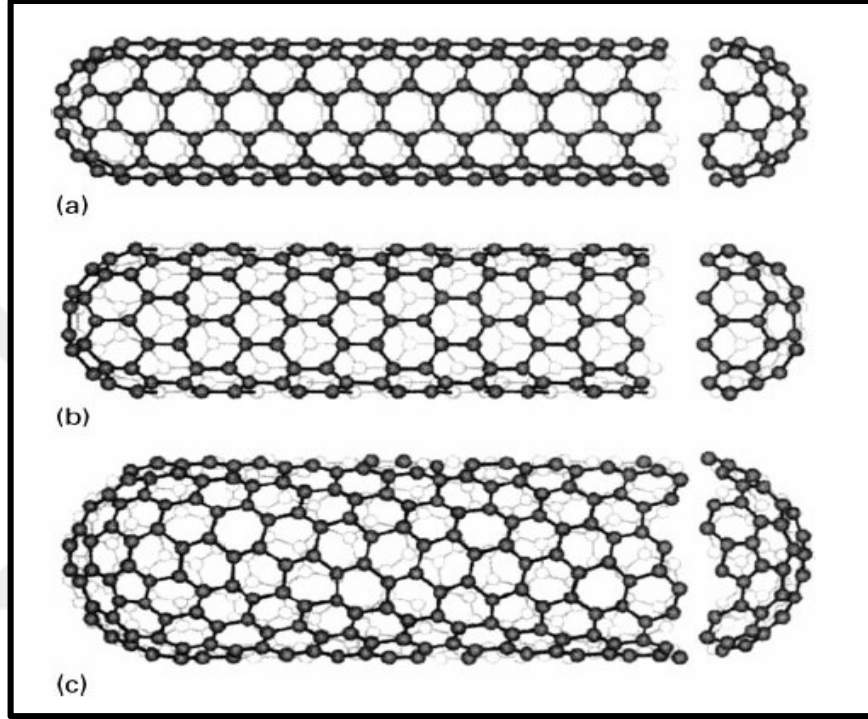
Şekil 1. Karbon nanotüp tipleri (Dadoria ve Khare,2019)



Şekil 2. Ch vektörü (Muhammad ve ark.,2015)

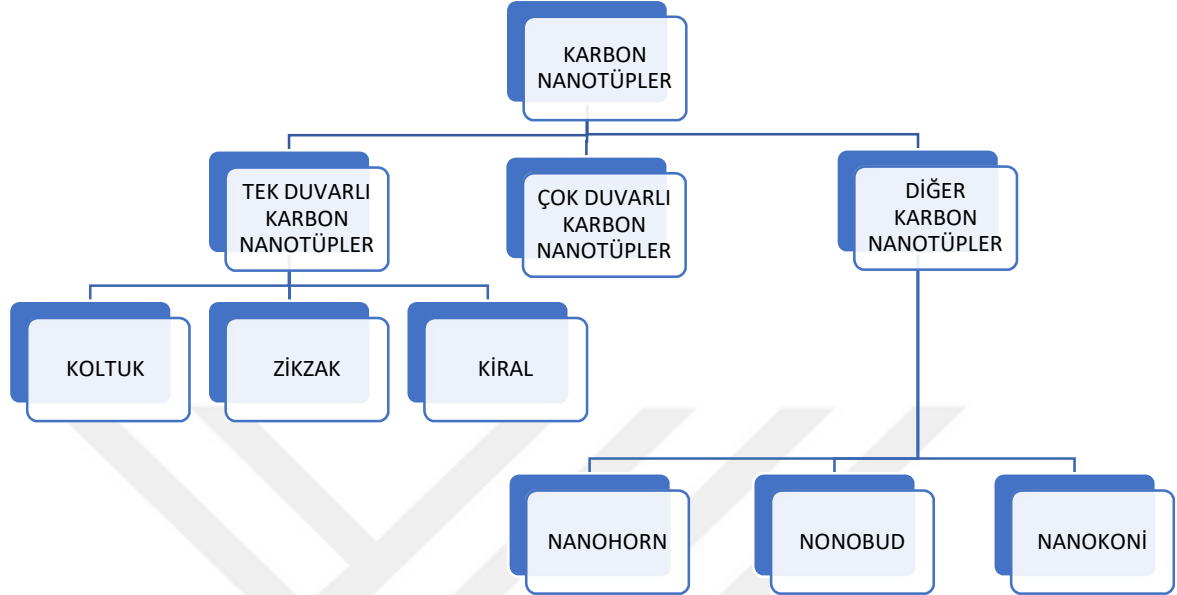
Tablo 1. KNT'lerin sınıflandırması (Sanudin, 2005)

KNT TİPİ	KESİT ŞEKLİ	KİRAL VEKTÖR
KOLTUK		(n,n)
ZİKZAK		$(n,0)$
KİRAL	Koltuk ve zikzak kesit kombinasyonu	(n,m)



Şekil 3. Karbon Nanotüp Tipleri (a) Koltuk (b) Zikzak (c) Kiral (Tserpes, 2005)

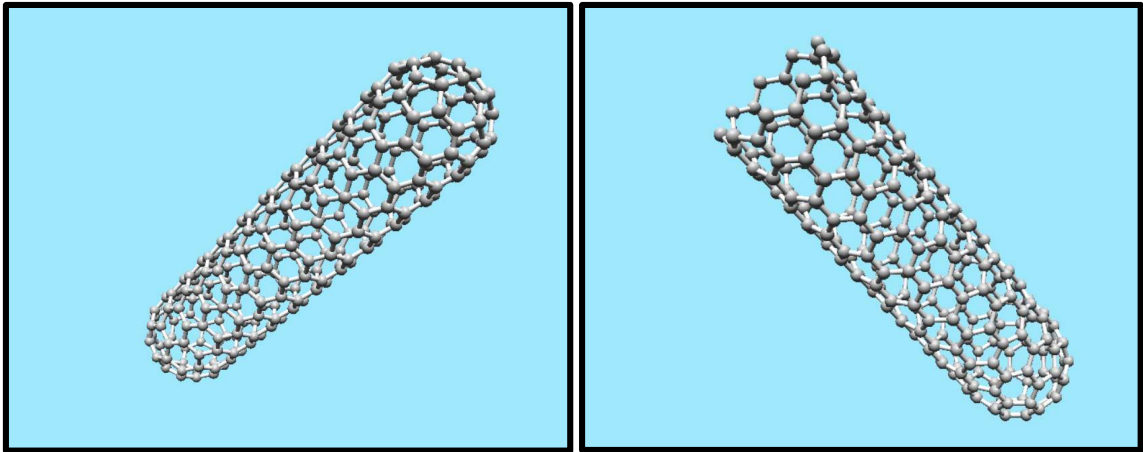
Karbon Nanotüp Çeşitleri ve İlgili Yapılar



Şekil 4. Karbon nanotüplerin çeşitleri

Tek duvarlı karbon nanotüpler (TDKNT)

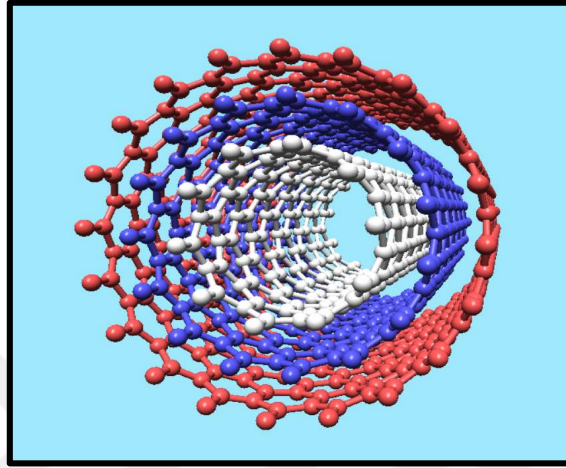
Tek duvarlı karbon nanotüpler, bir düzlemde karbon atomlarının altıgen bir düzenlemesi olan grafen tabakasının kesintisiz silindirikleridir. Tek duvarlı karbon nanotüpler genellikle ~ 1 nm civarında bir çapa sahiptir (Manikandan ve ark., 2021).



Şekil 5. Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler

Çok duvarlı karbon nanotüpler (ÇDKNT)

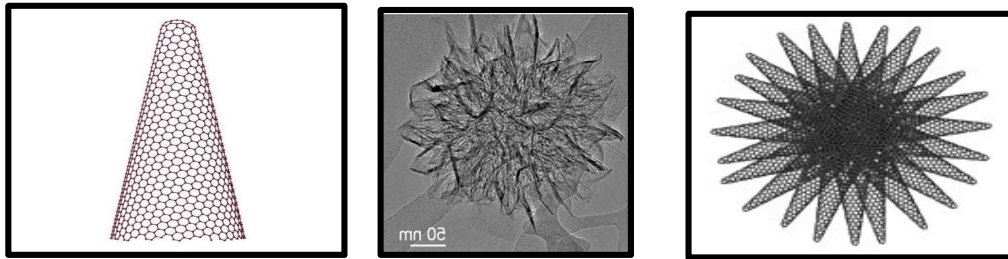
İç içe geçmiş, iki veya daha fazla tek duvarlı karbon nanotüplerden oluşmaktadır. Çok duvarlı karbon nanotüpler, 330 pm'lik bir ara katman mesafesi bulunan matruşka modelidir yani çok duvarlı nanotüpler birbiri içinde eşmerkezli olarak yerleşmiş tek duvarlı nanotüplerden oluşmaktadır. Başka bir deyişle ÇDKNT'ler bireysel TDKNT'ler tarafından oluşturulur (Manikandan ve ark., 2021).



Şekil 6. Çok Duvarlı Karbon Nanotüp

Nanohornlar

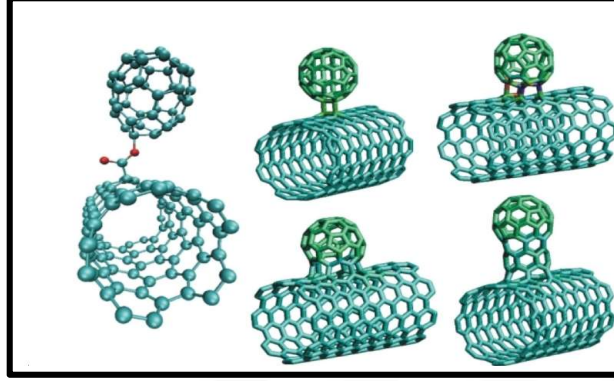
Nanohornlar karbon nanotüpler gibi nano yapılardır. İlk olarak 1994 yılında Peter J. F. Harris, Edman Tsang, John Claridge ve Malcolm Green (Yoshitakea, 2002) ve daha sonra 1999 yılında Sumio Iijima ve arkadaşları (Nasibulin,2007) tarafından ilan edilmiştir. Tek duvarlı karbon nanohorn (TDKNH), 'yıldız çiçeği benzeri', 'tomurcuk benzeri' ve 'tohum benzeri' üç benzersiz tür izlenmiştir. TDKNH'ler koni kenarı ile boynuz biçimli uçlara sahiptir ve TDKNT'ler gibi tek grafenden oluşur. (Manikandan ve ark, 2021)



Şekil 7. NanoHorn örnekleri(Anonim,2021)

Nanobud

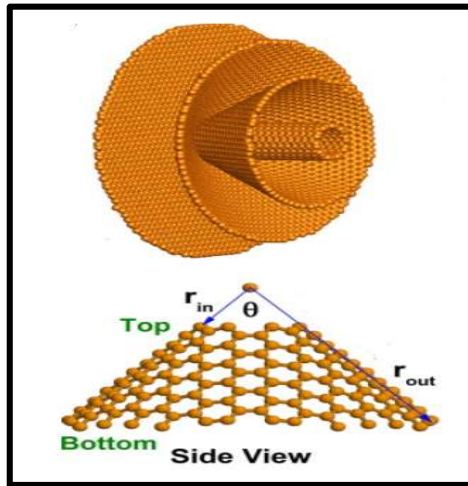
Nanobudlar, her ikisi de karbon allotropları olan karbon nanotüpleri ve fulleren yapısını birleştiren yeni oluşturulmuş bir yapıdır. Karbon nanotüplerden çıkan fullerenceler bu yapıyı açıklayabilir (Manikandan ve ark., 2021).



Şekil 8. Nanobud örneği (Anonim, 2022)

Nanokoni

Konik nanoyapılar, özel geometrik şekilleri nedeniyle araştırmacıların dikkatini çekmiştir. En uygun konik nanoyapı türleri olarak karbon nanokoniler (KNK'ler) 1994 yılında keşfedilmiştir. KNK'lerin keskin uçlu yapısı nedeniyle, spesifik mekanik özellikler elde etmek için kullanılabilirler. Bu nanoyapılar tarama tünelleme probu, atomik kuvvet mikroskobu ve alan emisyon cihazlarında da kullanılabilir (Ansari ve Mahmoudinezhad, 2015).



Şekil 9. Nano koni örneği (Ma ve ark., 2017)

Karbon Nanotüplerin Sentezlenme Yöntemleri (Küçükaydırım 2012)

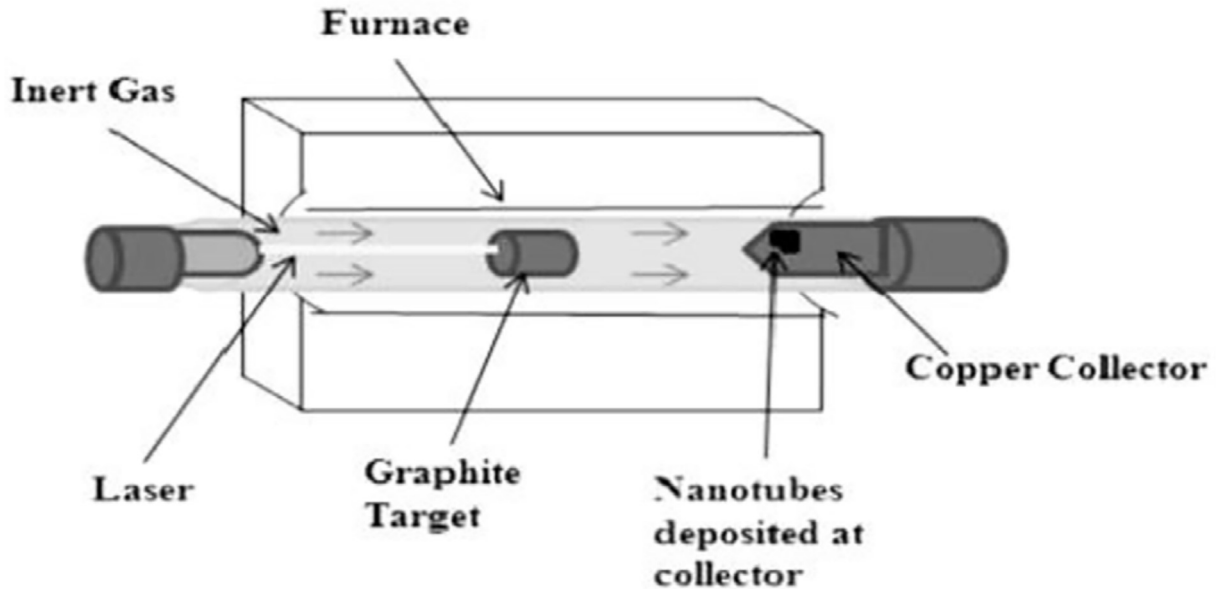
Karbon nanotüp sentezlenmesi için belirli yöntemler vardır. Bu yöntemler uygulamadaki yerine göre şekillenmiştir. Saflık oranının yüksek olduğu üretim isteği, sentezlemenin daha minimum sıcaklıklarda yapılması ve üretim kapasitesinin artırılması için yapılan çalışmalarla birçok değişik sentezleme yöntemi ortaya konulmuştur. İmalat sırasında kullanılan malzemelerin haline göre katı hâlde karbondan sentezleme ve gaz hâlde karbondan sentezleme şeklinde bir ayırım yapılmıştır. Bu hallerin dışında kalan durumlar ise diğer yöntemler olarak isimlendirilmiştir.

Katı hal durumu

Katı halde karbondan sentezleme işlemi, katı haldeki grafen kullanılarak gerçekleştirilmektedir. Katı halde karbondan sentezleme işlemleri şu şekildedir;

Lazerle aşındırma yöntemi

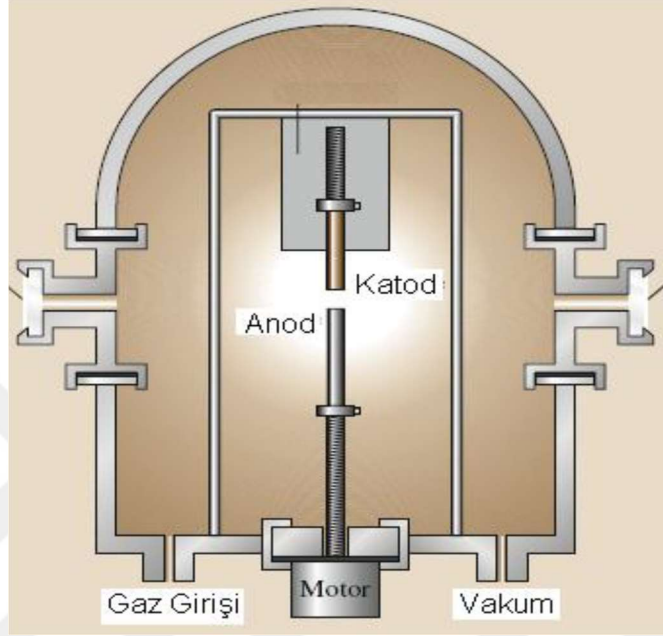
1995 Yılında, Lazer Ablasyon yöntemi ilk olarak Rice Üniversitesi'nde Smalley ve ark. tarafından yapılmıştır. Bu yöntemde karbon, yüksek güçlü lazer kullanılarak grafit hedefinden 1200°C ve 500 tor basınçta buharlaştırılır. Yüksek sıcaklık odasından inert gaz (argon) karbon buharlarını toplayıcıya taşır ve burada karbon nanotüpler akış tüpüne çökmeye başlar. Lazer Ablasyon yöntemi şematik gösterimi Şekil 10'da görülmektedir (Thakur, 2021).



Şekil 10. Lazerle aşındırma yöntemi şematik gösterimi (Thakur, 2021)

Ark buharlaştırma yöntemi

Bu yöntem Karbon Nanotüp sentezlemede kullanılan en eski yöntemlerdendir ve iki karbon çubuğu inert bir atmosferde bağlanarak üzerlerinde doğru akım geçirilir. Bu nedenle, iki çubuk arasında muazzam miktarda ısı üretilir. Bir çubuğun bir kısmı ısı deşarjı ile buharlaştırılır ve diğer çubukta Karbon Nanotüp olarak bilinen, çubuk şeklinde küçük bir yapı ortaya çıkmaya başlamaktadır (Thakur,2021).



Şekil 11. Ark boşaltma yöntemi (Küçükyıldırım ve Eker,2012)

Solar fırın yöntemi

Fulleren sentezlenmesi için tasarlanmış olan solar fırın yöntemi, karbon nanotüp sentezlemek için de kullanılmaya başlamıştır. 4000°K civarında olan işlem sıcaklığına sahip bu yöntem düşük verimlidir bu yüzden çoğunlukla tercih edilmemektedir. Yöntemin en önemli özelliği güneş enerjisini kullanmasıdır (Küçükyıldırım ve Eker , 2012).

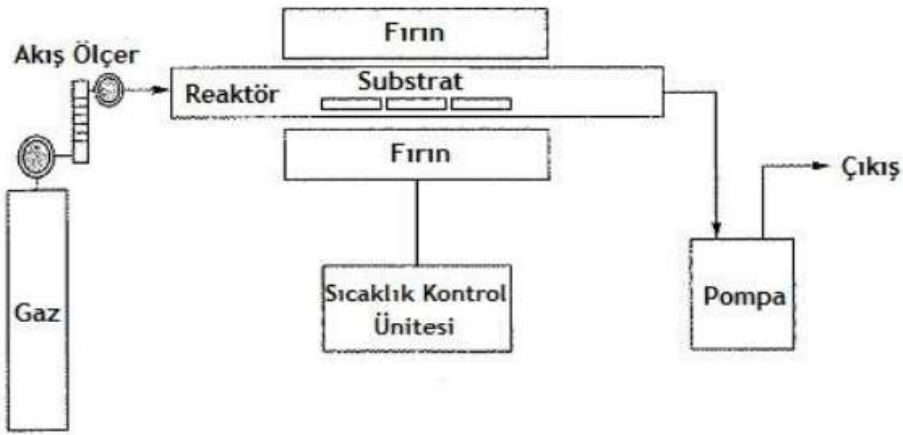
Gaz hal durumu

Bu yöntem için kullanılan karbon kaynakları çeşitli gazlar olmaktadır

Kimyasal buhar biriktirme

Kimyasal buhar birikimi, sabit yataklı ve akışkan yataklı olarak gerçekleşebilir. Çoğunlukla SiO_2 (silika), Al_2O_3 (alumina) veya MgO destek (substrat) malzemesi olarak kullanılır. Reaktör içine, destek malzemelerin üzerine konulmuş katalizör yerleştirilir ve istenen sıcaklık değerlerine ulaşıldıktan sonra karbon kaynağı gaz (örneğin; CH_4) ve taşıyıcı inert gaz (çoğunlukla Ar ya da He) reaktör içerisinde akışı sağlanarak reaksiyon gerçekleştirilir (Dalkiliç,2014).

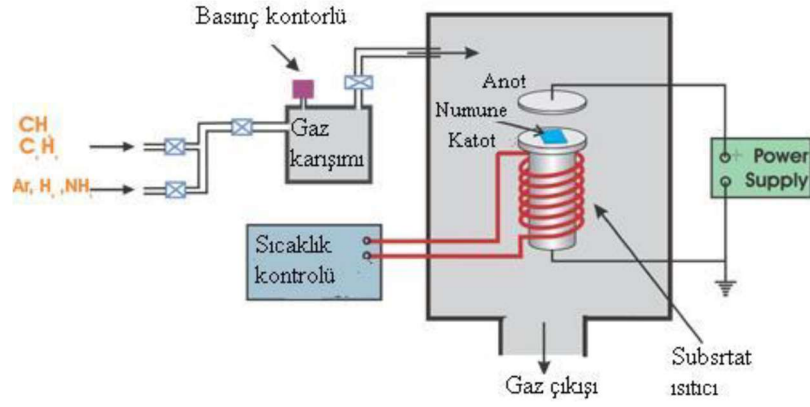
Bu yöntemde hidrokarbon (genellikle metan, asetilen, etilen, propan, etanol, metanol veya karbon monoksit) gaz fazında bir karbon kaynağı olarak alınır ve sıcak bir fırına yerleştirilen kuvars tüpünden geçer. Hidrokarbonun hidrojen-karbon bağı 700 ° C'de kırılır ve saf karbon molekülleri elde edilir daha sonra çeşitli katalizörler (Ni, Fe veya CO) üzerine kaplanır ve ısıtılır. Koşullar uygun bir şekilde sürdürülürse, Karbon Nanotüp kolayca sentezlenir. Şekil 12’de Kimyasal Buhar Biriktirme yönteminin şematik gösterimi verilmiştir (Thakur,2021).



Şekil 12. Kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Dalkiliç,2014)

Isıl kimyasal buhar biriktirme

Bu yöntemde Karbon Nanotüp üretimi şu şekilde olmaktadır. Başlangıçta bir altlığın üzerine Fe, Ni, Co, ya da bu üç katalizör metalinin alaşımı çökeltilir. Daha sonra altlık, damıtılmış su ile seyreltilmiş HF çözeltisiyle dağlanır. Numune kuartz teknesine konduktan sonra tekne bir kimyasal buhar çökeltme reaktörüne konulur ve katalizör metal filminde NH_3 kullanılır. 750°C ile 1050°C sıcaklıkta son bir kez daha dağlanarak nano boyutta küçük metal taneler oluşturulur. Katalizör metal parçalarının üzerinde Karbon Nanotüpler oluşmaktadır. Bu yüzden bu katalizör tanelerin oluşturulması işlemlerin en önemlisidir. Isıl kimyasal buhar çökeltme ürün fazlalığı, hidrokarbon çeşidinin çok olması, kalite bakımından yüksek malzemelerin sentezlenebilmesi ve kontrol edilebilir mikroskobik yapılar gibi avantajlara sahiptir (Küçükyıldırım ve Eker, 2012).

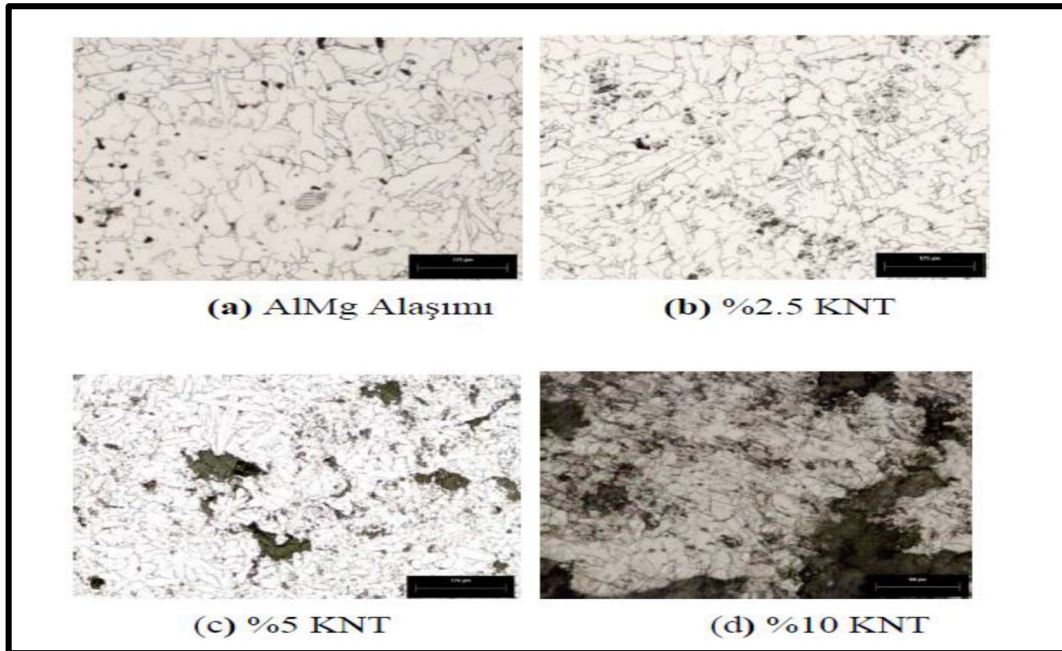


Şekil 14. Plazmayla güçlendirilmiş kimyasal buhar çökeltme yöntemi (Küçükyıldırım ve Eker , 2012).

Geçmişte Yapılmış Çalışmalar

Deneysel çalışmalar

Topçu İ. (2018) tarafından yapılan çalışmada toz metalürjisi tekniği kullanılmıştır. AlMg matriksine farklı ağırlık oranlarında (%2,5-%10) KNT takviyesi yapılarak AlMg/KNT kompozit malzemeleri üretilmiştir. Daha sonra karıştırma cihazında 400 dev/dk'da altı saat boyunca karıştırılmıştır. Karıştırma tamamlandıktan sonra sırası ile toz karakterizasyonu, optik incelemeler, sertlik ve yoğunluk testi yapılmıştır. Metal kalıpta 200 MPa basınç altında üretilen AlMg/KNT kompozit numuneleri yüksek vakum basıncında farklı sıcaklıklarda (350°C, 400°C, 450°C) 120 dakika boyunca sinterlenmiş ve numunelerin sertlik, yoğunluk ve metalografik incelemeleri yapılmıştır (Topçu, 2018).

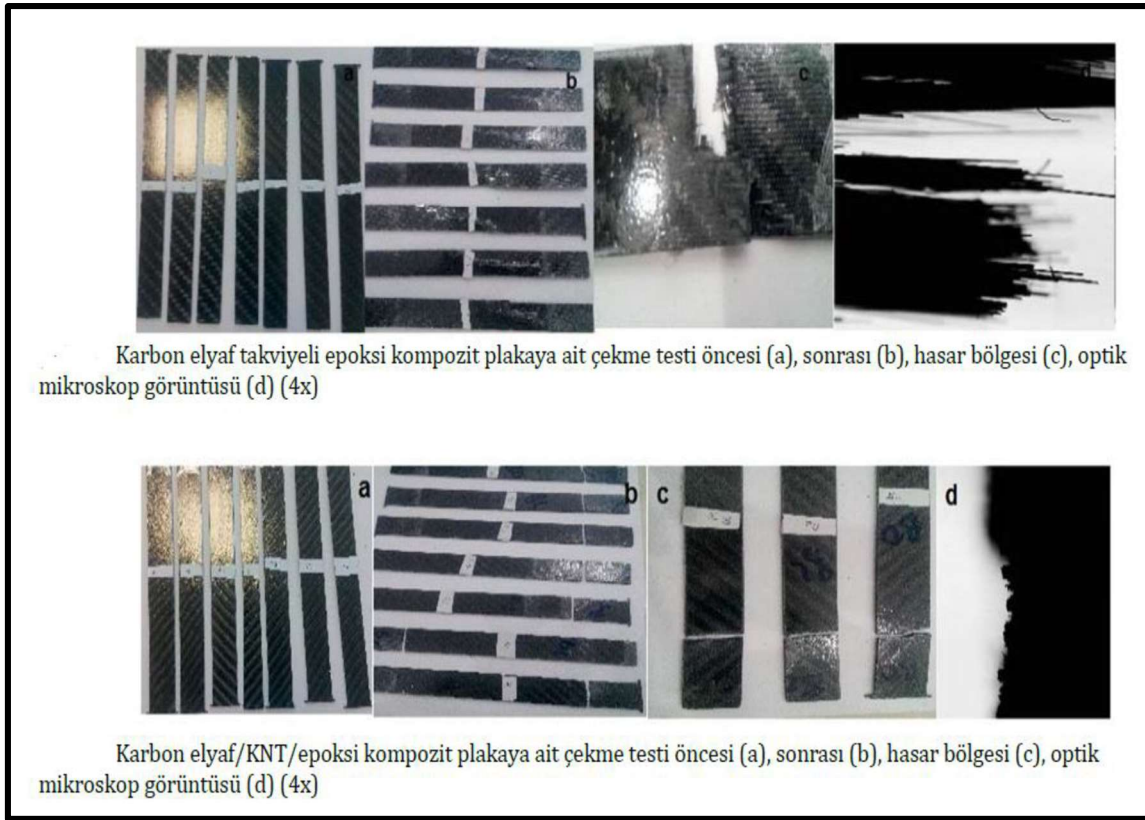


Şekil 15. Farklı olararlarda KNT katkılı AlMg/KNT kompozitlerinin mikroyapıları (Topçu, 2018).

Şekil 15’te farklı oranlarda üretilmiş AlMg/KNT kompozitlerinin mikro yapıları gösterilmektedir. İlk görselde (a) AlMg alaşımının herhangi bir katkı olmadan önceki hali verilmiştir. (b) %2,5 Karbon Nanotüp katkılı kompozit malzemenin iç yapısı verilmiştir ve KNT parçacıklarının matriste neredeyse homojen bir dağılım sergilediği gözlemlenmiştir. %5 ‘lik katkı oranından sonra artan Karbon nanotüp oranlarına bağlı olarak yapıdaki Karbon nanotüplerin homojen dağılımı giderek azalmış ve belirli bölgelerde yığılmalar gözlemlenmiştir.

Artan karbon nanotüp parçacıklarının numunelerde gözenekli yapıya dönüştüğü gözlemlenmiştir. Bu gözenekli yapı malzemenin yoğunluğunu azaltmıştır. Deneylerde 400° C’de daha yüksek ortalama sertlik değerleri sonucuna ulaşılmıştır. Bu nedenle, karbon nanotüpler % 2.5 KNT içeren kompozit toz içinde nispeten daha homojene yakın bir dağılışı göstermiştir (Topçu, 2018).

Korkmaz N ve arkadaşları tarafından yapılan Dokuma Karbon Elyaf Takviyeli Karbon Nano Tüp-Epoksi Kompozit Malzemelerin Mekanik ve Termal Karakterizasyonu çalışmasında karbon elyaf takviyeli-karbon nano tüp ile modifiye edilmiş epoksi kompozit malzemelerin üretiminin elle yatırma metodu ile yapılması hedeflenmiştir. Bu hedef doğrultusunda ilk olarak saf epoksi matris elemanı çok duvarlı karbon nano tüplerle modifiye edilerek epoksi karbon nanokompozitler üretilmiştir. Üretilen nanokompozitler, matris elemanı olarak üç fazlı kompozit malzeme üretiminde kullanılmıştır. ÇDKNT katkısının Epoksi matrisine eklenmesiyle kompozit malzeme performansına etkisini belirlemek amacıyla mekanik, termal ve yüzey karakterizasyonu yapılmıştır. Analiz sonuçları saf epoksi reçine ile üretilen kompozit malzeme özellikleri ile karşılaştırılmıştır. Üretilen kompozit malzemelerin yoğunluk değerleri, matris malzemesine yapılan karbon nano tüp katkısı ile azalmıştır. Yoğunlukta gözlemlenen bu değişim karbon nanotüp katkısından sonra plaka kalınlığında olan artışın sebep olduğu hacim değişiminden kaynaklanmaktadır. Üretilen numunelere çekme testi uygulanmış ve test sonucunda kırılmalar meydana gelmiş ve kırılma yüzeyleri optik mikroskopla incelenmiş bunun sonucunda KNT katkılı kompozit malzeme numunelerinin kırık bölgesinin daha düzgün olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum mekanik karakterizasyon aşamasında kompozit malzeme performans iyileşmesini desteklemektedir (Korkmaz ve ark.,2016).



Şekil 16. Çekme testi öncesi ve sonrası numuneler (Korkmaz ve ark.,2016).

Aydın M.R. ve arkadaşlarının yapmış olduğu Grafen Nanopartikül Ve Karbon Nanotüp Katkılı Elyaf Polimer Kompozitlerin Serbest Titreşim Ve Burkulma Analizi isimli çalışmada kütlece yüzde 0,1 ve 0,5 oranında KNT ve grafen nanopartikül katkılı karbon elyaf takviyeli epoksi kompozit levhalar üretilmiştir. Bu levhalardan elde edilen numunelerin, bir ucu ankastre diğer ucu serbest ve iki ucu serbest sınır şartlarında serbest titreşim testleri yapılmıştır. Ayrıca, malzemelerin kritik burkulma yükleri belirlemek amacıyla bu kompozitlere burkulma testleri de yapılmıştır. Sonuç olarak her iki sınır şartında karbon nanotüp katkısıyla doğal frekanslar artmıştır. Karbon nanotüp yüzde katkı miktarının artmasıyla da paralel olarak frekans değerleri yine artış göstermiştir. Grafen nano partikül katkısıyla frekanstaki değişim; % 0,1 grafen nano partikül katkıyla frekanslar düşerken % 0,5 grafen nano partikül katkıyla frekans değerlerinde artış gözlenmiştir. Her iki karbon fiber takviyeli polimerik kompozitlerin de kritik burkulma yükü değerini yükselttiği gözlemlenmiştir. Ağırlıkça yüzde 0,1 grafen nanopartikül katkılı numunelerde kritik burkulma yükü % 46 oranında artmıştır. Ağırlıkça % 0,5 grafen nanopartikül katkılı numunede kritik burkulma yükünde % 76 artış gözlemlenmiştir (Aydın ve ark,2015).

Hesaplamalı çalışmalar

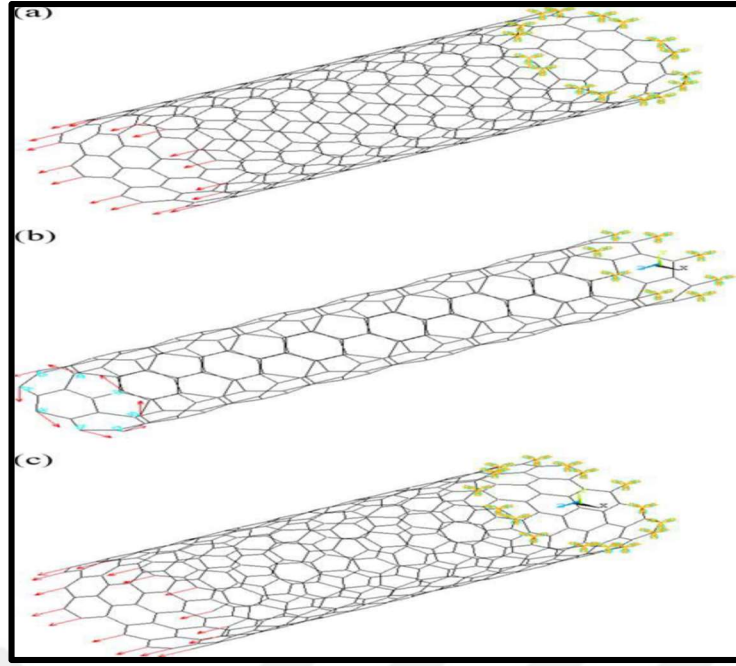
Manikandan N. ve ark. tarafından yapılan Karbon Nanotüpler ve Özellikleri-İnceleme isimli çalışmada Karbon nanotüplerin yapısı, özellikleri, tipleri, kullanım alanları hakkında detaylı bilgi verilmiştir. Karbon nanotüpler daha fazla çalışılma potansiyeline sahiptir ve KNT'lerin birçok disiplinde kullanımındaki ilerleme hızlandırılmalıdır. Sentez, işlevselleştirme ve nanotüp gelişmeleri, bir dizi sektörde heyecan verici yeni keşifler için kapıyı açmıştır. Bununla birlikte, gerekli kullanım ve KNT'leri elde etmek için sentez işlemlerinde daha fazla ilerlemeye ihtiyaç duyulmuştur. Bilgisayar ürünlerinin sürekli minyatürleştirilmesi, mikroelektronik sektöründeki en heyecan verici unsur olmuştur. Moleküller veya atom kümeleri ölçeğindeki küçük araçlar, dünyanın dört bir yanındaki bilim adamları tarafından geliştirilmektedir (Manikandan ve ark., 2021).

Arash B. ve Wang Q. tarafından yapılan Karbon Nanotüplerin ve Grafenin Modellenmesinde Lokal Olmayan Elastik Modellerin Uygulanması Üzerine Bir İnceleme çalışmasında , karbon nanotüplerin ve grafen tabakalarının modellenmesinde yerel olmayan süreklilik teorisinin uygulanmasına ilişkin araştırma çalışmaları gözden geçirilmektedir. Statik ve dinamik yükler altında iki malzemenin modellenmesinde çeşitli yerel olmayan süreklilik modelleri tanıtılmakta ve gözden geçirilmektedir. Yerel olmayan süreklilik modellerinin yerel muadillerine üstünlüğü, küçük ölçekli parametrenin kalibrasyonunun gerekliliği ve yerel olmayan süreklilik modellerinin uygulanabilirliği tartışılmaktadır. Özellikle yerel olmayan kiriş, Plaka ve kabuk modellerinin kısa bir tanıtımı sunulmaktadır. Nanoyapıların modellenmesi için farklı yaklaşımlar arasında, yerel olmayan süreklilik mekaniği teorisi, nano malzemelerin analizinde küçük ölçekli etkilerin dikkate alınmasına izin verir. Bu avantajlar, nanomalzemelerin simülasyonunda etkili bir yol olarak kullanılan yerel olmayan süreklilik modellemesini yapar. Yerel olmayan ışın ve kabuk modelleri, KNT ve Grafenin statik ve dinamik problemlerinin analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Yerel olmayan süreklilik mekaniği modellerinin başarılı bir şekilde uygulanmasındaki temel sorun, küçük ölçekli parametrenin büyüklüğünü belirlemektir. Bununla birlikte, geçerliliği MD simülasyon sonuçları veya deneysel testlerle nadiren doğrulanmıştır. Küçük ölçekli parametrenin değeri sınır durumuna, kiraliteye, mod şekillerine, duvar sayısına ve hareketlerin doğasına bağlıdır. KNT'lerin, özellikle de çeşitli sınır koşulları, boyut ve kiralite ile elastik bir ortama gömülü ÇDKNT'lerin davranışlarını analiz etmek için yerel olmayan süreklilik modellerini tam olarak değerlendirmek için daha fazla çalışmaya ihtiyaç vardır. Yüksek mertebeden süreklilik modelleri karmaşık denklemler pratik değildir.

Ayrıca, KNT'lerin ve Grafen'lerin analizi için yüksek mertebeden süreklilik modellerinin kullanılmasının gerekliliği konusunda herhangi bir kanıt yoktur. Özetle, klasik kabuk teorisine ve birinci dereceden kesme deformasyon teorisine dayanan uzun KNT'ler ve elastik kabuk modelleri için yerel olmayan Euler–Bernoulli ve Timošenko ışın modelleri, kısa KNT'lerin statik ve dinamik davranışını modellemek için yeterlidir (Arash ve Wang, 2012).

Harris J.F'nin Karbon Nanotüp Kompozitler isimli çalışmasında öncelikle karbon nanotüp hakkında detaylıca bilgi verilmiş ve daha çok literatür taraması şeklinde olan bir çalışmadır. Nanotüplerin kompozit yapılarıdaki özelliklerinin üzerinde durulmuştur ve yapı tipleri (KNT/POLİMER, KNT/METAL, KNT/SERAMİK), elektriksel, ısı iletimi ve optik özellikleri hakkında bilgi verilmiştir. Bazı durumlarda nano tüpler, günümüzde aktif olarak kullanılan dolgu malzemelerine alternatif olarak kullanılmaktadır. Maliyet açısından daha uygun polimerlerin iletkenlik özelliklerini arttırmak için kullanılmıştır (Harris, 2013).

K.I.Tserpes ve P.Papinikos'un Tek Duvarlı Karbon Nanotüpler Sonlu Elemanlar Modellemesi isimli çalışmada Koltuk, zikzak ve Kiral tek duvarlı karbon nanotüpler (TDKNT) için üç boyutlu sonlu elemanlar (SEY) modeli önerilmiştir. Karbon atomları arasındaki bağlar, yük taşıyan elemanların bağlanması olarak kabul edilirken, karbon atomları elemanların eklemleri olarak kabul edilir. SE modellerini oluşturmak için, düğümler karbon atomlarının yerlerine yerleştirilir ve aralarındaki bağlar üç boyutlu elastik ışın elemanları kullanılarak modellenir. Kiriş elemanlarının elastiklik modülleri, moleküler ve süreklilik mekaniği arasında bir bağlantı kullanılarak belirlenir. SE modelini değerlendirmek ve performansını göstermek için, tüp duvar kalınlığının, çapının ve kiralitenin TDKNT'lerin elastiklik modülünün ve kayma modülünün üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Sonuç olarak duvar kalınlığı seçiminin elastiklik modülünün hesaplanmasını önemli ölçüde etkilediği bulunmuştur. Literatürde kullanılan duvar kalınlığı değerleri için, elastiklik modülünün elde edilen değerleri, ilgili teorik sonuçlar ve birçok deneysel ölçümle çok iyi uyum sağlar. Elastiklik modüllerin nanotüplerin çapına ve kiralitesine bağımlılığı da elde edilir. Artan tüp çapı ile TDKNT'lerin elastiklik modülleri artar. Kiral TDKNT'lerin elastiklik modülü koltuk ve zikzak tek duvarlı karbon nanotüplerden daha büyük olduğu bulunmuştur (Tserpes ve Papinikos , 2005).



Şekil 17. Yükleme altında sırasıyla koltuk, zikzak ve kiral karbon nanotüplerin SE modeli

Kirtania S. Ve Chakraborty D tarafından yapılmış olan Karbon Nanotüplerin Sonlu Elemanlar Bazlı Karakterizasyonu çalışmasında tek duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modülünü, kesme modülünü ve termal genleşme katsayısını (TGS) değerlendirmek için üç boyutlu (3D) sonlu elemanlar (SE) analizi kullanılmıştır. Hem koltuk hem de zikzak tip tek duvarlı karbon nanotüpler analiz edilmiş ve tek duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modüllerinin ve termal genleşme katsayılarının önemli parametrelere bağımlılığı konusunda bazı önemli gözlemler yapılmıştır. Sonuç olarak , koltuk ve zikzak tek duvarlı karbon nanotüpleri ve grafen tabakalarını analiz etmek için sonlu elemanlar (SE) modeli, karbon nanotüplerin yüke maruz kaldıklarında uzay çerçeve yapıları gibi davrandığı varsayımına dayanarak önerilmiştir. SE modeli, elastiklik modülünü, kayma modülünü ve Grafen tabakasının yanı sıra TDKNT'lerin termal genleşme katsayısını belirlemek için kullanılmıştır. Bu analizden termal genleşme katsayısının (TGS) grafen tabakalarının boyutu ve şekli üzerindeki bağımlılığı ile ilgili olarak aşağıdaki önemli sonuçlar çıkarılmıştır.

- Grafen tabakasının boyutundaki artışla birlikte, elastiklik modülü artar.
- Tek duvarlı karbon nanotüplerin tüp çapındaki artışla, hem koltuk hem de zikzak karbon nanotüplerin (KNT) elastiklik modülleri artar ve büyük çaplar için grafen levha elastiklik modülüne yaklaşır.
- TDKNT'nin duvar kalınlığındaki artışla birlikte, elastiklik modülü koltuk ve zikzak tek duvarlı karbon nanotüpler için orantılı olarak azalır.
- KNT'lerin tüp çapındaki ve grafen tabakalarının boyutundaki artışla, hem koltuk hem de zikzak KNT'lerin ve grafen tabakalarının termal genleşme sayısı artar.

- Koltuk tabakasının termal genleşme katsayısı, tabakanın uzunluğu boyunca ölçüldüğünde zikzak tabakasınınkinden daha büyüktür.
- Grafen tabakasının boyutu veya KNT'lerin çapı ile TGS'nin varyasyonunun ihmal edilebilir olduğu gözlenmiştir (Kirtania ve Chakaborty., 2007).

Rafiee R. ve Moghadam R.M. tarafından yapılan Karbon Nanotüplerin Modellenmesi Üzerine: Eleştirel Bir İnceleme isimli çalışmada KNT'lerin mekanik, burkulma, titreşim ve termal özelliklerini elde etmek için KNT'lerin farklı modelleme teknikleri ve uygulamaları hakkında kapsamlı bir inceleme yapılmıştır. KNT modelleme teknikleri atomistik modelleme, süreklilik modelleme ve nano ölçekli süreklilik modelleme olarak üç ana kategoriye ayrılabilir. Atomistik modelleme moleküler dinamik (MD), Monte Carlo (MC) ve AB initio yöntemlerinden oluşur. Hem MD hem de MC yöntemleri, ikinci Newton Yasası temelinde inşa edilmiştir. Hem MD hem de MC potansiyele bağlı olsa da, AB serbest yöntemdir. Atomistik modelleme teknikleri, şu şekilde özetlenebilecek bazı eksikliklerden muzdariptir:

- Çok sayıda atomun modellenememesi
- Çok sayıda hesaplama görevi
- Karmaşık formülasyonlar.

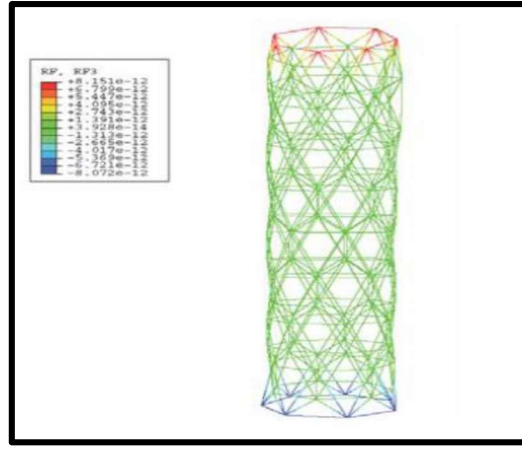
Yoğun hesaplamalara ihtiyaç duyan Moleküler Dinamik, Lokal Yoğunluk, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi, Mors Potansiyel Modeli ve Modifiye Mors Potansiyel Modeli gibi diğer atomistik yöntemler de mevcuttur. Öte yandan, KNT'lerin mekanik davranışlarını incelemek için süreklilik mekaniğinden kaynaklanan süreklilik modellemesi de uygulanmaktadır. Analitik ve sayısal yaklaşımlardan oluşan süreklilik modellemesinin geçerliliği, KNT'nin kafes yapısının bir süreklilik ortamı ile değiştirildiği durumlarda dikkatli bir şekilde gözlemlenmelidir. Sayısal süreklilik modellemesi, kabuk veya kavisli plaka elemanları kullanılarak sonlu eleman modellemesi ile gerçekleştirilir. Bu stratejinin, yani KNT'nin kafes yapısını ihmal etmenin, bizi yeterince doğru sonuçlara götürme derecesi söz konusudur. Dahası, KNTlerin hemen hemen tüm özelliklerinin (mekanik, burkulma, titreşimler ve termal özellikler) KNT'nin kiralitesine bağlı olduğu yaygın olarak gözlenmiştir; bu nedenle süreklilik modellemesi bu önemli konuyu ele alamaz. Son zamanlarda, nano ölçekli süreklilik mekaniği yöntemleri, KNT'yi modellemenin etkili bir yolu olarak geliştirilmiştir.

Bu modelleme teknikleri, atomistik modelleme gibi hesaplama açısından yoğun değildir ve bu nedenle kısa zaman ve/veya uzunluk ölçekleri sınırlaması olmaksızın daha karmaşık sistemlere uygulanabilirler.

Dahası, KNT kafes yapısının ayrık doğası, C–C bağlarını bir süreklilik elemanı ile değiştirerek modellemede tutulur. Süreklilik modellemesi nano ölçekte kullanıldığından, modellemeye nano ölçekli süreklilik modellemesi denir. KNT'nin mekanik özelliklerini, burkulmasını, titreşimlerini ve termal davranışını ele alan literatürde yapılan araştırmalar, yukarıda belirtilen üç modelleme tekniğine dayanarak gözden geçirilir ve sınıflandırılır. Atomistik modelleme bu amaç için makul bir modelleme tekniği olsa da uygulanabilirliği küçük sistemlerle sınırlıdır. Öte yandan, süreklilik modellemesi KNT'nin ayrık yapısını ihmal eder ve yanlış sonuçlara yol açar. SEY, nano ölçekli süreklilik modellemesinde hesaplamalı olarak güçlü bir araç olarak kullanıldığında, KNT kiralitesinin, çapının, kalınlığının ve diğer ilgili parametrelerin etkisi, diğer yöntemlerle karşılaştırıldığında uygun bir şekilde değerlendirilebilir (Rafiee R. ve Moghadam R.M., 2014).

Nahas M.N ve Abdrabou M. tarafından yapılan Karbon Nanotüplerin Sonlu Elemanlar Modellemesi isimli çalışmasında nanoyapılı malzemelerin mekanik davranışını incelemek için sonlu elemanlar modeli geliştirilmiştir. Burada bildirilen model, yazarlar tarafından geliştirilen ve bir grafen tabakasının etkili sertliğini belirlemek için uygulanan önceki bir modelin bir devamıdır. Mevcut model, daha önce geliştirilen grafen levha modelini dikey kenarı etrafında bükerek, daha sonra mekanik özelliklerini bulmak için karakterize edilen tek duvarlı bir karbon nanotüp oluşturmak üzere geliştirilmiştir.

Sonuç olarak; bu çalışmada geliştirilen sonlu elemanlar modeli çok iyi performans gösterir ve diğer analiz yöntemleri ile elde edilen sonuçlarla uyumlu sonuçlar verir. Model, tek duvarlı karbon nanotüplerin özelliklerini araştırmak için kullanılmıştır ve elastiklik modülünün elde edilen değerleri, tek duvarlı karbon nanotüplerin özelliklerini araştırmak için kullanılmıştır. Sonlu elemanlar modelinin sonuçları, elastiklik modülünün nanotüp çapının artmasıyla arttığını göstermektedir. Sunulan sonuçlar, önerilen sonlu elemanlar modelinin karbon nanotüplerin ve nano kompozitlerin mekanik davranışını incelemek için değerli bir araç sağlayabileceğini göstermektedir. Bu çalışmadan elde edilen iyi sonuçlarla, araştırmacılar parametrik bir çalışma yapmayı ve Sonlu Elemanlar modelini çok duvarlı karbon nanotüpleri kapsayacak şekilde genişletmeyi planlanıyor (Nahas ve Abdrabou.,2010).

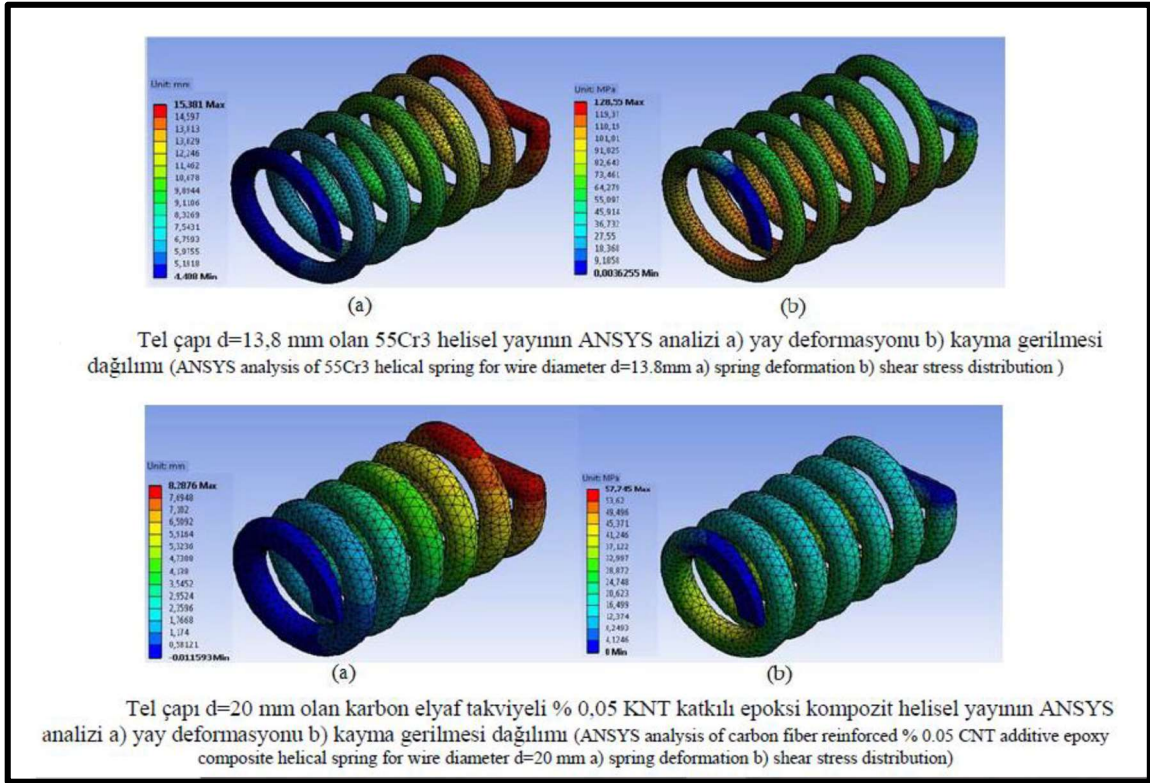


Şekil 18. Sonlu elemanlar modelinin genel yükleme durumu (Nahas ve Abdrabou.,2010)

Özel C.K. tarafından yapılan Arızalı Karbon Nanotüpün Yeniden Güçlendirilmiş Polimer Kompozitleri için Sonlu Elemanlar Modellemesi isimli çalışmanın kısaca özeti şu şekildedir. Karbon nanotüplerin kullanım alanlarından biri Karbon Nanotüp Takviyeli Polimer (KNTTP) kompozitlerde kullanılmalarıdır. Bu polimer takviyeli kompozitler KNT takviyesinden dolayı özellikleri iyileştirilmiş olan hafif yapılardır. Karbon nanotüplerin gerçek hayatta mükemmel bir yapıya sahip olmadıkları yani kusurlu yapıya sahip olduğu bilinmektedir. Bu kusurlar boş köşe veya Stone-Wales kusurları gibi kusurlardır. Bu çalışmada ilk olarak yapısal kusurları olan KNT'ler eşdeğer süreklilik modellemesi kullanılarak modellenmiştir. Daha sonra kusurlu karbon nanotüp takviyeli polimer kompozit modellemesi yapılmıştır. Bu modellere sonlu elemanlar çözümlemesi yapılmıştır. Çalışmada çeşitli yapı kusurlarının bulunduğu tek duvarlı KNT modeller kullanılmıştır. Bu kusurların elastiklik modülü ve poisson oranına etkisi araştırılmıştır. İkinci kısımda ise KNTTP kompozitler çeşitli kusurlar ile modellenmiş ve yüklemeye maruz bırakılmıştır. Elde edilen sonuçlar, KNTTP'lerin yapısına eklenen kusurların elastiklik modülü ve poisson oranına negatif olarak etki ettiğini göstermektedir (Özel ,2019).

Kara Y. ve Akbulut H. tarafından yapılan Karbon Elyaf Takviyeli Karbon Nanotüp Katkılı Epoksi Kompozit Helisel Yayların Mekanik Davranışları isimli çalışmada çelik yaylara alternatif olarak karbon nanotüp katkılı ve karbon elyaf takviyeli kompozitlerden üretilmiş helisel yayların farklı yükler altında davranışı incelenmiştir. Özellikle KNT katkısının etkileri incelenmiştir. Öncelikle helisel yayların tasarımı yapılmıştır. Çalışma iki kısımdan oluşmaktadır. Analitik kısım ve numerik kısım.

Çalışmanın analitik kısmında, epoksi reçinesine farklı oranlarda (%0, %0.05, %0.10 ve %0.15) KNT katılmış daha sonra karbon elyaf takviyesi ile kompozit yapılar elde edilmiştir. Numerik analiz bölümünde ise sonlu elemanlar çözümlemesine gidilmiş ve elastiklik modülü, poisson oranı verilerine ulaşılmıştır. Sonlu elemanlar çözümlemesi ANSYS yazılımı ile yapılmıştır. Çalışmanın sonucunda KNT katkılı epoksi kompozit helisel yaylarda katkı oranı ve yay tel çapı farklı oranlarda değiştirildiğinde çelik yaya eşdeğer sayılabilecek yaylar elde edilmiştir (Kara ve Akbulut,2017)



Şekil 19. Analizden örnek görseller(Kara ve Akbulut, 2017)

M. Karimi tarafından yapılan Farklı Yükler Altında Karbon Nanotüplerin Mekanik Özelliklerinin İncelenmesi adlı çalışmada karbon nanotüplerin davranış ve özellikleri araştırılmış ve SOLIDWORKS Simulation software ile geliştirilen modeller incelenmiştir. Sonuçlar aşağıdaki gibi özetlenmiştir:

- Karbon nanotüplerin mekanik özelliklerinin duvar kalınlığına güçlü bir şekilde bağlı olduğu gözlenmiştir. TDKNT'lerin hem koltuk hem de zikzak için elastiklik modülü, kiral nanotüp vektörünün ana parametresi n'deki (artan uzunluk) artışa bağlı olarak artan çapla artar. Koltuk örnekleri daha yüksek bir elastiklik ve kesme modülüne sahiptir.
- Bu çalışmanın hesaplanan kesme modülü, diğer çalışmaların sonuçlarından yaklaşık %5 daha azdır. Bu çalışmanın Poisson oranı diğer çalışmaların sonuçlarından yaklaşık %2 daha düşüktür (Karimi, 2021) .

S.S.Rafi ve ark. tarafından yapılan çalışmada ise amaç zikzak ve koltuk tipi karbon nanotüp elastiklik modülünü sonlu elemanlar yöntemi ile tahmin etmektir. Öncelikle PRO-E programında KNT modeli oluşturulur. Sonlu elemanlar modelleri oluşturmak için karbon atomları düğüm olarak ele alınır ve aralarındaki bağlar ANSYS yazılımı ile üç boyutlu kiriş elemanı kullanılarak modellenir. Elastiklik modülü, farklı duvar kalınlıklarına, uzunluklarına ve eleman çaplarına göre Tablo 2’de gösterildiği gibi değişim göstermektedir. Elde edilen sonuçlar, çeşitli araştırmacılar tarafından yürütülen önceki sonuçlarla eşleştirilmiştir (Rafi ve ark. ,2014).

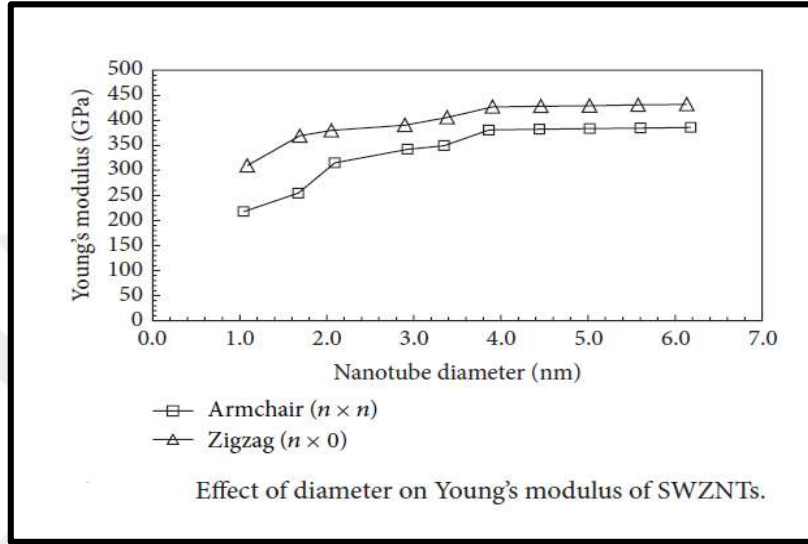
Tablo 2. 1 nm'lik tüp çapına sahip koltuk ve zikzak KNT'lerde boyca değişimin elastiklik modülüne etkisi (Rafi ve ark.2014)

Young's modulus for different lengths of Zigzag and Armchair type CNT with 1 nm tube diameter		
S/No	Tube Length (nm) of Zigzag type	Young's modulus (TPa)
1	6.085	1.0532
2	5.236	1.0596
3	4.600	1.0628
4	4.176	1.0645
5	3.113	1.0656
6	2.055	1.0659

S/No	Tube Length (nm) of Armchair type	Young's modulus (TPa)
1	5.5149	0.8777
2	4.5346	0.8803
3	4.0445	0.9104
4	3.5544	0.9326
5	2.9410	0.9597
6	2.2058	0.9811

I.D.Muhammad ve ark. tarafından yapılan çalışmada, elastiklik modülünün geometrik parametrelerini ve büyüklüğünü belirlemek için kübik tek duvarlı zirkonya nanotüplerinin çekme davranışı doğrusal olmayan sonlu elemanlar analizi kullanılarak simüle edilmiştir. Model, ZNT'lerin bir yük formuna maruz kaldıklarında, düğümlerle birbirine bağlanan elemanlardan oluşan bir uzay çerçevesi yapısı gibi davrandıkları varsayımına dayanarak geliştirilmiştir. Bu, moleküler mekanikteki kuvvet sabitlerinin ve yapısal mekanikteki kiriş benzeri elemanın elastik özelliklerinin enerji denklik teorisi ile bağlanmasına izin verir.

Farklı konfigürasyonlara sahip nanotüpler üzerindeki simülasyonlar, bir ucun sabitlenmesi ve diğer ucun aksenal gerilme uygulanması ile gerçekleştirilmiştir. TDZNT'lerin geometrisinin silindirik tüp olarak değil poligonal tüp olduğu bulunmuştur. Optimum elastiklik modülünün yaklaşık değeri, zikzak TDZNT'den elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlara dayanarak, kullanılan yöntemin ZNT'lerin ve diğer nanotüplerin mekanik özelliklerini daha az hesaplama maliyetiyle araştırmak için etkili bir araç olduğu sonucuna varılabilir (Muhammad ve ark.,2015).



Şekil 20. Tek duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modülüne tüp çapının değişiminin etkisi (Muhammad ve ark.,2015)

Yapılan Bazı Çalışmaların Konulara Göre Dağılımı

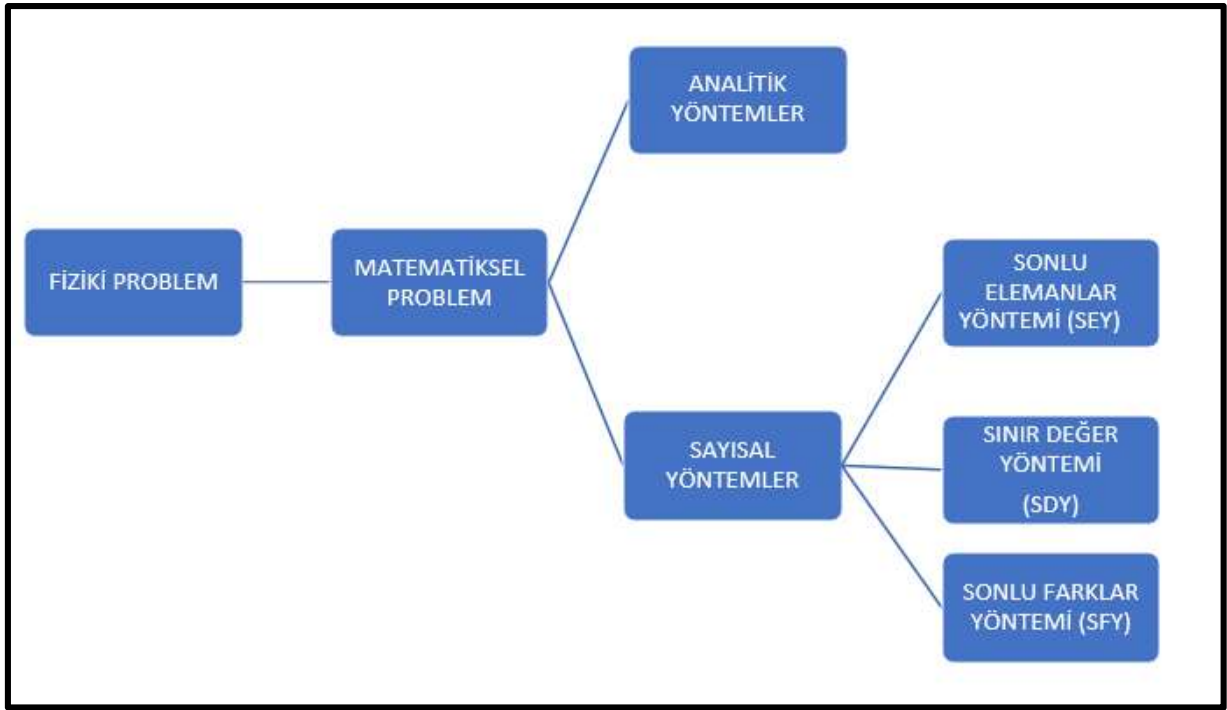
Tablo 3. Yapılan çalışmaların konulara göre dağılımı

ELASTİKLİK MODÜLÜ	POISSON ORANI	TİTREŞİM	BURKULMA	BURULMA	EĞİLME
S.Kirtania	Y.Chandra	A.K.Paswan	A.Karamanlı	M.Arroyo	A.K.Paswan
K.I.Tserpes	D.Askari	A.Karamanlı	Y.Chandra		A.Karamanlı
A.K.Paswan	N.Sakharova	Y.Chandra	M.A.Eltaher		C.Wu
S.K.S.Rafi		C.Wu	C.Wu		B.Arash
M.N.Nahas		B.Arash	R.Rafiee		D.Asadollahi
I.D.Muhammad		R.Rafiee	M.Karimi		G.Odegard
Y.Chandra					
D.Askari					
Y.Liu					
M.A.Eltaher					
N.Sakharova					
N.Khani					
S.Cebellas					
C.Wu					
KAYMA MODÜLÜ	KIRILMA ve SÖNÜMLEME	TERMAL GENLEŞME	ISI İLETİMİ	SÜRTÜNME	MUKAVEMET
S.Kirtania	Y.Chandra	S.Kirtania	Y.Chandra	X.Zhang	Y.Chandra
K.I.Tserpes		Y.Chandra			N.Sakharova
Y.Chandra		R.Rafiee			G.Odegard
N.Sakharova					
X.Lu					

Tablo 4'te görüldüğü gibi yapılan çalışmaların büyük çoğunluğu KNT'lerin Elastiklik Modülü üzerine yapılmıştır. İkinci sırada titreşim, burkulma ve eğilme konuları yer alırken poisson oranı, burulma, kayma modülü, kırılma ve sönümleme, termal genleşme, ısı iletimi, sürtünme ve mukavemet konularında çalışmalar da yapılmıştır. Ancak bu konulardaki çalışma oranı elastiklik modülüne oranla çok düşüktür. Bu çalışmaların tamamı hesaplamalı çalışmalar olup sonlu elemanlar yöntemi kullanılmıştır.

Sonlu Elemanlar Yöntemi (SEY)

Sonlu elemanlar yöntemi (Finite element method (FEM)) genelde mühendislikte fiziki problemlerinin matematiksel karşılıklarıdır. Matematiksel modellerde belirli başlangıç ve sınır şartları ile çözülen diferansiyel denklemlerdir. Sayısal analiz ise matematiksel problemlerin aritmetik işlemlerle çözüme gidilmesidir. Sonlu elemanlar yöntemi bir sayısal analizdir.



Şekil 21. Fiziki problemden sonlu elemanlar yöntemine geçiş

Analitik çözümlerin yetersiz kaldığı durumlarda sayısal yöntemlere başvurulur. Bu yöntemler Sonlu elemanlar (SEY), Sınır Değer (SDY) ve Sonlu Farklar (SFY) yöntemleri gibi bir çok çözüm yöntemi vardır.

Sonlu elemanlar yöntemi karmaşık bir nesne oluşturma fikrine dayanmaktadır. Karmaşık bir bütünü olduğu gibi ele almayıp onu küçük parçalara ayırıp o küçük parçalar üzerinde hesaplamalar yapıp, daha sonra bütün haline getirip sonuca ulaşma yöntemidir. Bilinen matematiksel yöntemlerin yetersiz kaldığı problemlerde tercih edilen yöntemdir.

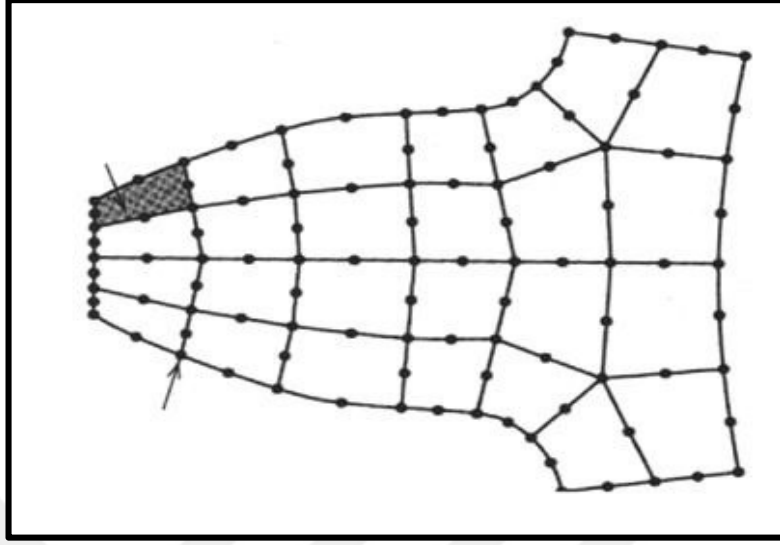
Sonlu elemanlar çözümlemesinde ana düşünce karmaşık olan problemleri daha basite indirgemektir. Ana problem daha basit problemlere indirgendığı için sonuçta kesinlik aranmaz. Ancak yaklaşık olarak değer bulunur (Jafarzadyeganeh, 2017).

Ana problemin bulunduğu koordinatlar “global koordinat” sistemi olarak adlandırılırken bütünün her bir parçasının kendine ait “lokal koordinatı” vardır.

Sonlu Elemanlar Yönteminin avantajları;

- Karmaşık problemler daha basite indirgenir.
- Kuvvet ve momentler daha kolay tanımlanabilir.
- Malzeme farklılıklarının ya da geometrik farklılıkların başladığı noktada farklı eleman tanımlaması yapılarak kolaylıkla çözüme gidilebilir.

- Laboratuvar çalışmaları kesin sonuçlar verir ancak maliyetli ve uğraştırıcıdır. Kullanılan aletlerin hassas olması gerekmektedir. Ancak sonlu elemanlar yöntemi daha hızlı ve maliyeti düşük olan yöntemdir.



Şekil 22. Sonlu elemanlar yöntemi ile dişli çark dişi (Anonim ,2021)

Sonlu elemanlar yönteminin tarihi

Sonlu elemanlar yöntemi ilk olarak uzay teknolojisi için kullanılmaya başlanmıştır. 1950 yılında kullanılmaya başlanan bu yöntemin ilk kullanıcıları Boeing, Bell Aerospace ve Rolls Royce firmaları olmuştur. Bu konuda ilk akademik çalışma 1956 yılında Turner ve ark. tarafından yapılmıştır. Teknolojik gelişmeleri takip eden sonlu elemanlar yöntemi 1970’lerde popüler hale gelmiştir. Günümüzde makine, elektrik, inşaat, uçak mühendisliklerinde ve tıpta bir çok alanda sonlu elemanlar yöntemi kullanılmaktadır (Anonim,2021).

Sonlu elemanlar yönteminin mühendislikte yeri

Fizik ve mühendisliğin hemen hemen her dalındaki problemlere uygulanabilir (Anonim,2021).

- Gerilme analizleri,
- Akış analizleri,
- Isı transferi analizleri,
- Titreşim analizleri,
- Sismik deprem analizleri,
- Aerodinamik analizler,
- Balistik analizler,
- Yorulma analizi,
- Biyomekanik analizler,

- Elektrik ve manyetik alanlar ile ilgili analizler,

Sonlu elemanlar gerilme analizi problemlerini ANSYS programında çözdürmek için programa verilmesi gereken parametreler şöyledir (Güler ve Şen, 2016);

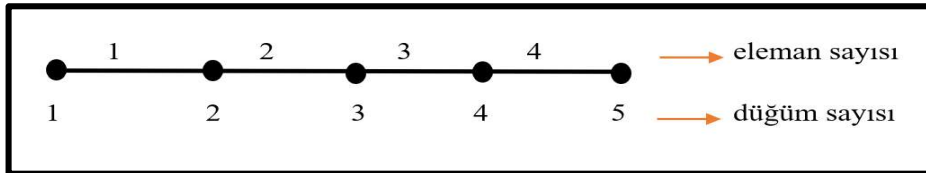
- Geometri
- Poisson oranı
- Elastisite modülü
- Sınır şartları
- Yükleme bilgisi
- Analiz tipi

Sonlu Elemanlar Problem Tipleri (Liu,2003)

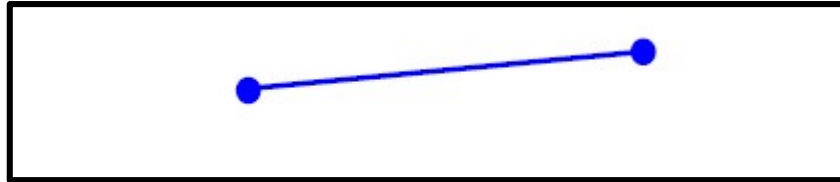
Sonlu elemanlar yöntemi problem bölgesinin sonlu boyutta çok sayıda elemana ayrıldığı için bu ismi almıştır. Cisim uzayda $n=1, 2, 3$ boyuta sahipse n boyutta sonlu eleman sistemiyle çözüm yapılır.

Bir boyutlu (çubuk) problemler

Şekil 24'te gösterilen örnek 1 boyutta karşımıza çıkabilecek problemlere örnektir. Her bir elemanın iki düğüm noktası vardır ve çubuk eleman olarak adlandırılırlar.



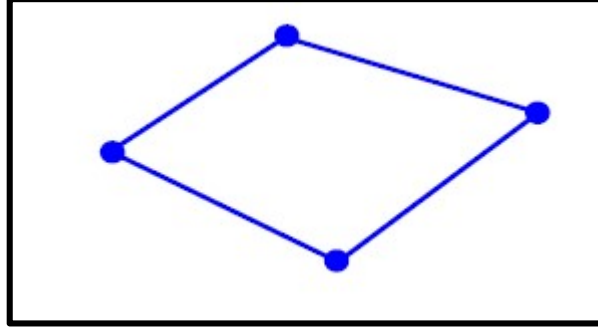
Şekil 23. 1 boyutlu problem örnek gösterim(Güler ve Şen,2005)



Şekil 24. 1 boyutlu eleman (yay, kiriş, çubuk, boru)(Liu,2003)

İki boyutlu (plaka) problemler

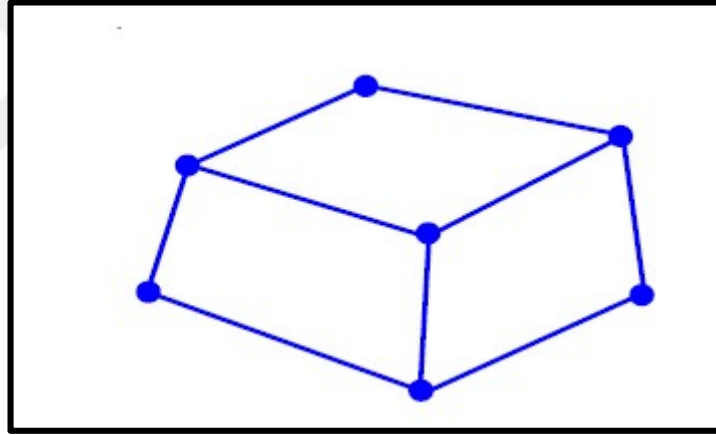
Boyutsal olarak iki parametresi olan yüzey eleman problemleridir.



Şekil 25. 2 boyutlu yüzey eleman örnek gösterim (Liu,2003)

Üç boyutlu (hacim) problem

Uzunluk, genişlik ve yükseklik gibi üç parametreye sahip hacim elemanlardır.



Şekil 26 3 boyutlu Hacim Eleman Örnek Gösterimi (Liu,2003)

Sonlu Elemanlar Eleman Tipleri

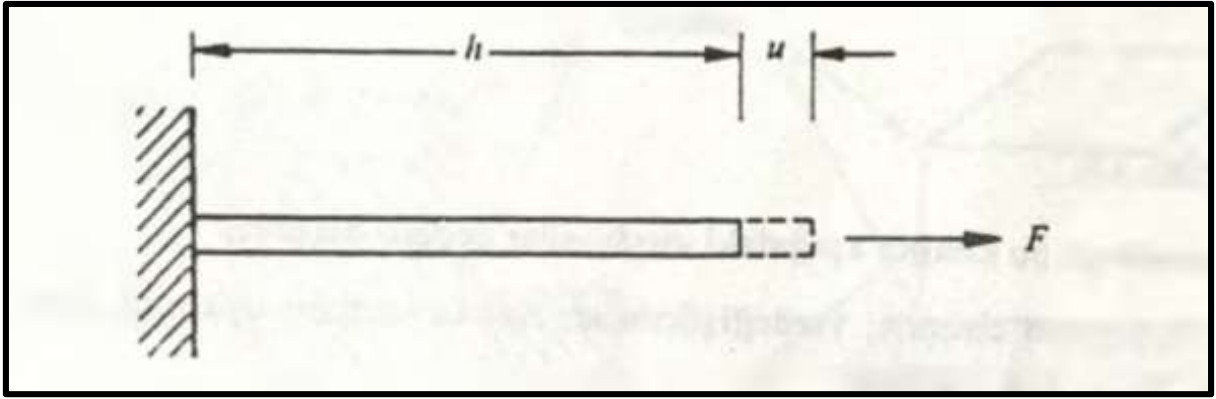
Literatürde araştırmacılar tarafından grafen, karbon nanotüpler ve grafin gibi karbon nanoyapılarını temsil etmek için benimsenen çeşitli eleman türlerini gözden geçirilmiştir. Burada incelenen literatüre göre, araştırmacılar tarafından benimsenen eleman türleri aşağıda listelendiği gibi 8 kategoriye ayrılabilir (Chandra ve ark.,2020):

CC-Kiriş: Bu kategori altında, literatürde karbon nanoyapılarındaki kovalent bağları (C-C) temsil etmek için 1D elemanlar kullanılmıştır (Chandra ve ark ,2020). Kiriş elemanlar genel olarak 3 boyutlu olup 3 boyutta da işlem kabiliyeti sağlamaktadır. Elemanın uzayda 2 düğüm noktası vardır. Üçüncü düğümü ise serbestlik derecesi özelliği taşımayan sadece koordinat sistemini tarif etmek amacıyla kullanılan düğümdür.

Elemanın her iki ucunda birer düğüm noktası mevcuttur ve bu düğüm noktalarının da her birinin 6 toplamda 12 serbestlik derecesi vardır. Bunlar öteleme ve dönme serbestlik dereceleridir. Eleman herhangi bir yönden gelen dönme ve öteleme amaçlı kuvvetlere karşı direnç gösterme kabiliyetine sahiptir. Elemanı tanımlamak için Elastiklik modülü (E), Poisson oranı (ν), Kayma modülü (G), Kesit alanı, Atalet momentleri, Polar atalet momenti (J) ve düğüm koordinatları verilmelidir (Güler ve Şen,2015)

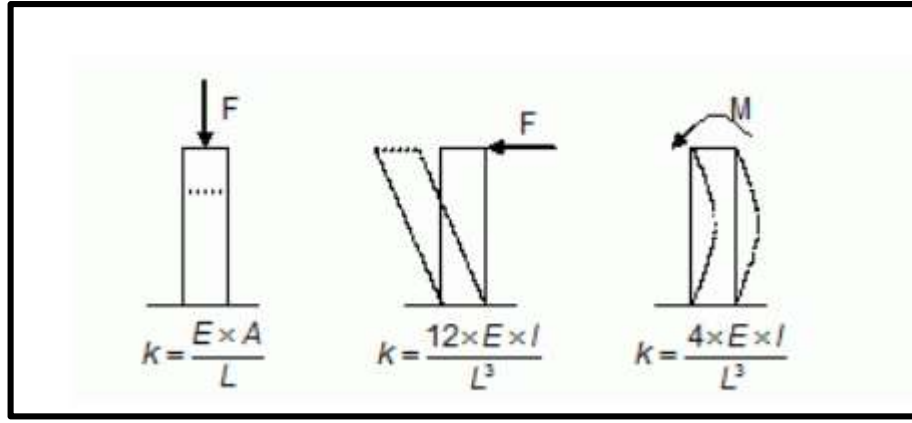
CC-Yaylar: Bu kategori altında, araştırmacılar karbon nanoyapılarındaki kovalent bağları (C-C) temsil etmek için yay elemanlarını kullanmışlardır (Chandra ve ark.,2020). Çubuk veya kirişlerde çözüm yapılırken bu yapılar düz çizgi şeklinde veya yay şeklinde modellenir. Bunun sebebi elastik bölgede çubukların yay davranışı göstermeleridir ve işlemler yay varsayımı yapılarak çözülür. Bir yay elemanın iki düğüm noktası vardır. Düğüm noktalarından biri duvara mesnetlendiği varsayılırsa diğer düğüme uygulanan kuvvet nedeniyle serbest olan düğüm hareket eder. Bu hareket ve problem doğrusal yapıdadır yani direngenlik ve kuvvet çözüme bağlı olarak değişmez. (Anonim, 2022)

Yay sabiti sonlu elemanlar yönteminin yapı taşıdır. Yöntem aslında bir direngenlik yöntemidir. Şekil 28’da a kesitli, E elastiklik modülüne ve u deplasmanına sahip F kuvveti etki ettirilmiş prizmatik eksenel bir kiriş görülmektedir. Yay sabiti birim yer değiştirme için gerekli kuvvet olarak tanımlanır. O halde yay sabiti $F/u=aE/h$ olmalıdır (Günay,1993).



Şekil 27. Eksenel bir kuvvet etkisindeki, uniform prizmatik kiriş (Günay, 1993)

Direngeklilik(k) birim yer değiştirme için uygulanan kuvvet olarak tanımlanabilir. Şekil 29’da çubuğun kesit alanı A, elastisite modülü E, atalet momenti I verilmiştir. Bir sonlu elemanın direngenlik sabiti yükleme türüne göre değişkenlik göstermektedir. Buna göre bir sonlu eleman için o elemanın serbestlik derecesine bağlı olarak, birden fazla direngenlik sabitlerinden söz edilebilir. Bu sabitlerin tamamı Direngenlik Matrisi (K) adı verilen matris ile ifade edilmektedir (Anonim,2022).



Şekil 28. Cisme farklı yönlerden kuvvet uygulama

Bir sonlu elemanın düğüm noktalarının yer değiştirmelerinin sayısı elemanın serbestlik derecesi olarak tanımlanır. Bu sonlu yay elemanın düğüm noktalarındaki serbestlikler doğrultusunda kuvvetler meydana gelir. Sonlu bir elemanın 6 serbestlik derecesi vardır. Bunlar X, Y ve Z eksenleri doğrultusunda oluşan U_X, U_Y, U_Z yer değiştirmeleri (deplasmanlar) ve yine sırasıyla $\theta_{XY}, \theta_{YZ}, \theta_{XZ}$ dönmeleri elemana ait serbestliklerdir. Bu serbestlikler sonucunda hesaplanan F_X, F_Y, F_Z kuvvetleri ile eksenler etrafında M_{XY}, M_{YZ}, M_{XZ} momentleri o sonlu elemana ait kesit tesirlerini ifade etmektedir (Anonim,2022).

CC-KÇÇ: Bu kategori altında, araştırmacılar karbon nanoyapılarındaki kovalent bağları (C-C) temsil etmek için kafes veya çubuk veya çerçeve elemanlarını benimsemişlerdir (Chandra ve ark.,2020).

2B-Eleman: Bu kategori altında, araştırmacılar bütün bir karbon nanoyapıyı temsil etmek için iki boyutlu düzlemsel elemanlar benimsemişlerdir (Chandra ve ark.,2020).

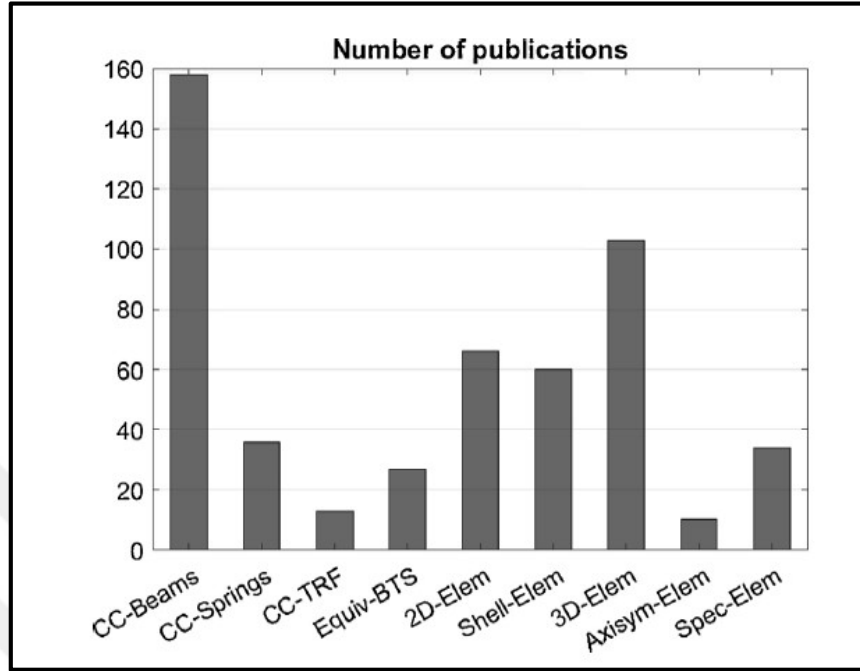
Kabuk Eleman: Bu kategori altında, araştırmacılar bütün bir karbon nanoyapıyı temsil etmek için kabuk elemanları kullanmışlardır (Chandra ve ark.,2020). Kavisli yüzeyler üzerinde açıklıklı ince yapılardır. Örneğin deniz kabuğu, yumurta kabuğu, konteynerler, borular, tankerler vb.

3B-Eleman: Bu kategori altında, araştırmacılar bütün bir karbon nanoyapıyı temsil etmek için üç boyutlu katı elemanlar kullanılır. Oldukça yüksek kapasiteli bilgisayar ihtiyacı vardır çünkü çok sayıda eleman oluşacaktır (Chandra ve ark.,2020).

Dönel simetri-Eleman: Bu kategori altında, araştırmacılar bütün bir karbon nanoyapısını temsil etmek için eksenimetrik elemanlar kullanmışlardır (Chandra ve ark.,2020).

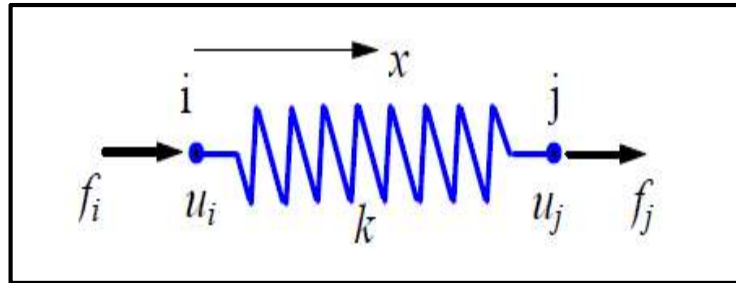
Özel Eleman Tipleri: Bu kategori altında, araştırmacılar karbon nanoyapılarını temsil etmek için özel amaçlı özelleştirilmiş elemanlar benimsemişlerdir (Chandra ve ark.,2020).

Mevcut makalelerde incelenen makalelerin sayısına göre, araştırma makalelerinin çoğunluğu, C-C bağlarının kiriş elemanları tarafından karbon nanoyapıları temsil etmek için bir uzay çerçevesi tipi sonlu elemanlar modeli uygulamıştır (Chandra ve ark.,2020).



Şekil 29. 2018 Yılına kadar yayınlara ilişkin istatistikler: karbon nanoyapılarını temsil etmek için kullanılan çeşitli element türleri (Chandra ve ark.,2020).

Çubuk Eleman Hesabı



Şekil 30. Çubuk elemanın yay gösterimi (Liu,2003)

Burada ;

i ve j düğüm noktalarını ,

u_i ve u_j yer değiştirmeleri

f_i ve f_j yüklemeleri,

k ise yay sabiti yani direngenliği göstermektedir.

Hooke kanunundan yola çıkarak direngenlik sabiti şu şekilde bulunur.

$$\sigma = E \cdot \varepsilon$$

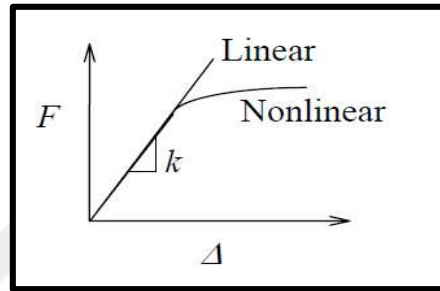
$$\frac{F}{A} = E \frac{\Delta L}{L}$$

$$F = \frac{EA}{L} \Delta L$$

$$k = \frac{EA}{L} \text{ (direngengik sabiti)}$$

$$F = k \Delta L$$

Başka bir deyişle k direngelik sabiti Kuvvet Uzama diyagramının eğimidir.



Şekil 31. Kuvvet-Uzama diyagramı(Liu,2003)

$k = F/\Delta L (>0)$, bir birim gerilme üretebilmek için gereken kuvvet miktarıdır.

Yay için kuvvet dengesi yazılırsa;

$$f_i = -F = -k(u_j - u_i) = ku_i - ku_j$$

$$f_j = F = k(u_j - u_i) = -ku_i + ku_j$$

Bu veriler matris formunda yazılacak olursa

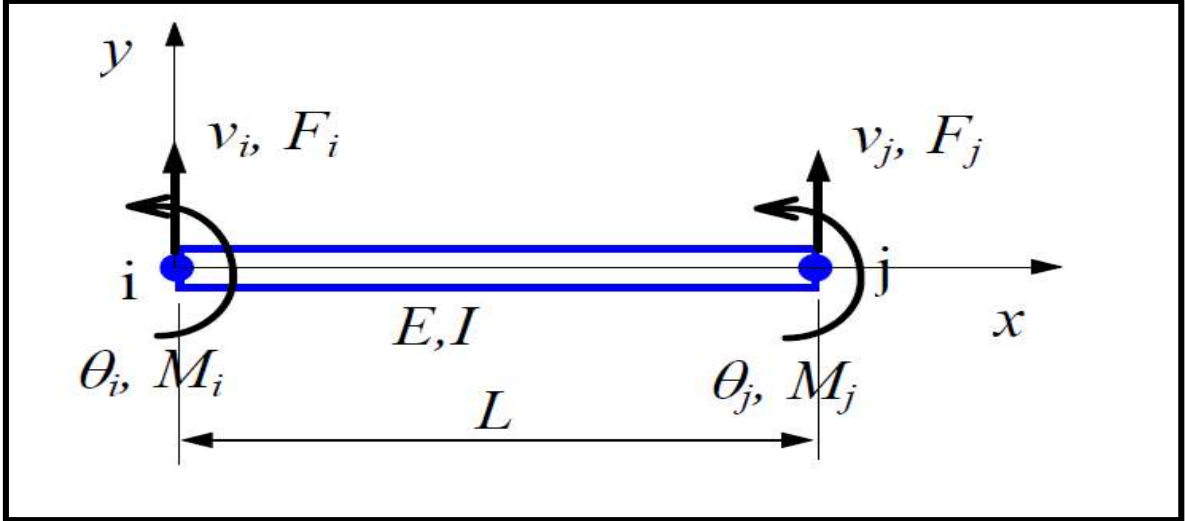
$$\begin{pmatrix} k & -k \\ -k & k \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_i \\ f_j \end{Bmatrix}$$

veya

$$\mathbf{k} \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

burada k= direngelik matrisi, u= yer değıştirme vektörü ve f=kuvvet vektörüdür.

Kiriř Eleman Formülasyonu



Şekil 32. Basit düzlem kiriř eleman (Liu ,2003)

Şekil 34'te gösterilen model kiriř eleman modelidir. Burada,

L uzunluk,

E elastiklik modülü,

$v = v(x)$ nötr ekseninde yer deęiřtirme,

$\theta = \frac{dv}{dx}$ z ekseninde etrafında dönme,

$F = F(x)$ kayma kuvveti,

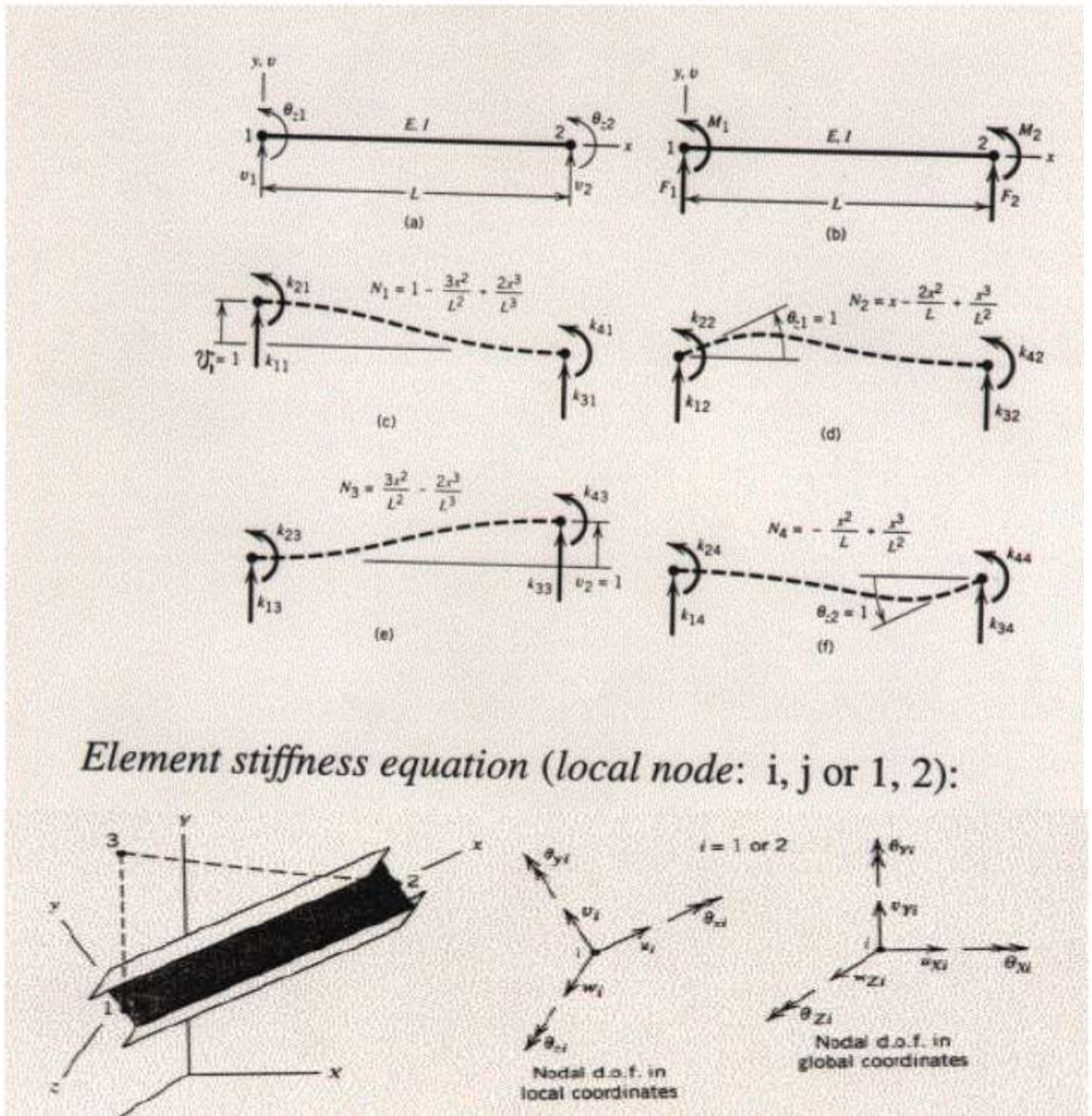
$M = M(x)$ z ekseninde moment'tir.

Basit kiriř teorisine göre

$$EI \frac{d^2v}{dx^2} = M(x) \text{ ve } \sigma = \frac{-My}{I}$$

DIREKT YÖNTEM (direkt yöntemi anlamadım)

Direngenlik matrisinin her sütununu hesaplamak için temel ışıın teorisinden elde edilen sonucu kullanmadır(Liu,2003),



Şekil 33. 2B ve 3B elemanların direngelik eşitlikleri(Liu,2003)

Lokal koordinatlarda 2 boyutlu kiriş için direngelik matrisi;

$$\frac{EI}{L^3} \begin{bmatrix} 12 & 6L & -12 & 6L \\ 6L & 4L^2 & -6L & 2L^2 \\ -12 & -6L & 12 & -6L \\ 6L & 2L^2 & -6L & 4L^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_i \\ \theta_i \\ v_j \\ \theta_j \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_i \\ M_i \\ F_j \\ M_j \end{Bmatrix}$$

Lokal koordinatlarda 3 boyutlu kiriş için direngenlik matrisi;

$$\frac{EI}{L^3} \begin{bmatrix} v_1 & \theta_1 & v_2 & \theta_2 & v_3 & \theta_3 \\ \begin{bmatrix} 12 & 6L \\ 6L & 4L^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -12 & 6L \\ -6L & 2L^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -12 & -6L \\ 6L & 2L^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 24 & 0 \\ 0 & 8L^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -12 & 6L \\ -6L & 2L^2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} -12 & -6L \\ 6L & 2L^2 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 12 & -6L \\ -6L & 4L^2 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1 \\ \theta_1 \\ v_2 \\ \theta_2 \\ v_3 \\ \theta_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_{1Y} \\ M_1 \\ F_{2Y} \\ M_2 \\ F_{3Y} \\ M_3 \end{Bmatrix}$$

KİRİŞ ELEMEN FORMÜLASYONU

Şekil fonksiyonları (Şekil 34);

$$N_i(\xi) = 1 - \xi$$

$$N_j(\xi) = \xi$$

Burada;

$$\xi = \frac{x}{L}, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \text{ olmak üzere,}$$

Deplasman fonksiyonu şekil fonksiyonu ile düğümlerinin deplasmanının çarpımına eşittir.

Yani;

$$u(x) = u(\xi) = N_i(\xi) \cdot u_i + N_j(\xi) \cdot u_j$$

$$u = [N_i \ N_j] \cdot \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix} = N \cdot u$$

ve

$$\varepsilon = \frac{du}{dx} = \frac{d(Nu)}{dx} = \underbrace{\left(\frac{dN}{dx} \right)}_B u = B u$$

Burada şekil değişimi B matrisi ve düğüm deplasmanlarının çarpımına dönüştü. O halde,

$$B = \frac{d}{dx} [N_i(\xi) \ N_j(\xi)] = \frac{d}{d\xi} [N_i(\xi) \ N_j(\xi)] \cdot \frac{d\xi}{dx} \text{ ve } B = [-1/L \ 1/L]' \text{ dir.}$$

$$\varepsilon = B u \text{ ise}$$

$$\sigma = E B u \text{ olur.}$$

$$u = \frac{1}{2} \int \sigma^T \varepsilon \, dv = \frac{1}{2} \int (u^T B^T E B u) \, dv = \frac{1}{2} u^T \left[\int B^T E B \, dv \right] u$$

Bu ifade yapılan iş cinsinden yazılacak olursa,

$$w = \frac{1}{2} f_i u_i - \frac{1}{2} f_j u_j = \frac{1}{2} u^T f$$

$$u = w$$

$$\frac{1}{2} u^T \left[\int B^T E B \, dv \right] u = \frac{1}{2} u^T f$$

$$\left[\int B^T E B \, dv \right] u = f \text{ olur.}$$

$f = k u$ ise $k = \left[\int B^T E B \, dv \right]$ 'dir ve bu da eleman direngenlik matrisidir.

Buradan yola çıkarak

$$k = \int_0^L \begin{Bmatrix} -1/L \\ 1/L \end{Bmatrix} E \begin{bmatrix} -1/L & 1/L \end{bmatrix} A \, dx = \frac{EA}{L} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ olur.}$$

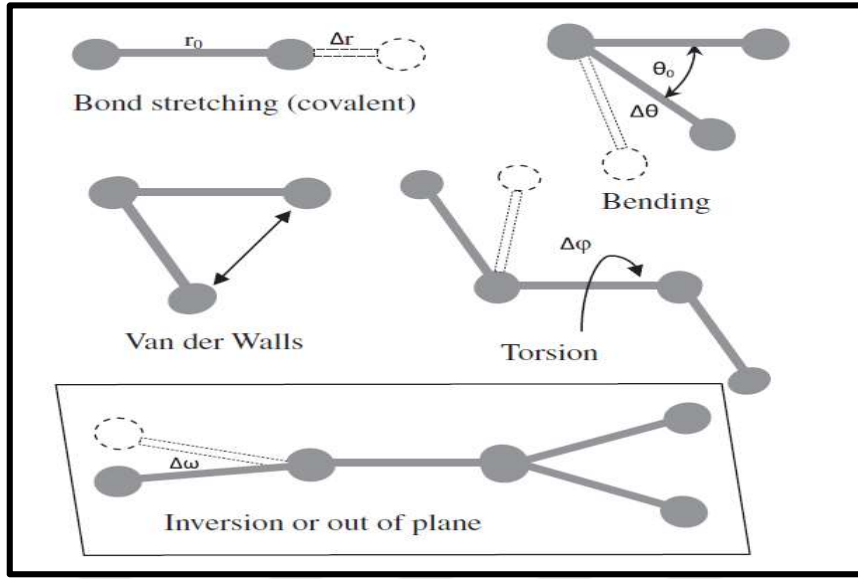
Kiriş Elemanların Elastik Modülünün Hesaplanması

KNT'lerde Sonlu elemanlar modeli oluşturulurken şunlara dikkat edilmiştir.

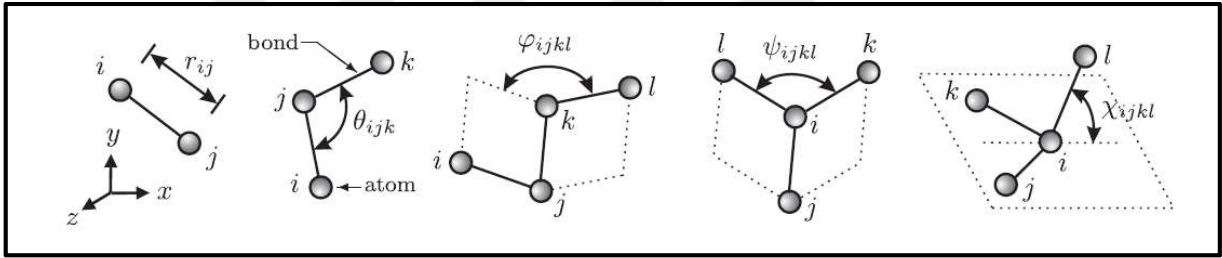
- Üç boyutlu bir çerçeve yapı oluşturulur
- Karbonlar düğüm noktası kabul edilirken karbonlar arası bağlar kiriş eleman olarak kabul edilir.
- Kiriş elemanda enerji formülü kullanılarak elastiklik modülleri belirlenir.

Kiriş elemanlarının elastiklik modüllerini hesaplamak için moleküler ve süreklilik mekaniği arasında bir bağlantı kullanılır. Moleküler mekanik açısından, KNT'ler karbon atomlarından oluşan büyük moleküller olarak kabul edilebilir. Atom çekirdekleri malzeme noktaları olarak kabul edilebilir ve hareketleri elektron çekirdeği ve çekirdek çekirdeği etkileşimleri tarafından üretilen bir kuvvet alanı ile düzenlenir.

Kuvvet alanı, yalnızca molekülü oluşturan çekirdeklerin nispi konumlarına bağlı olan potansiyel enerji şeklinde ifade edilir (Tserpes,2004).



Şekil 34. Moleküler mekanik teorisinde atomlar arası etkileşimler. (Lu,2012)



Şekil 35. Atom Kinetiği (Wackerfuß,2009)

Şekil 36’da moleküler mekanik teorisinde atomlar arası etkileşimler verilmiştir. Bağ potansiyeli bir Mors potansiyeli olarak verilir. Şekil 36 ve Şekil 37’den yola çıkarak giriş elemanda enerji çözümlemesine gidilirse;

$$U_{toplaml} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} \quad (1)$$

Burada;

U_r =Bağ gerilme enerjisi

U_θ =Eğime enerjisi

U_ϕ = Burulma enerjisi

U_ω = Düzlem dışı burulma enerjisi

U_{vdw} =Bağlanmamış burulmaya bağlı enerji

Ve formulasyon olarak şu şekildedir.

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (3)$$

$$U_\tau = U_\phi + U_\varpi = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2 \quad (4)$$

Klasik yapı mekaniğine göre, gerilme L Uzunluğunda ve A kesitinde düzgün bir kirişin N aksenal yük altında enerjisi

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} \Delta L^2 \quad (5)$$

M eğilme momenti altında I atalet momentine sahip kirişin şekil değiştirme enerjisi

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} \Delta \alpha^2 \quad (6)$$

Burada α kirişin uçlarındaki dönme açısını gösterir.

T burulma momenti altında G kayma gerilmesine sahip ve J polar atalet momenti olan kirişin şekil değiştirme enerjisi

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} \Delta \beta^2 \quad (7)$$

Burada β kirişin uçları ile J kutupsal atalet momenti arasındaki nispi dönüşür.

U_r ve U_A 'nın iki sistemdeki (moleküler ve yapısal) germe enerjilerini, U_θ ve U_M eğilme enerjilerini ve U_T ve U_τ burulma enerjilerini temsil ettiği sonucuna varılabilir. 2α dönme açısının, bağ açısının toplam $d\theta$ yüküne eşdeğer olduğu, dL 'nin dr 'ye eşdeğer olduğu ve $d\beta$ 'nin $d\phi$ 'ye eşdeğer olduğu varsayılabilir. Bu durumda

$$k_r = \frac{EA}{L} \quad (8)$$

$$k_\theta = \frac{EI}{L} \quad (9)$$

$$k_\tau = \frac{GJ}{L} \quad (10)$$

Bunlar sırasıyla bağ germe, bağ eğilme ve bağ burulma direnci sabitleridir.

$$A = \frac{\pi d^2}{4}, I = \frac{\pi d^4}{64} \text{ ve } J = 2I = \frac{\pi d^4}{32} \quad (8),(9),(10) \text{ formüllerinde yerine konulursa ;}$$

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2} \quad (11)$$

Modellemeler

Sonlu Elemanlar Modelleri

Hesaplamalı yaklaşımlar nanokompozitlerin gelişiminde önemli rol oynar. Modelleme ve simülasyonlar, nanomalzemelerin anlaşılmasında, analizinde ve tasarımında yardımcıdırlar. Nano ölçekte, analitik modellerin oluşturulması zordur ve deneylerin yapılması pahalıdır. Diğer yandan nanokompozitlerin modellenmesi etkili ve verimli bir şekilde yapılabilir. Deneylerin kapsamı, maliyetini ve zamanını azaltmaya yardımcı olmak için bazı modelleme ve simülasyon çalışmaları yaparak kolayca elde edilebilir. Simülasyonlardaki temel konular, ele alınan problemler için matematiksel modellerin veya teorilerin doğru seçilmesidir. Anlamlı bilgisayar simülasyonları, incelenen materyaller için matematiksel modellerin doğruluğuna çok bağlıdır (Liu,2003).

Modelleme teknikleri, atomistik, süreklilik ve nano ölçekli süreklilik modellemesi olarak üç ana başlıkta incelenmiştir.

Atomistik modelleme

Atomistik modelleme, etkileşimli kuvvetlere ve sınır koşullarına dayanan atomların konumlarını öngörür. KNT'lerin ve KNT'lerin allotroplarının davranışlarını simüle etmek için kullanılan ilk teknik moleküler dinamik (MD) yöntemidir (Rafiee ve ark.,2013).

AB Initio

Ab initio ve klasik moleküler modellerin tümü, sistemin durumunun başlangıç koşulu ile tam olarak tanımlandığı deterministik yani hesaplanabilir modellerdir. Bu modellerde, atomistik düzeydeki kararlı yapılar titreşimler ve büyüme için geçerlidir. AB initio teknikleri, Schrödinger denkleminin doğru bir çözümüne dayanan doğru yöntemlerdir. Ayrıca, AB initio teknikleri, atom kuvvetlerinin elektronik yapı hesaplamaları ile kademeli olarak belirlendiği yöntemlerdir (Rafiee ve ark.,2013).

Monte carlo (MC)

Karmaşık sistemleri çözmek için başka bir yöntem, rastgele dağılımlardan örnekleme yaparak problemleri araştıran ve olasılık teorisi kavramlarını kullanan Monte Carlo yöntemidir. Çok idealize edilmiş veya basitleştirilmiş etkileşim parametrelerini varsayar ve daha fazla sayıda atomla çalışılabilir. Büyük sistemlerin fiziksel ve kimyasal özellikleri, rastgele hareket eden parçacıklar üzerinde istatistiksel olarak ortalama alınarak elde edilir.

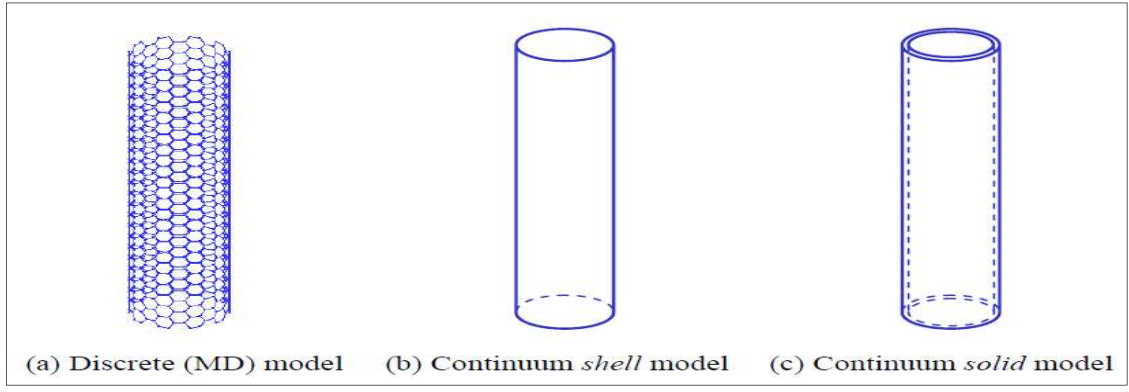
Hem MD simülasyonlarının hem de MC yöntemlerinin ana yönü ikinci Newton yasasına indirgense de, MD yöntemleri de deterministik yaklaşımlardır, MC yöntemleri ise stokastiktir (değişkendir). MD ve MC yöntemleri, atomlara etki eden kuvvetlerin atomlar arası potansiyel fonksiyonları ayırt ederek elde edildiği potansiyellere bağlıdır (Manolis ve ark.,2021).

Moleküler dinamik (MD)

Bu yöntem, bir parçacık sisteminin toplam enerjisini hesaplamak için gerçekçi çok gövdeli atomlar arası potansiyel fonksiyonları (kuvvet alanları) kullanır. Bir sistemin toplam potansiyel enerjisi ve kuvvet alanları elde edildiğinde, davranışın gerçekçi hesaplamaları ve daha sonra bir atom ve molekül sisteminin özellikleri elde edilebilir (Rafiee ve ark.,2013). Moleküler dinamik (MD) simülasyonları, atomlar arası potansiyelleri tarafından yönetilen atom etkileşimi için Newton'un hareket denklemini çözerek malzemelerin fiziksel ve mekanik özelliklerinin değerlendirilmesine izin verir (Manolis ve ark.,2021).

Sürekli ortamlar modellemesi

Modellemenin amacı, deformasyonlar, yük transfer mekanizmaları veya nano kompozitlerin etkili sertliği gibi tek duvarlı KNT'lerin veya KNT bazlı kompozitlerin tepkilerini araştırmaktır. Süreklilik mekaniği yaklaşımı, bu tür bilgileri etkili ve verimli bir şekilde sağlamak için hala güvenli bir şekilde uygulanabilir. Karbon nanotüpler için şu anda mevcut olan ana simülasyon modelleri ayrık ve süreklilik modelleri olarak sınıflandırılabilir (Şekil 37). Bu yaklaşımlarında, atomlar bireysel parçacıklar olarak kabul edilir ve aralarındaki kuvvetler potansiyel teoriler kullanılarak hesaplanır. Her parçacık için denge veya dinamik denklemler, belirli yükler altında yer değiştirme alanlarını belirlemek için oluşturulur (Liu ve Chen,2003).



Şekil 36. Modelleme teknikleri (a) Moleküler dinamik yöntemi (b) Sürekli kabuk modeli (c) Sürekli katı model (Liu ve Chen,2003).

MATERYAL VE METOD

Modellerin Oluřturulması

ANSYS Mechanical APDL

ANSYS ürünlerin üretilmeden önce bilgisayar ortamında çeřitli analizlerin yapıldığı bir programdır. Bu program analizlerin daha az maliyetli olmasına imkân sağlar. Bu sebeple günümüzde çok fazla ilgi gören bir yöntemdir (Kibar ve Öztürk,2012).

Sonlu elemanlar yöntemi ilk olarak 1940'ların başında kısmi diferansiyel denklemleri çözmek için sayısal bir teknik olarak önerilmiştir. O zamanlar, bir eleman örgüsü tanımlanabilir ve elemanların etkileşimi, çözülecek denklem sistemini oluşturmak için kullanılabilirdi. Bununla birlikte, denklem sisteminin hala elle çözülmesi gerekiyordu. Bu sınırlama, sonlu elemanlar yöntemini akademik bir merak haline getirmiştir. 1960'ların başlarında bu denklem sistemlerini çözebilecek programlar geliştirildi ve bu sonlu elemanlar yönteminin genel problemlere uygulanmasını mümkün kılmıştır.

Sonuç olarak, mühendislik uygulamalarında sonlu elemanlar yönteminin kullanılmasına olan ilgi artmaya başladı. Erken sonlu elemanlar programları, belirli bir problem türünü çözmek için geliştirilen özel kodlardı. Genellikle tek bir eleman tipi (örneğin, kirişler, eksenel simetrik kabuklar) ve tek bir yükleme türü (yapısal, termal, akış vb.) içerirler. Bu, her programın çözebileceği sorunun türünü sınırlamıştır. Aynı organizasyondaki farklı grupların farklı bilgisayar programları kullanması yaygındı. Çoğu mühendis grubu kendi sonlu elemanlar kodunu geliştirip kullanıma sundu. Bu, farklı programlardan elde edilen sonuçların uyumluluğu, bu sonuçların genel kalitesi ve mühendislerin zamanının verimli kullanılıp kullanılmadığı konusunda endişelere yol açtı (Thompson ve ark.,2017).

ANSYS Mechanical APDL Preprocessor, Solution ve Postprocessor İşlemcileri (Moaveni,2011)

Bu kısımda analizi yapılacak olan modelin eleman tipi, malzeme özellikleri, modelin koordinatları, meshleme ve yükleme işlemleri yapılmaktadır.

En sık kullanılan üç işlemci vardır;

Ön işlemci : **PREP7**,

Çözüm İşlemcisi : **SOLUTION**

Genel Son İşlemci : **POST1**.

Önişlemci (PREP7) bir model oluşturmak için gereken komutları içerir:

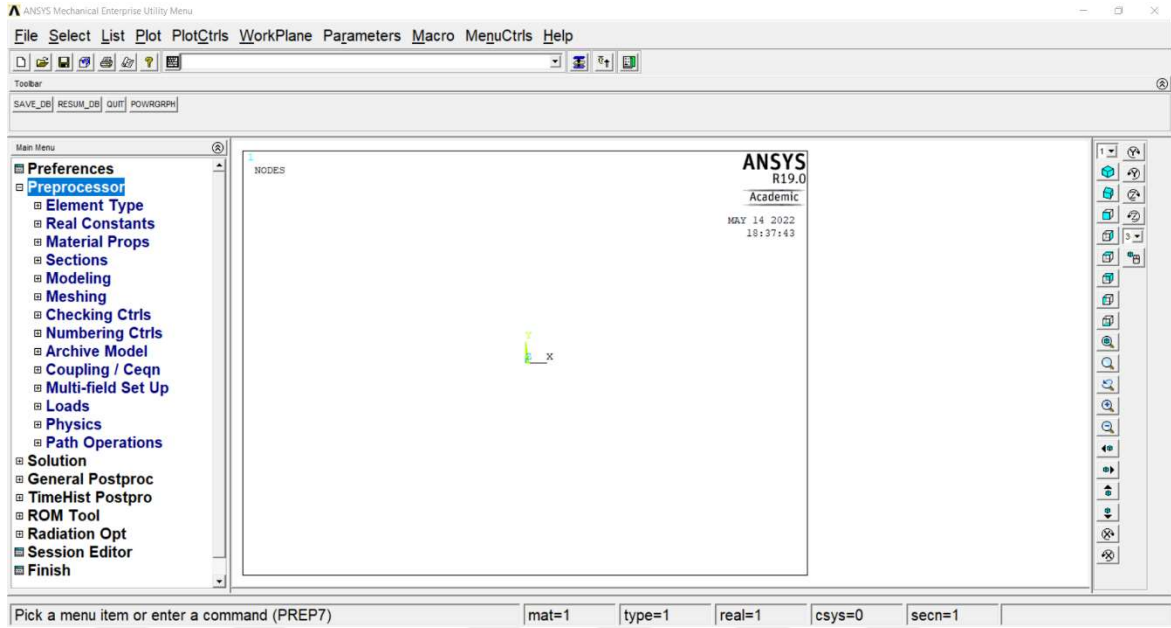
- Eleman türlerini ve seçeneklerini tanımlama
- Eleman gerçek sabitlerini tanımlama
- Malzeme özelliklerini tanımlama
- Model geometrisi oluşturma
- Mesh kontrollerini tanımlama
- Oluşturulan nesneyi mesh etme

Çözüm işlemcisi (SOLUTION), sınır koşullarının ve yüklerin uygulanmasına izin veren komutlara sahiptir. Örneğin, yapısal problemler için yer değiştirme sınır koşullarını ve kuvvetleri veya ısı transfer problemleri için sınır sıcaklıklarını veya konvektif yüzeyler tanımlanabilir. Tüm bilgiler çözüm işlemcisine (SOLUTION) sunulduktan sonra, düğüm çözümleri için çözer. Genel son işlemci (POST1), analiz sonuçlarının listelenmesine ve görüntülenmesine izin veren komutları içerir:

- Sonuç dosyasından sonuç verilerini okuma
- Eleman sonuç verilerini okuma
- Sonuçları çizdirme
- Sonuçları listeleme

Ek görevlerin yerine getirilmesine izin veren başka işlemciler de vardır. Örneğin, zaman geçmişi son işlemcisi (POST26), modelin belirli bir noktasında geçici bir analizde zaman içindeki sonuçların gözden geçirilmesine izin veren komutları içerir. Tasarım optimizasyon işlemcisi (OPT), kullanıcının bir tasarım optimizasyon analizi yapmasına izin verir.

ANSYS ile sonlu elemanlar modeli oluřturma



řekil 37. Preprocessor menüsü

Sınır Kořullarının Uygulanması, Yükleme ve Çözüm

Sonlu elemanlar analizinin bir sonraki adımı, uygun sınır kořullarının uygulanmasını ve uygun yüklemenin yapılmasını içerir. Sınır kořullarını uygulamak ve modeli ANSYS'e yüklemek için iki yol vardır. Kořullar katı modele (Keypoint, çizgiler ve alanlar) uygulanabilir veya kořullar doğrudan düğümlere ve elemanlara uygulanabilir. İlk yaklaşım tercih edilebilir, çünkü örgü değıştirilmeye karar verilirse, sınır kořulları ve yükler yeni sonlu elemanlar modeline yeniden uygulanmalıdır.

Çözüm işlemcisi (SOLUTION), sınır kořullarının ve yüklerin uygulanmasına izin veren komutlara sahiptir ve aşağıdaki seçenekleri içerir:

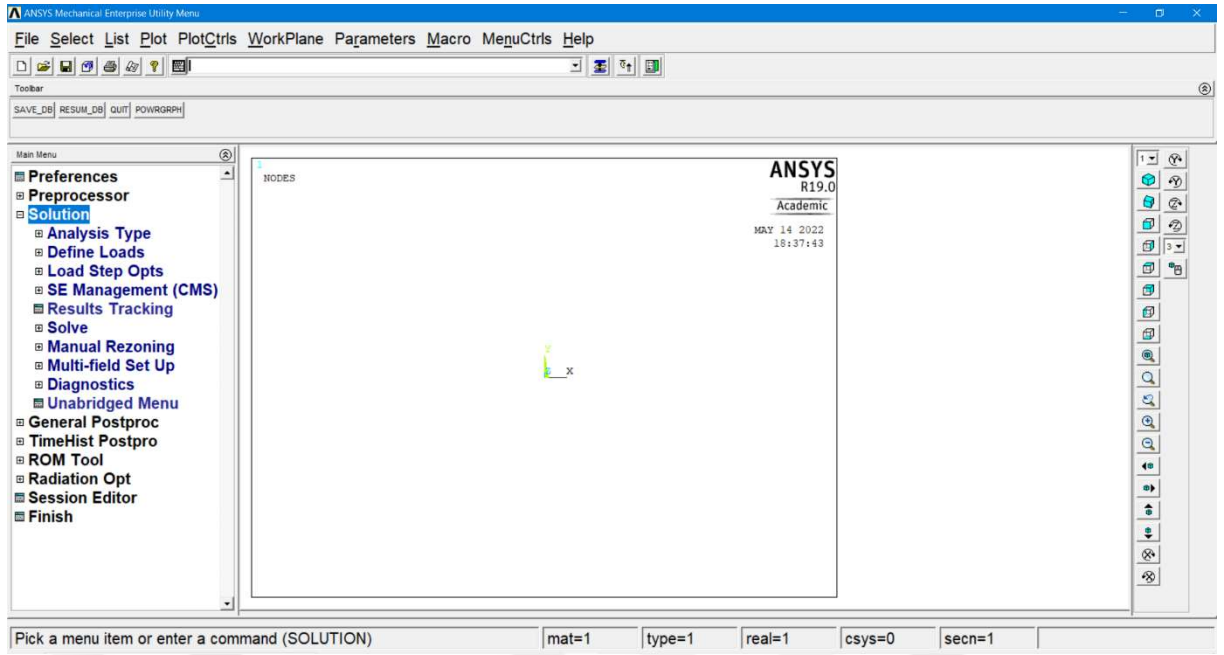
Yapısal Problemler İçin: Yer Değıştırmeler, Kuvvetler, Dağıtılmış Yükler (Basınçlar), Isıl Genleşme Sıcaklıkları, Yerçekimi

Isıl Problemler İçin: Sıcaklıklar, Isı Transfer Hızları, Konveksiyon Yüzeyleri, İç Isı Üretimi

Akışkan Problemleri: Hız, Basınç, Sıcaklık

Elektrik Problemleri İçin: Gerilimler, Akımlar

Manyetik Problemler İçin: Potansiyeller, Manyetik Akı, Akım Yoğunluğu



Şekil 38. Solution menüsü

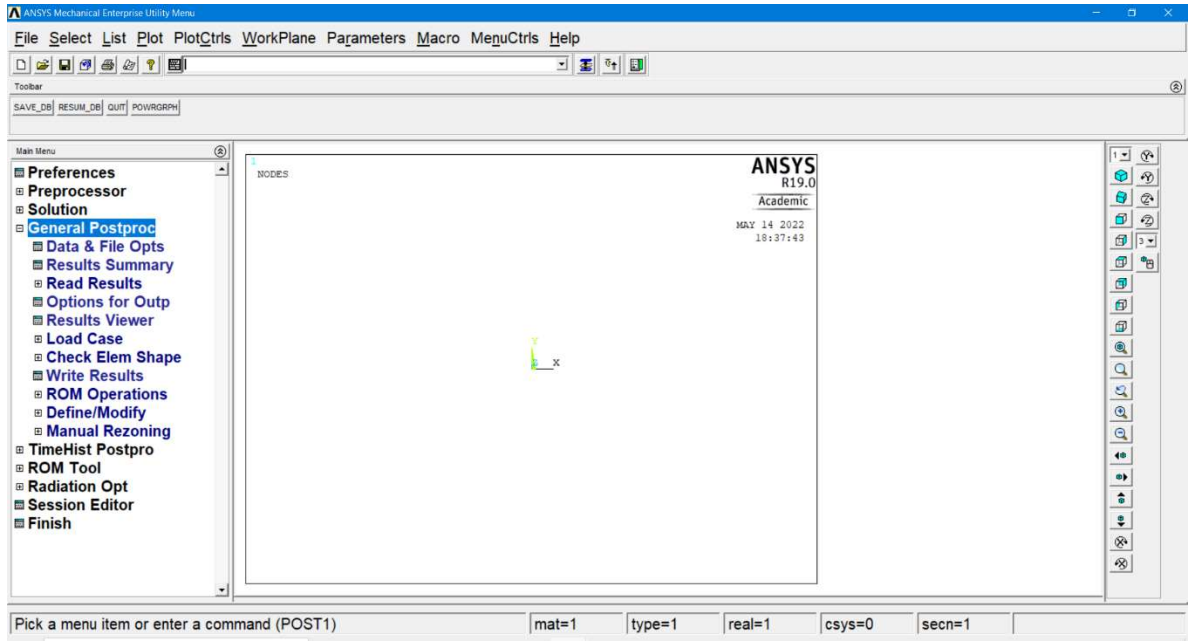
Sonlu Elemanlar Modelinin Sonuçları: POSTPROCESSING

Sonuçların gözden geçirebileceği iki son işlemci vardır:

- POST1
- POST26.

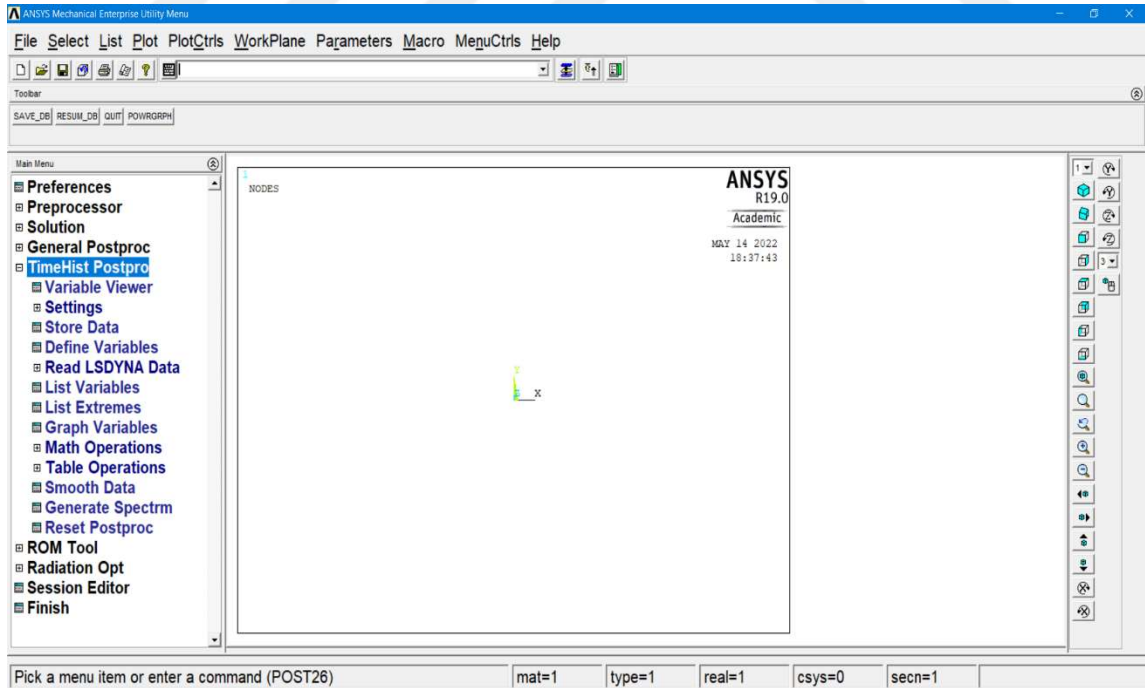
Genel son işlemci (POST1), analiz sonuçlarının listelenmesine ve görüntülenmesine izin veren komutları içerir:

- Deforme şekil görüntüler ve kontur görüntüler
- Analiz sonuçlarının tablo listeleri
- Sonuç verileri ve deplasman işlemleri için hesaplamalar
- Hata tahminleri



Şekil 39. POST 1 (General postprocessor)

Zaman geçmişini son işlemcisi (POST26), geçici bir analizde zaman içindeki sonuçların gözden geçirilmesine izin veren komutları içerir.

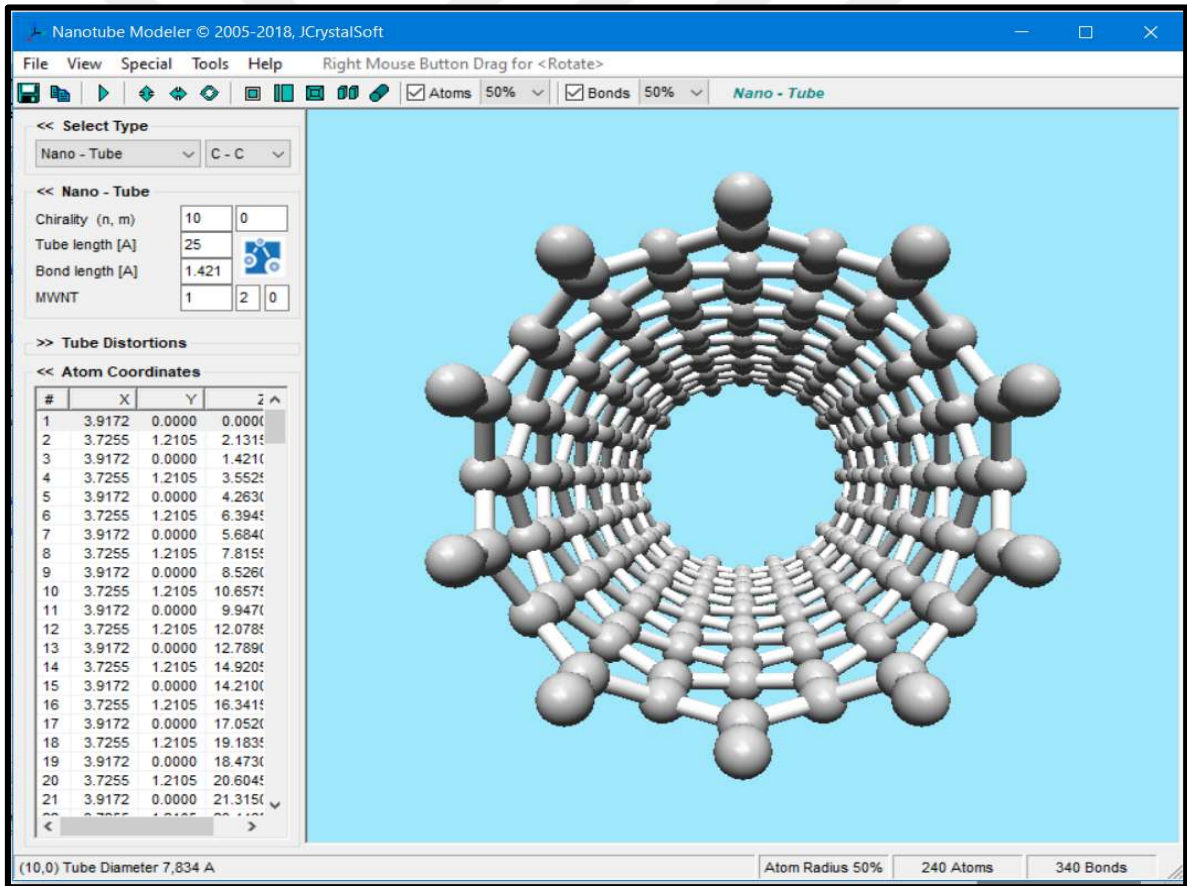


Şekil 40. POST26 (Time history postprocessor)

Nanotube Modeler

Nanotube Modeler çeşitli Nanotüp ve Nanokoniler için X Y Z koordinatlarında model oluşturmaya yarayan programdır. Atom koordinatları tamamen geometrik kriterler kullanılarak oluşturulur, hiçbir enerji hesaplaması yapılmaz. Oluşturulan geometriler tümleşik görüntüleyici kullanılarak veya seçilen bir görüntüleyici programı çağrılarak görüntülenebilir. Şekil 42’de gösterilen Chirality kutucuklarına n ve m değerlerini, Length kutucuğuna istenilen tüp boyu yazılarak istenilen uzunlukta ve atom yerleşim düzenine sahip Nanotüp elde edilir. Buna ek olarak atomlar arası bağ uzunluğu değeri de programa girilebilir.

Eğer çok duvarlı Nanotüp elde edilmek isteniyorsa MWNT kutucuklarından yararlanılmaktadır. Soldan ilk kutucuk iç içe geçecek Nanotüp sayısı ikinci kutucuk her bir tüpün n parametresini üçüncü kutucuk ise m parametresini temsil etmektedir. Oluşturulan nanotüplerin her bir atomunun X, Y ve Z koordinatında konumu da liste şeklinde verilmektedir.



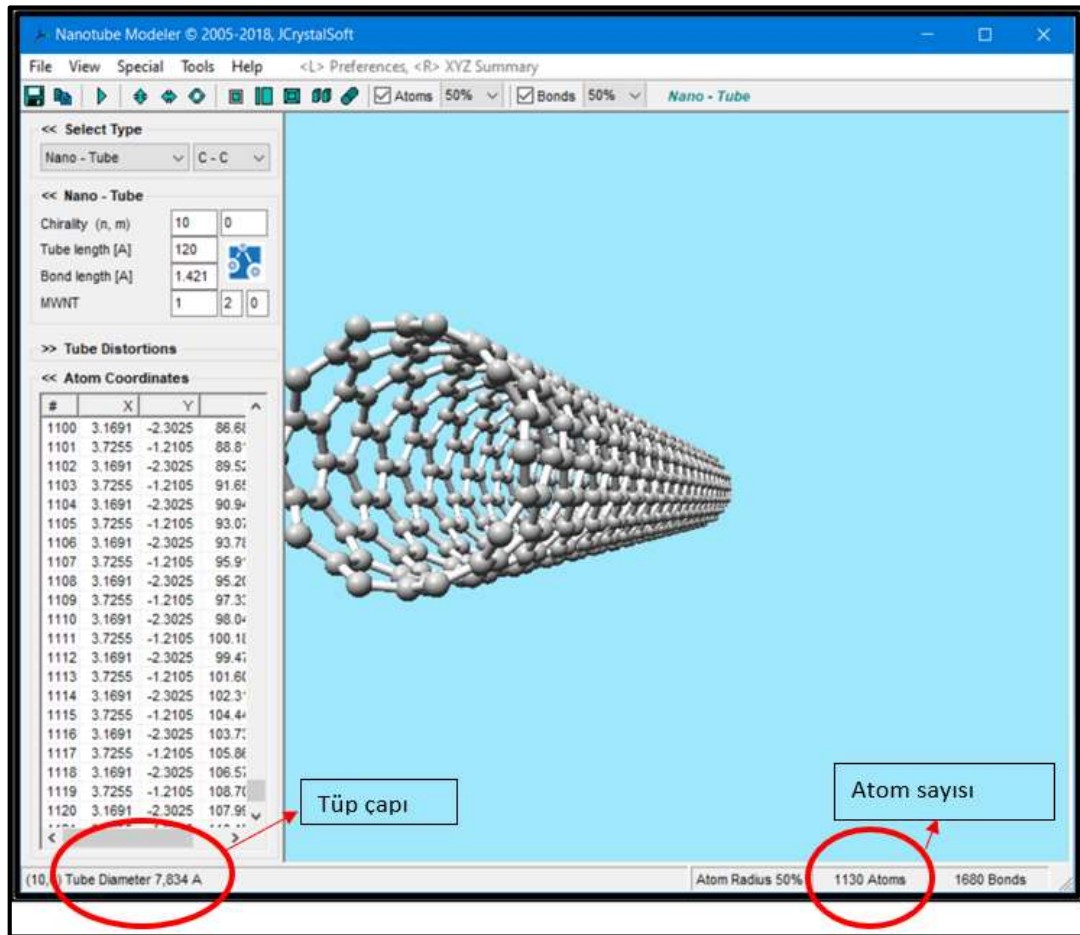
Şekil 41. Nanotube modeler programı

Modelleme Aşamaları

Karbon Nanotüplerin Adlandırılması

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Adlandırılması

Karbon nanotüplerin modellemesinde kullanılan Nanotube Modeller programından (n,m) ve uzunluklarına göre değişiklik gösteren tüpler oluşturuldu. Oluşturulan nanotüplerin tüp çapı ve atom sayısı programdan alındı ve tüm tüpler için bu veriler derlendi. Şekil 43'te (10,0), 120 Å nanotüpünün tüp çapı sol alt köşede, atom sayısı yani düğüm sayısı da sağ alt köşede verilmiştir.

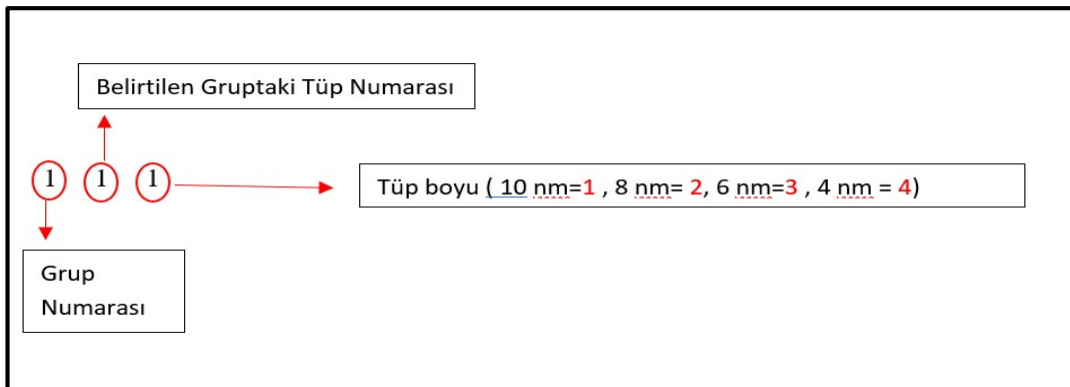


Şekil 42. Nanotube Modeller Programından Tüp Çapı ve Düğüm Sayısı Okuma

Tablo 4. Oluşturulan nanotüplerin n,m ve L değerleri

	n	m	L (nm)	TÜP NUMARASI
1. GRUP	10	0	12	1. TÜP
	10	3	12	2. TÜP
	10	6	12	3. TÜP
	10	10	12	4. TÜP
2. GRUP	20	0	12	1. TÜP
	20	7	12	2. TÜP
	20	14	12	3. TÜP
	20	20	12	4. TÜP
3. GRUP	30	0	12	1. TÜP
	30	10	12	2. TÜP
	30	20	12	3. TÜP
	30	30	12	4. TÜP
4. GRUP	40	10	12	1. TÜP
	40	13	12	2. TÜP
	40	26	12	3. TÜP
	40	40	12	4. TÜP
5. GRUP	50	0	12	1. TÜP
	50	17	12	2. TÜP
	50	34	12	3. TÜP
	50	50	12	4. TÜP

Tablo 5’te (n,m) ve L değerlerine bağlı olarak nanotüpler elde edildikten sonra programdan her bir nanotüpün düğüm sayısını ve tüp çapı bilgilerini alınarak daha sonra kullanması için tabloya eklendi. Her bir nanotüpün analizi 4,6,8,10 nm olmak üzere dört tüp uzunluğunda toplamda 80 nanotüp için isimlendirmeler ve analizler yapıldı. Nanotüp isimlendirmeleri Şekil 44’te gösterildiği gibi yapılmıştır. İlk hane Grup numarası, ikinci hane belirtilen gruptaki tüp numarası, üçüncü hane ise tüp boyuna karşılık gelen numara olarak belirlendi.

**Şekil 43.** Tek duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi

Örneğin;

111= 1. Grup, 1. Tüp, 10 nm

112= 1. Grup, 2. Tüp, 8 nm

113= 1. Grup, 3. Tüp, 6 nm

114= 1. Grup, 4. Tüp, 4 nm

211= 2. Grup, 1. Tüp, 10 nm

334 =3. Grup, 3. Tüp, 4 nm şeklindedir.

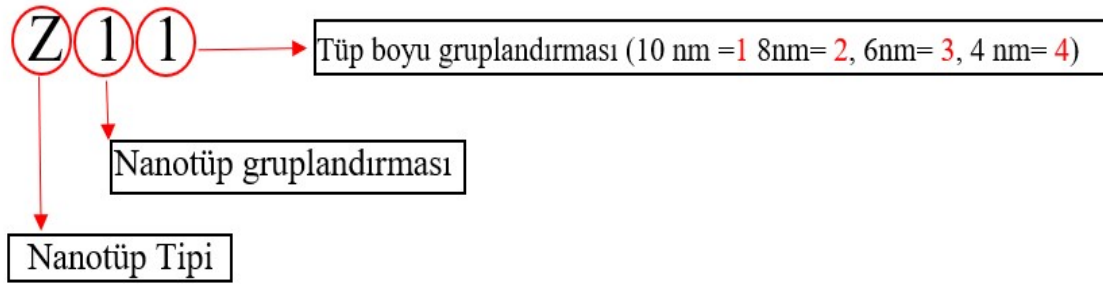
Nanotüp isimlendirmelerinin tamamı Tablo 6’da verilmiştir.

Tablo 5. Oluşturulan nanotüplerin adlandırılması

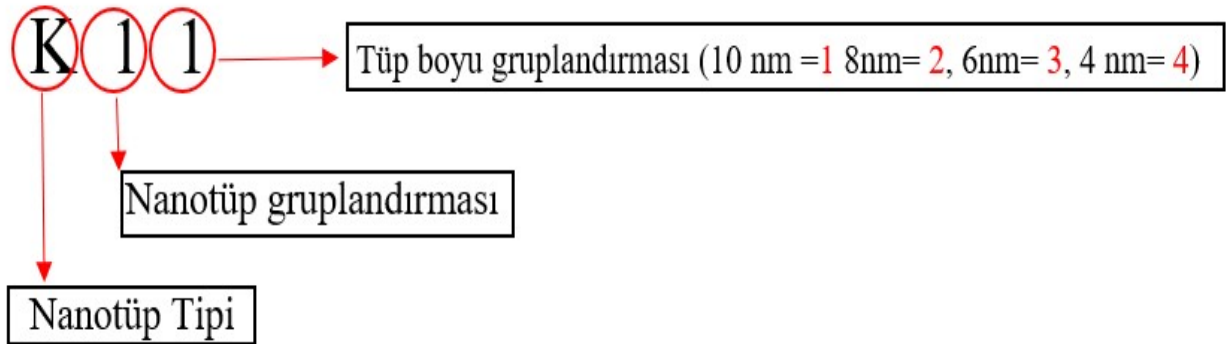
	Tüp No	n	m	L=10 nm	L=8 nm	L=6 nm	L=4 nm
1. GRUP	1	10	0	111	112	113	114
	2	10	3	121	122	123	124
	3	10	6	131	132	133	134
	4	10	10	141	142	143	144
2.GRUP	1	20	0	211	212	213	214
	2	20	7	221	222	223	224
	3	20	14	231	232	233	234
	4	20	20	241	242	243	244
3. GRUP	1	30	0	311	312	313	314
	2	30	10	321	322	323	324
	3	30	20	331	332	333	334
	4	30	30	341	342	343	344
4. GRUP	1	40	10	411	412	413	414
	2	40	13	421	422	423	424
	3	40	26	431	432	433	434
	4	40	40	441	442	443	444
5. GRUP	1	50	0	511	512	513	514
	2	50	17	521	522	523	524
	3	50	34	531	532	533	534
	4	50	50	541	542	543	544

Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Adlandırılması

Çift duvarlı karbon nanotüpler yine Nanotube Modeler programı kullanılarak ve önce iç tüp daha sonra dış tüp oluşturularak modellenmeye başlandı. Tek duvarlı tüplerde olduğu gibi nanotüplerin adlandırılması yapıldı. Tablo 7-8’ de verilen adlandırma Zikzak ve Koltuk tip olmak üzere iki tip nanotüp için yapıldı. Adlandırmalar yine üç haneli olup ilk hane nanotüp tipinin ilk harfi (Z veya K), ikinci hane gruplandırma sırası, üçüncü hane tüp boyuna göre sıralaması. Örneğin; Z11 nanotüpü için adlandırma Şekil 45’te , K11 nanotüpü için adlandırma Şekil 46’da verilmiştir.



Şekil 44. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi



Şekil 45. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi

Tablo 6. Oluşturulan zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi

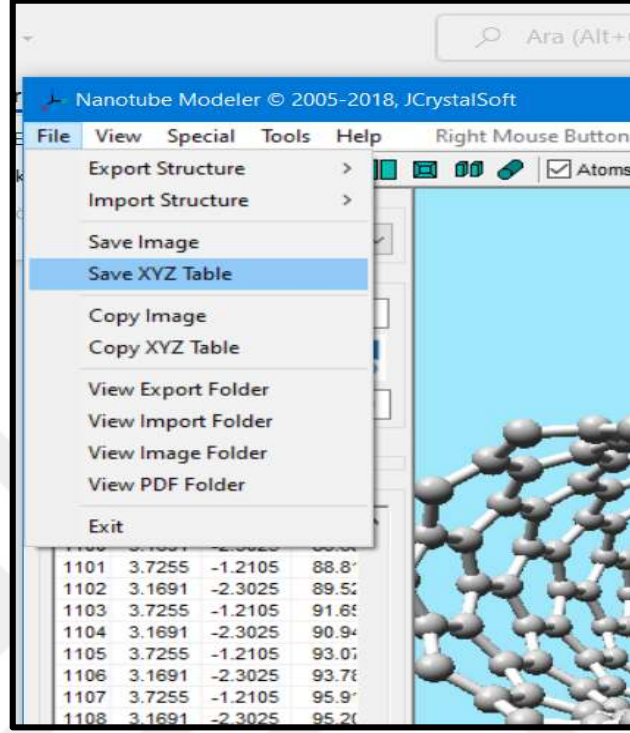
KNT TİPİ	GRUPLANDIRMA	İSİMLENDİRME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOYU
ZİKZAK KNT	Z1	Z11	10,0	21,0	10
		Z12	10,0	21,0	8
		Z13	10,0	21,0	6
		Z14	10,0	21,0	4
	Z2	Z21	11,0	22,0	10
		Z22	11,0	22,0	8
		Z23	11,0	22,0	6
		Z24	11,0	22,0	4
	Z3	Z31	12,0	23,0	10
		Z32	12,0	23,0	8
		Z33	12,0	23,0	6
		Z34	12,0	23,0	4
	Z4	Z41	13,0	24,0	10
		Z42	13,0	24,0	8
		Z43	13,0	24,0	6
		Z44	13,0	24,0	4
	Z5	Z51	14,0	25,0	10
		Z52	14,0	25,0	8
		Z53	14,0	25,0	6
		Z54	14,0	25,0	4

Tablo 7. Oluşturulan koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin isimlendirilmesi

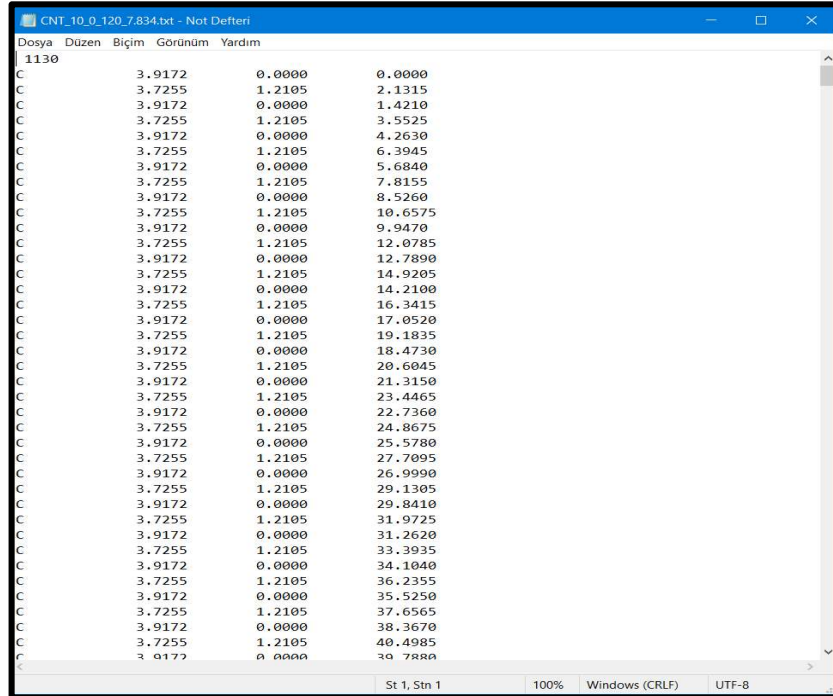
KNT TİPİ	GRUPLANDIRMA	İSİMLENDİRME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOYU
KOLTUK KNT	K1	K11	10,10	16,16	10
		K12	10,10	16,16	8
		K13	10,10	16,16	6
		K14	10,10	16,16	4
	K2	K21	11,11	17,17	10
		K22	11,11	17,17	8
		K23	11,11	17,17	6
		K24	11,11	17,17	4
	K3	K31	12,12	18,18	10
		K32	12,12	18,18	8
		K33	12,12	18,18	6
		K34	12,12	18,18	4
	K4	K41	13,13	19,19	10
		K42	13,13	19,19	8
		K44	13,13	19,19	6
		K43	13,13	19,19	4
	K5	K51	14,14	20,20	10
		K52	14,14	20,20	8
		K53	14,14	20,20	6
		K54	14,14	20,20	4

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Oluşturulması Ve ANSYS Mechanical APDL'e Aktarılması

ADIM 1: İlk olarak Nanotube Modeler programından (n,m) ve L değerleri girildi. Daha sonra FILE > Save XYZ Table adımları izlenerek nanotüpün düğüm koordinatları .txt uzantılı olarak kaydedildi.



Şekil 46. Nanotube modeller verilerin kaydedilmesi



Şekil 47. Düğüm noktalarının koordinatları

ADIM 2: Kaydedilen .txt uzantılı koordinatlar Excell'den çağırılarak düzenlemeler yapıldı. C yazan sütun 1,2,3 şeklinde değiştirildi, diğer üç sütunda yer alan düğüm koordinatları Angström biriminden nanometre birimine çevrildi.

Metin İçeri Aktarma Sihirbazı - Adım 1 / 3

Metin Sihirbazı verinizin Sabit Genişlikli olduğunu belirledi.
Bu doğru ise, İleri'yi ya da verinize en uygun veri türünü seçin.

Özgün veri türü

Verinizi en iyi tanımlayan dosya türünü seçin:

☐ Sınırlandırılmış - Her alan virgöl ve sekme gibi karakterle ayrılmış.

☒ Sabit genişlikli - Alanlar, aralarında boşluklarla sütunlara hizalanmış.

Veri içeri aktarma başlangıç satırı: 1 Dosya kaynağı: 857 : Türkçe (DOS)

☐ Verilerimin üst bilgileri var.

C:\Users\lenovo\Desktop\Yeni klasör (2)\CNT_10_0_120_7.834.txt dosyasının önizlemesi.

1	1130			
2	C	3.9172	0.0000	0.0000
3	C	3.7255	1.2105	2.1315
4	C	3.9172	0.0000	1.4210
5	C	3.7255	1.2105	3.5525
6	C	3.9172	0.0000	4.2630

Şekil 48. Aktarma penceresi 1/3

Metin İçeri Aktarma Sihirbazı - Adım 2 / 3

Bu ekran, alan genişliklerini (sütun sonlarını) ayarlamanıza izin verir.
Oklu satırlar sütun kesmelerini gösterir.

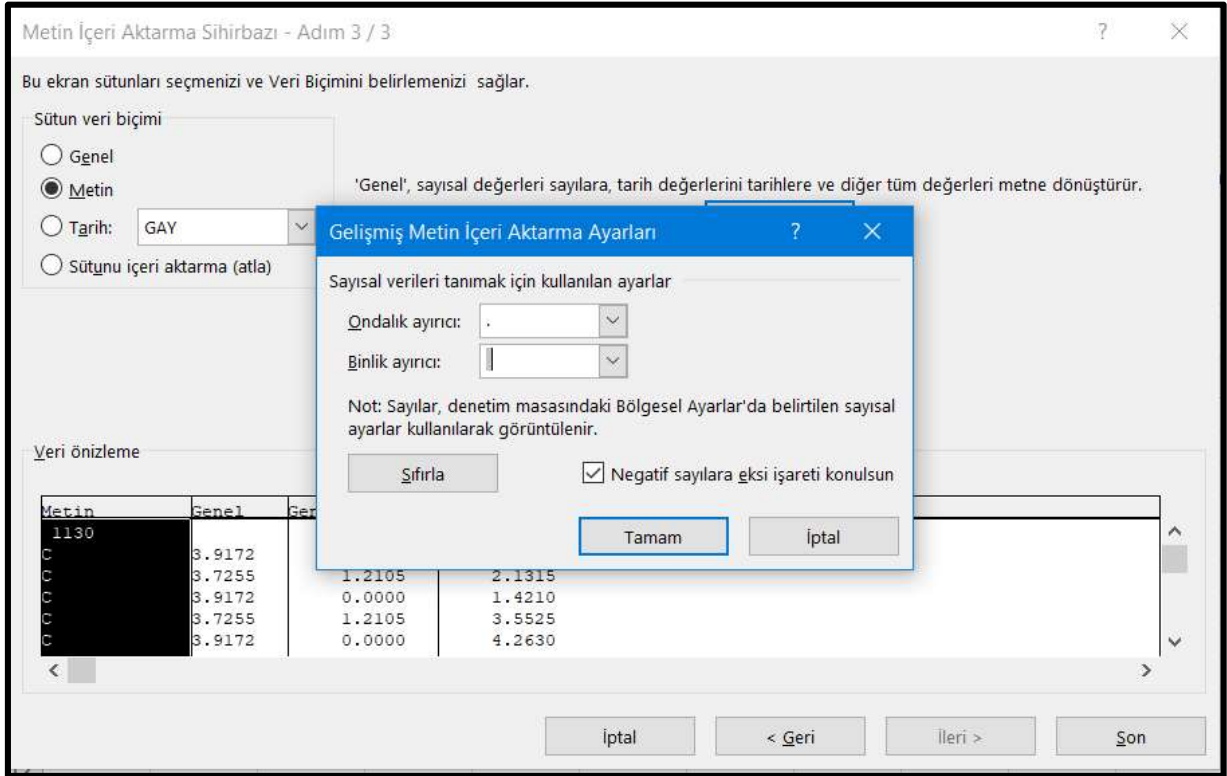
Kesme satırı OLUŞTURMAK için istediğiniz konuma tıklayın.
Kesme satırını SİLMEK için satır üzerinde çift tıklayın.
Kesme satırını TAŞIMAK için satıra tıklayın ve sürükleyin.

Veri önizleme

10 20 30 40 50 60 70 80 90 100

1130			
C	3.9172	0.0000	0.0000
C	3.7255	1.2105	2.1315
C	3.9172	0.0000	1.4210
C	3.7255	1.2105	3.5525
C	3.9172	0.0000	4.2630

Şekil 49. Aktarma penceresi 2/3

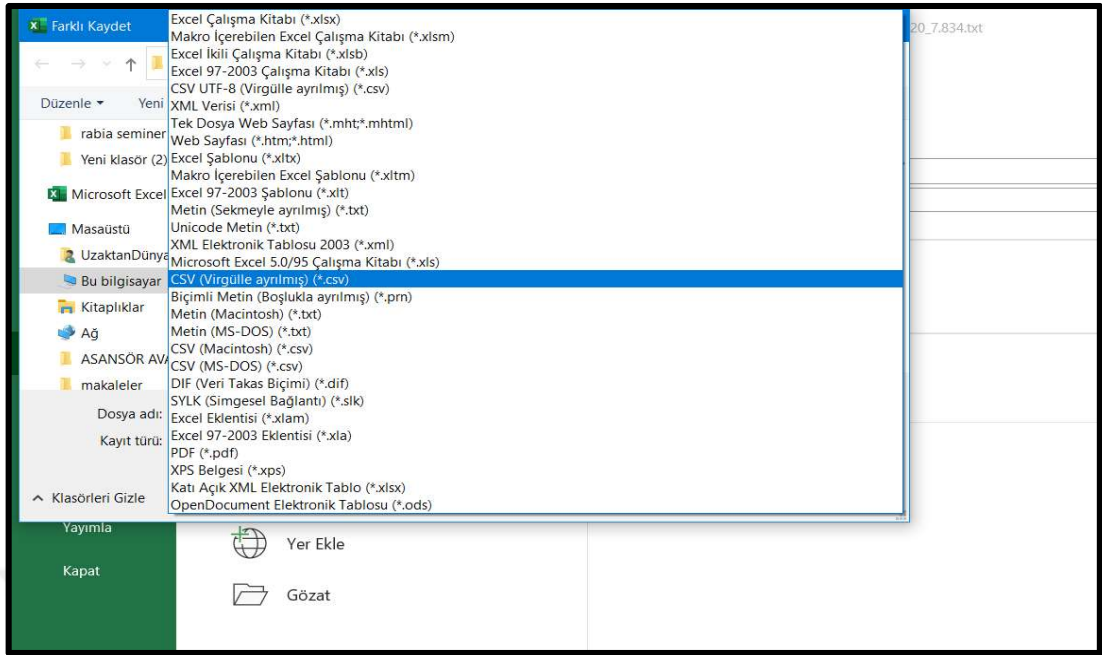


Şekil 50. Aktarma penceresi 3/3

	A	B	C	D	E
1	1	0.39172	0	0	
2	2	0.37255	0.12105	0.21315	
3	3	0.39172	0	0.1421	
4	4	0.37255	0.12105	0.35525	
5	5	0.39172	0	0.4263	
6	6	0.37255	0.12105	0.63945	
7	7	0.39172	0	0.5684	
8	8	0.37255	0.12105	0.78155	
9	9	0.39172	0	0.8526	
10	10	0.37255	0.12105	1.06575	
11	11	0.39172	0	0.9947	
12	12	0.37255	0.12105	1.20785	
13	13	0.39172	0	1.2789	
14	14	0.37255	0.12105	1.49205	
15	15	0.39172	0	1.421	
16	16	0.37255	0.12105	1.63415	
17	17	0.39172	0	1.7052	
18	18	0.37255	0.12105	1.91835	
19	19	0.39172	0	1.8473	
20	20	0.37255	0.12105	2.06045	
21	21	0.39172	0	2.1315	
22	22	0.37255	0.12105	2.34465	
23	23	0.39172	0	2.2736	
24	24	0.37255	0.12105	2.48675	
25	25	0.39172	0	2.5578	
26	26	0.37255	0.12105	2.77095	
27	27	0.39172	0	2.6999	
28	28	0.37255	0.12105	2.91305	
	CNT_10_0_120_7.834				

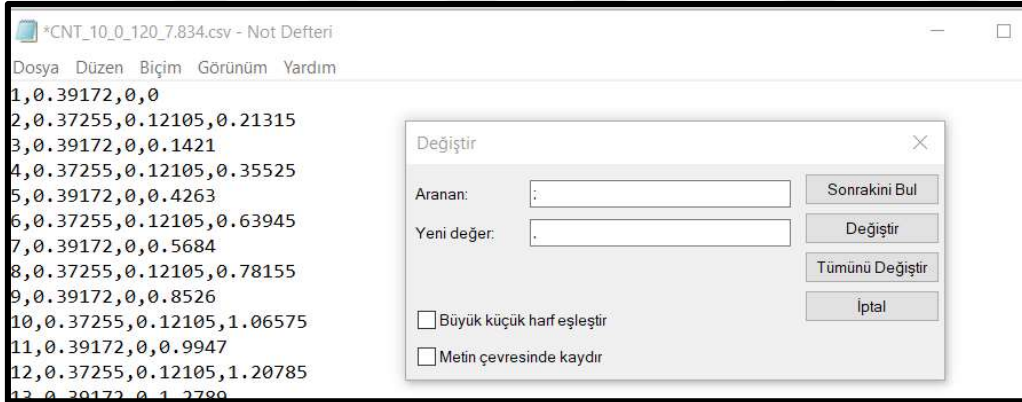
Şekil 51. Birimleri nanometre' ye çevrilmiş düğüm koordinatları ve düğüm numaraları

ADIM 3: Birim dönüşümü yapılan değerler .csv uzantısıyla kaydedildi.



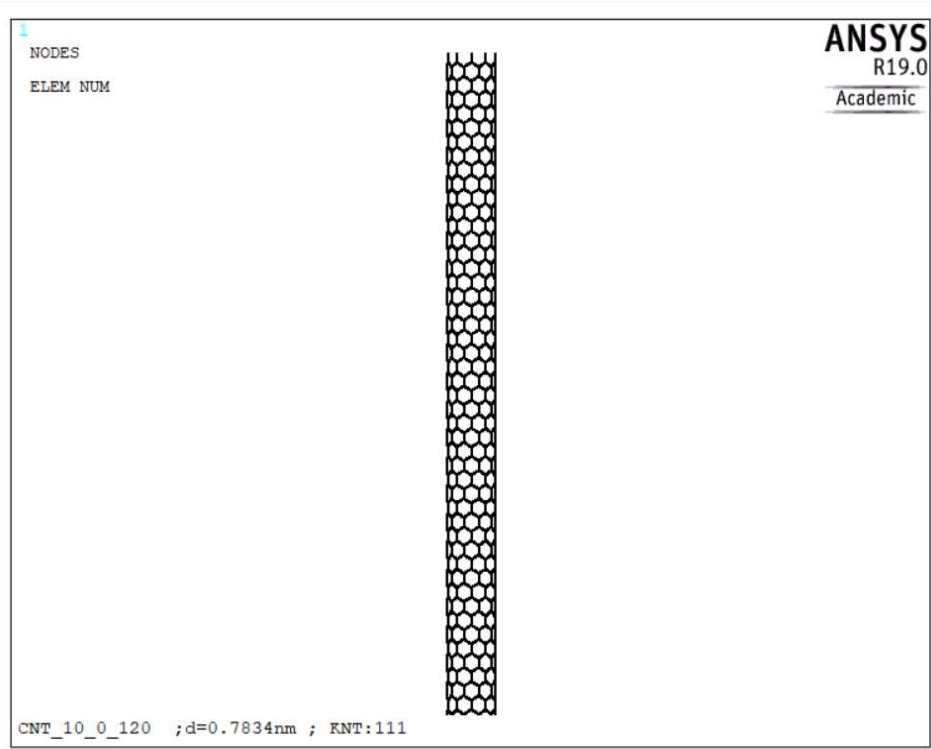
Şekil 52. Düğüm koordinatlarının .csv uzantısıyla kaydedilmesi

ADIM 4: Kaydedilen .csv uzantılı belge not defterinde açıldıktan sonra noktalı virgül (;) virgüle(,) çevrilip tekrar kaydedildi.

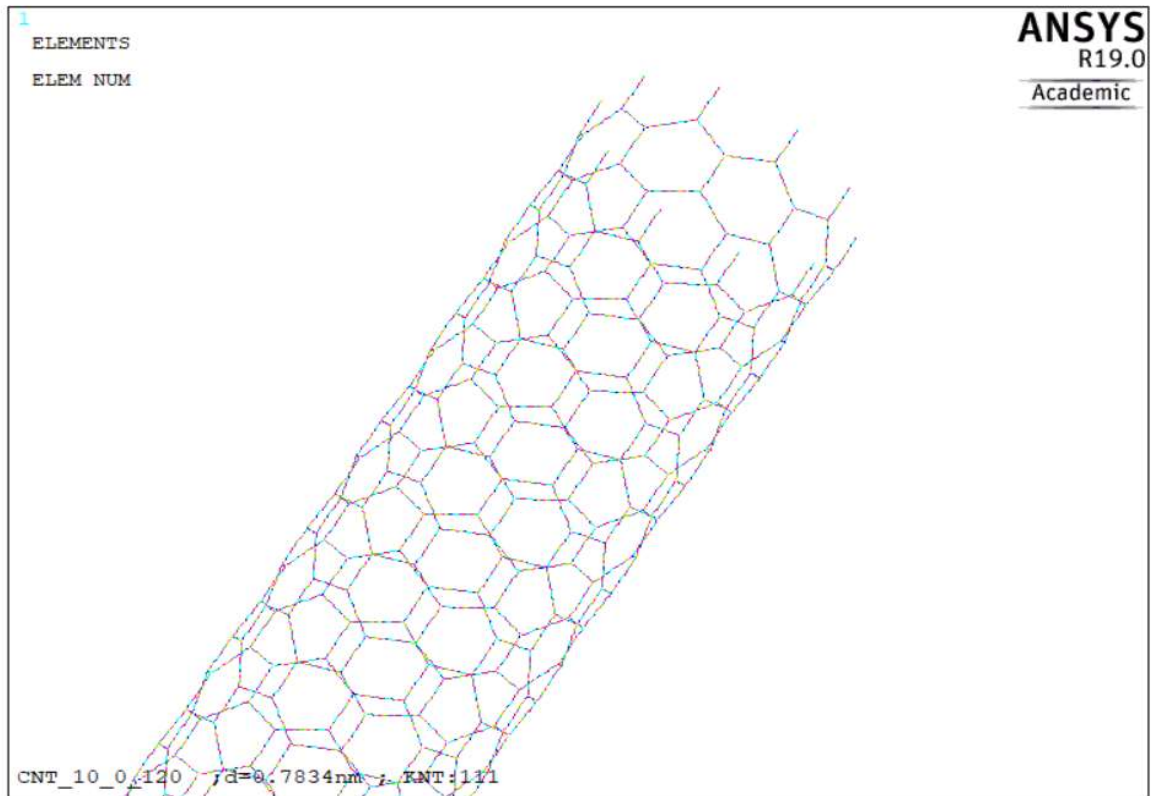


Şekil 53. Noktalı virgülün virgüle dönüştürülmesi

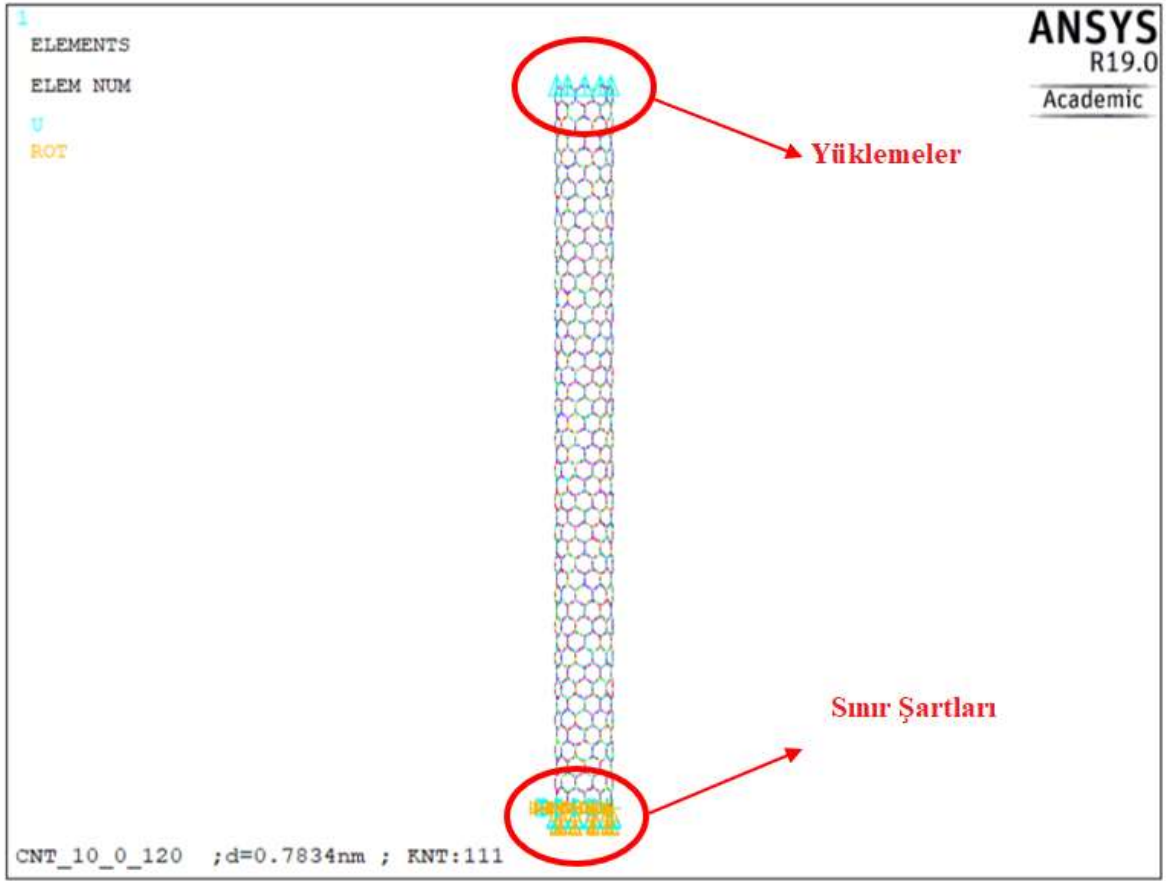
ADIM 5: Daha sonra ANSYS APDL programına bir input kodu girilerek düğüm noktaları yardımıyla elemanlar oluşturuldu. ANSYS APDL programına aktarılan nanotüpler yükleme öncesinde Şekil 55-56'daki gibi, sınır şartları uygulandığında Şekil 57'deki gibi görünmektedir. Sınır şartları uygulandıktan sonra çözümleme yaptırılmış ve tüplerin Z yönünde yer değiştirmesi Şekil 58-90'da verilmiştir.



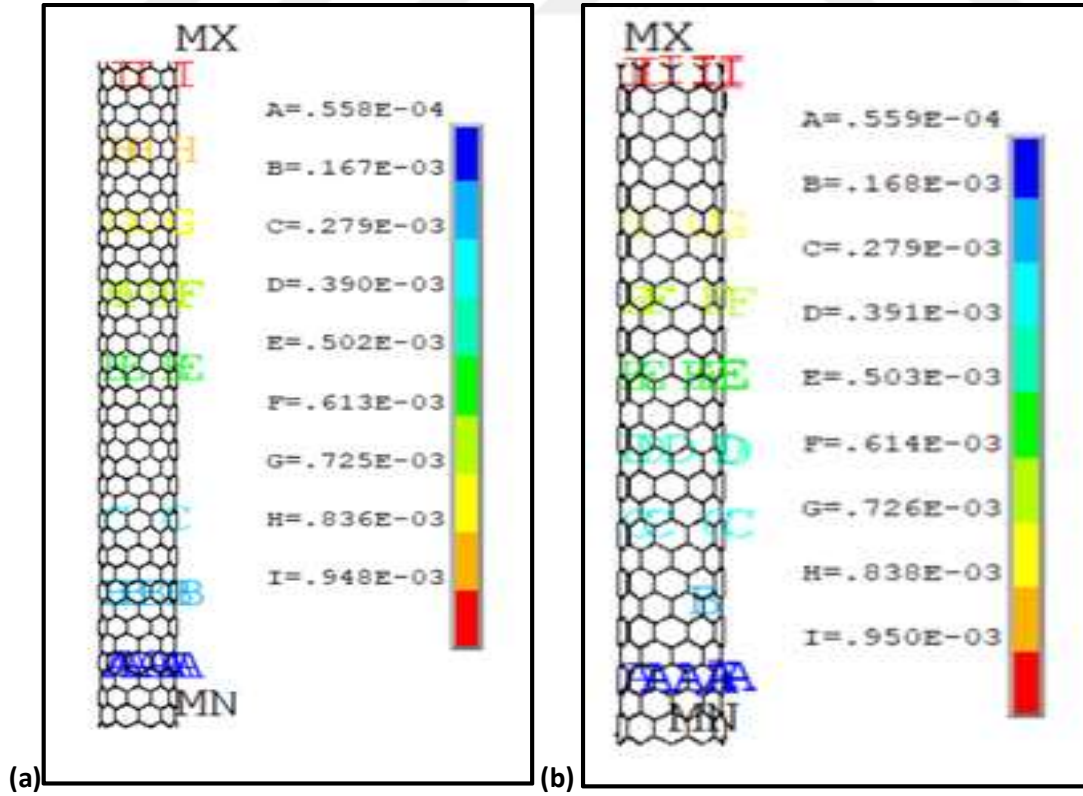
Şekil 54. ANSYS APDL 111 isimli nanotüpün yükleme öncesi Görünümü-1



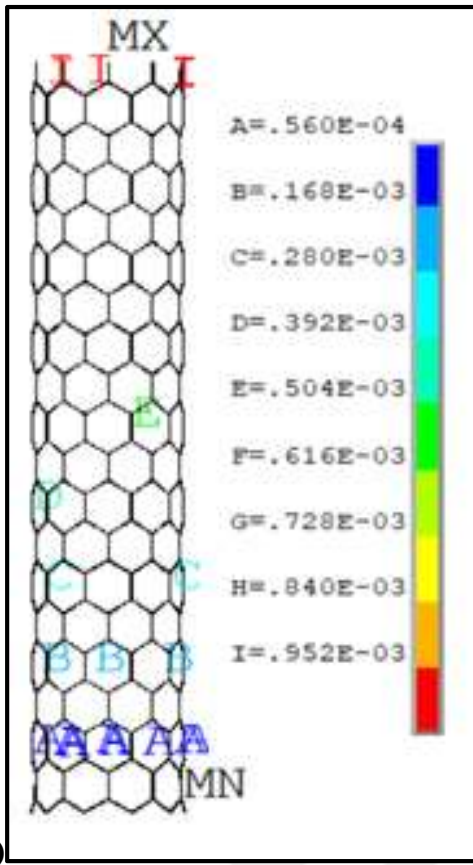
Şekil 55. ANSYS APDL 111 isimli nanotüpün yükleme öncesi görünümü-2



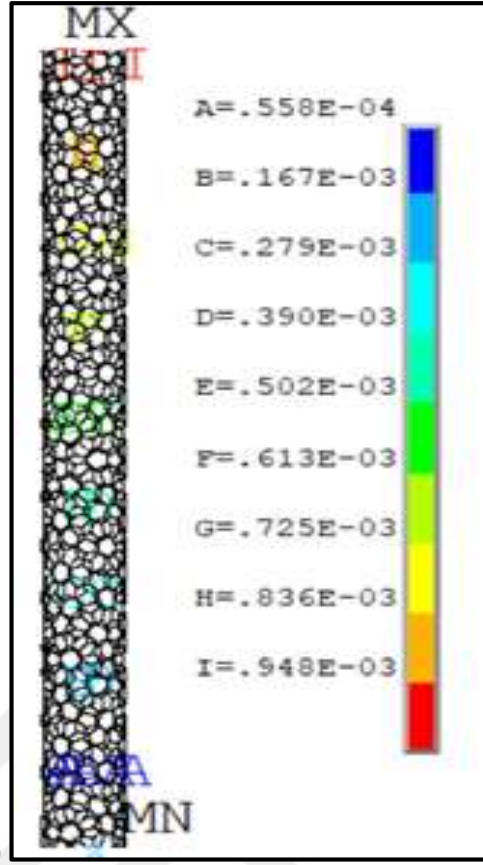
Şekil 56. 111 Nanotüpünün sınır şartları ve yüklemeler



Şekil 57. (a) 112 Nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) 113 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi

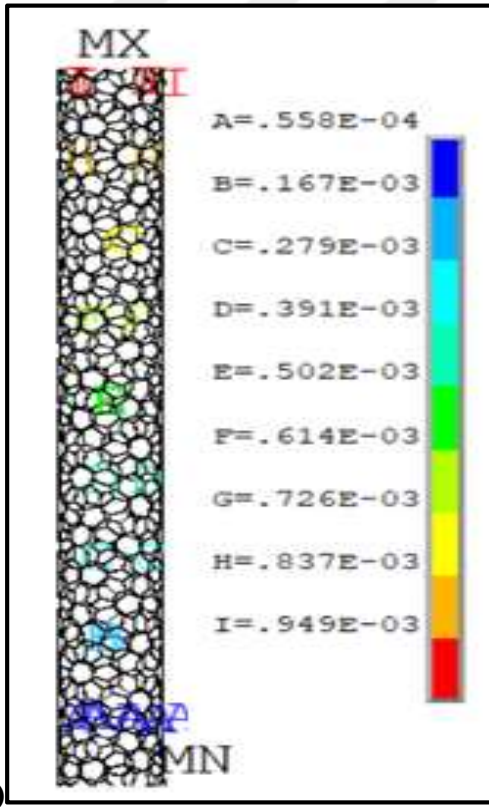


(a)

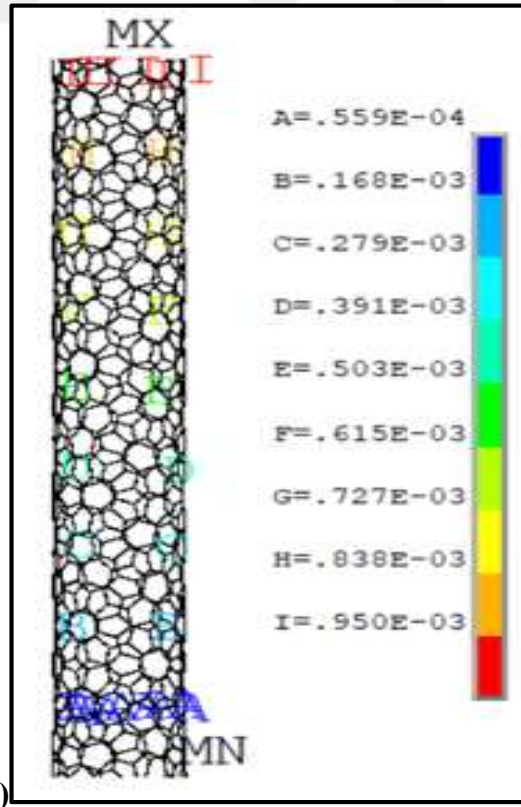


(b)

Şekil 58. (a) 114 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 121 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi

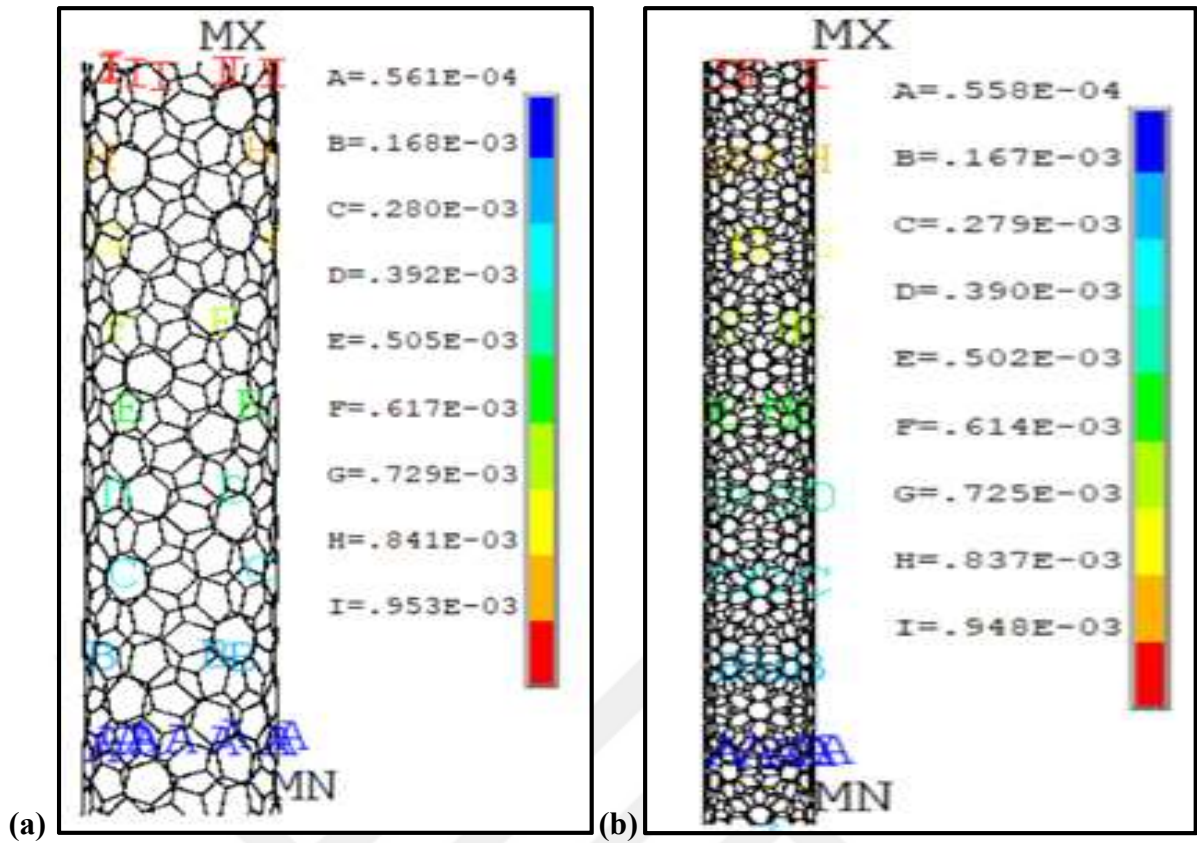


(a)

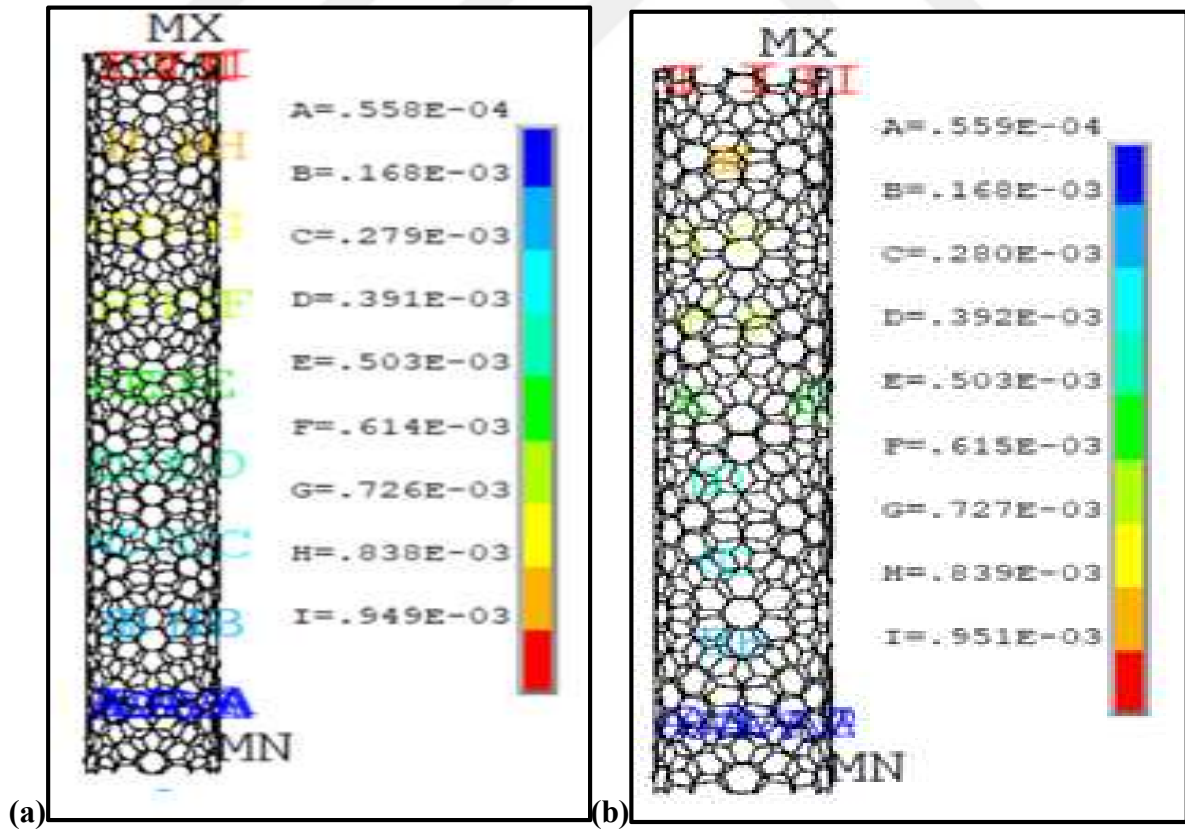


(b)

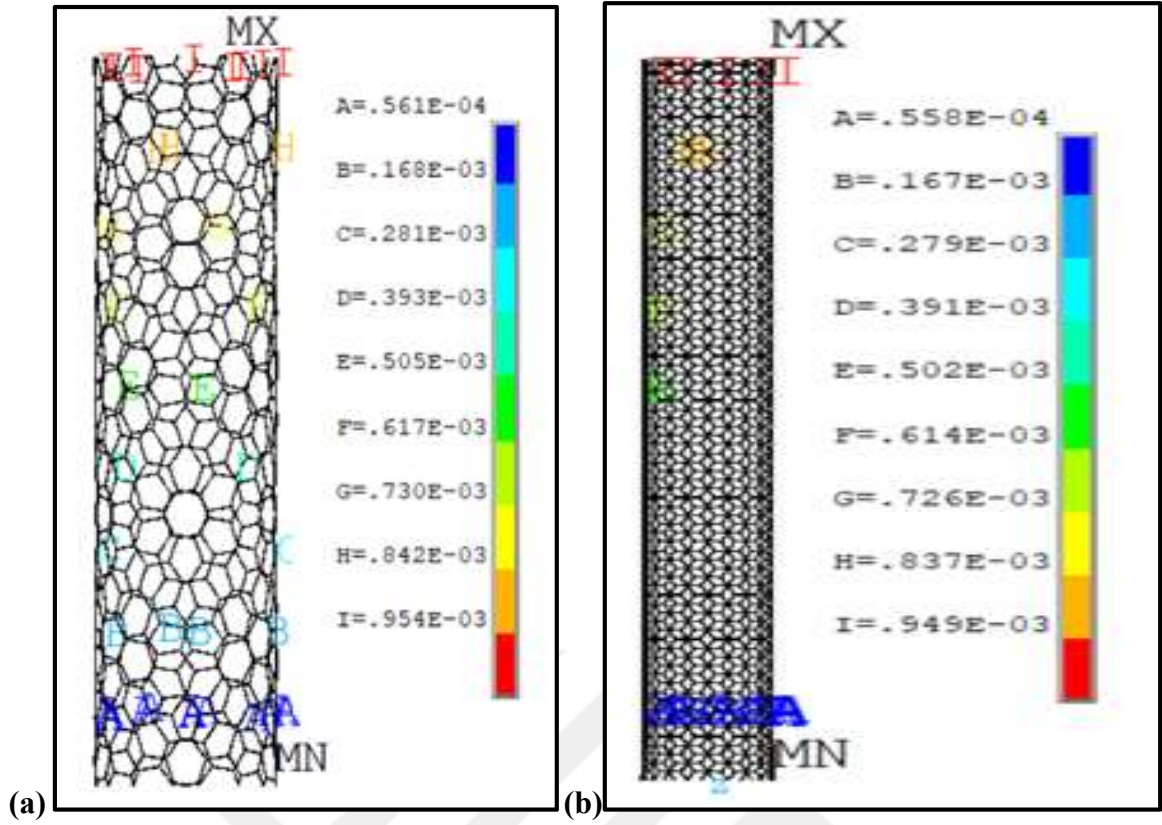
Şekil 59. (a) 122 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 123 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



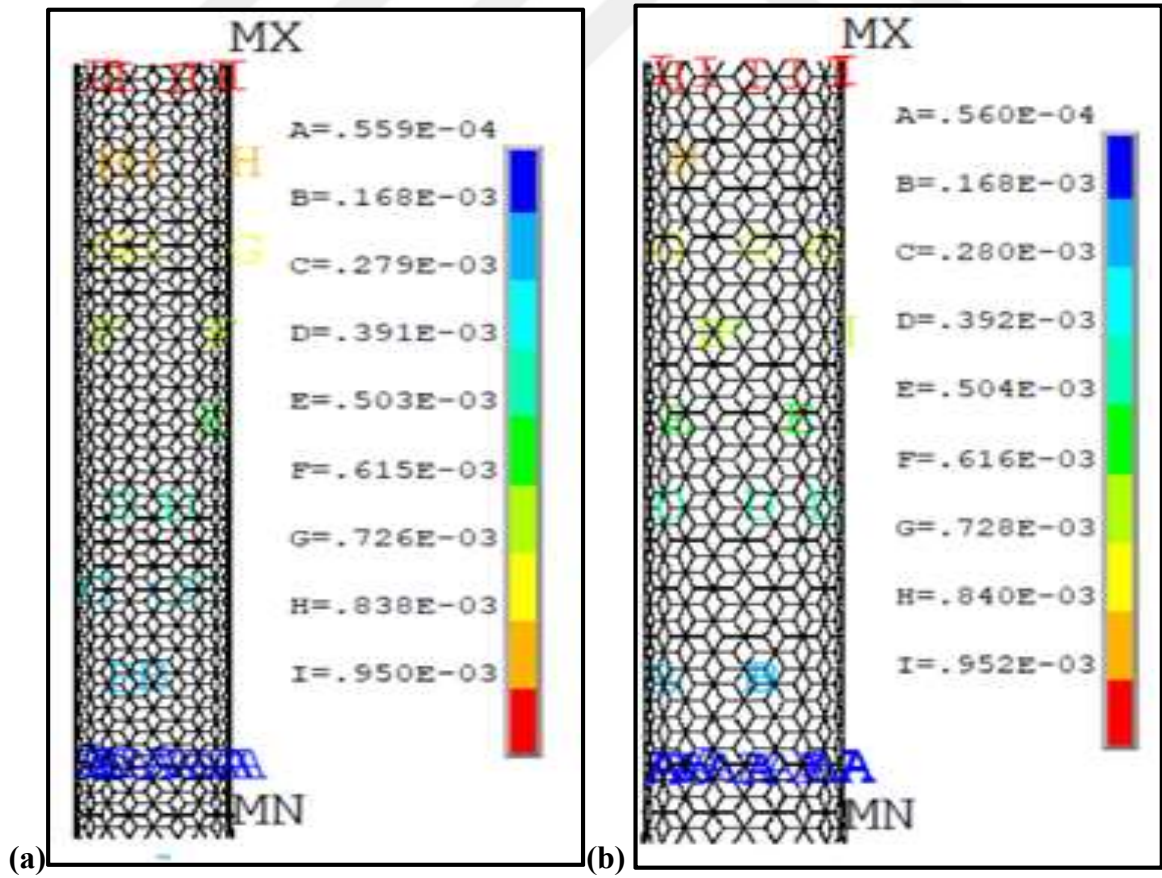
Şekil 60. (a) 124 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 131 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



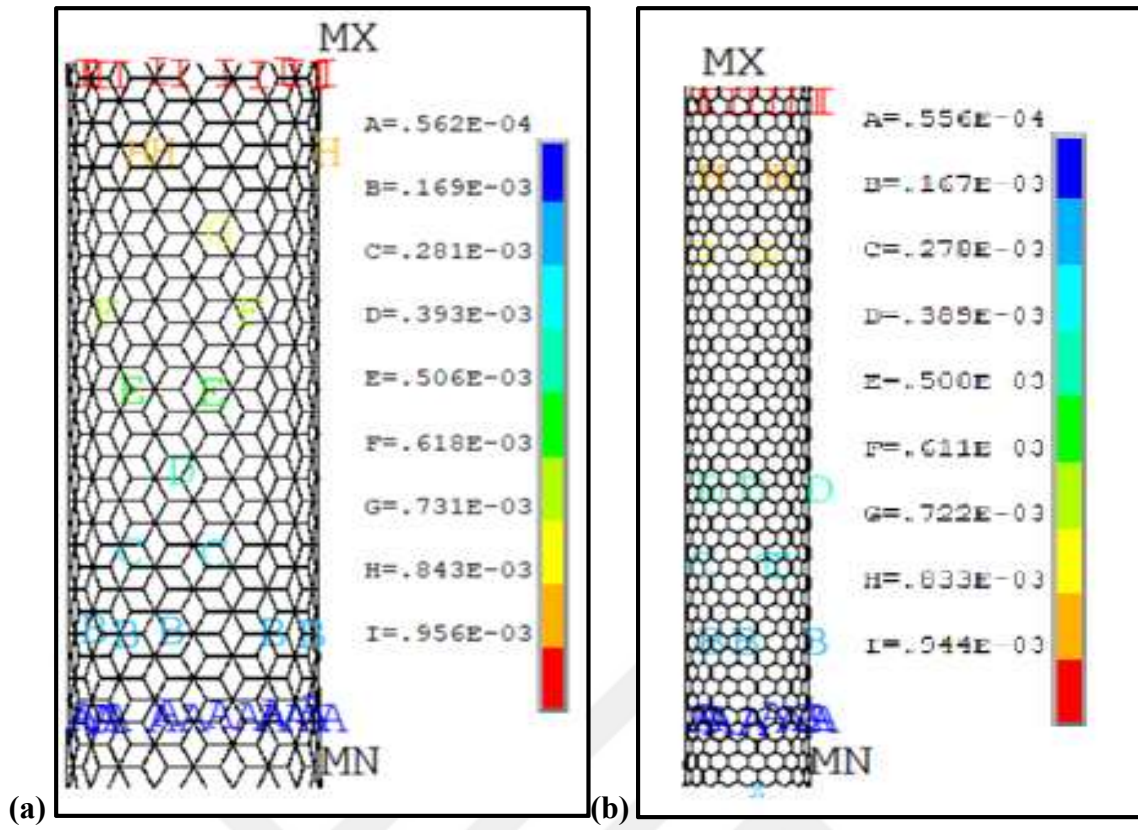
Şekil 61. (a) 132 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 133 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



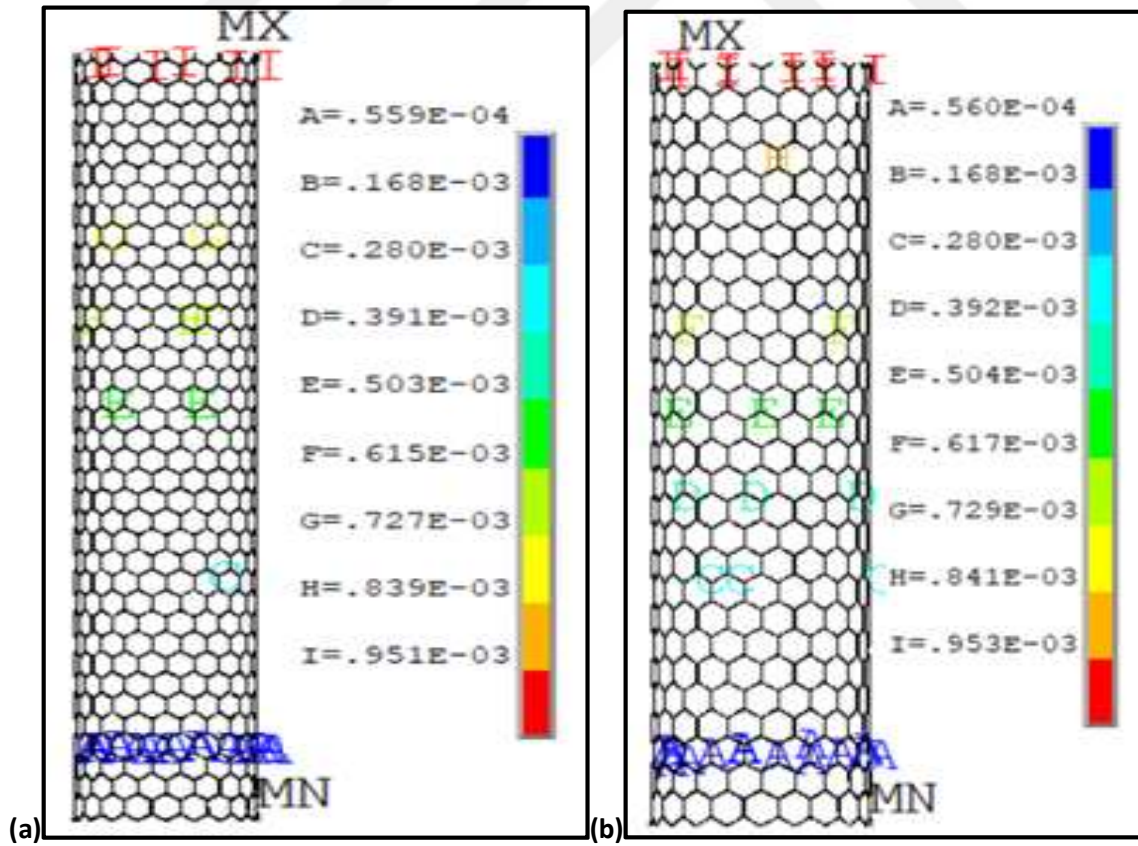
Şekil 62. (a) 134 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 141 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



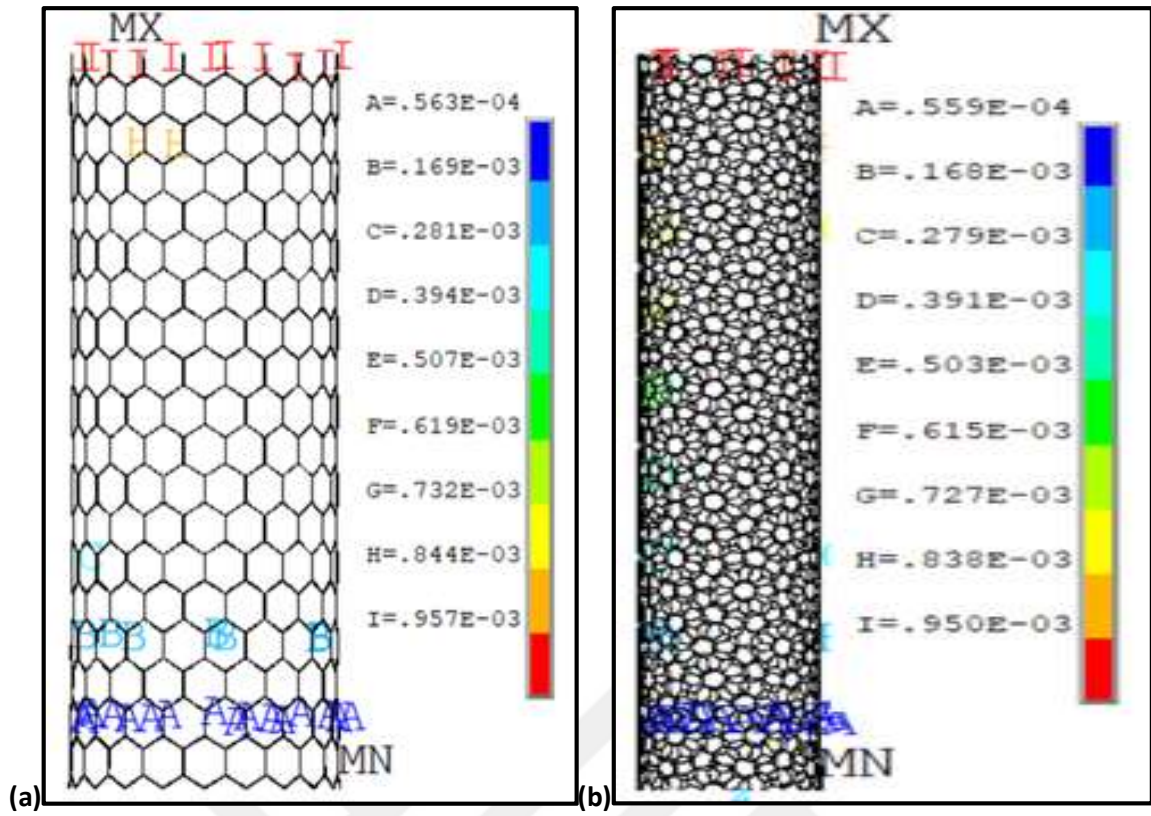
Şekil 63. (a) 142 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 143 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



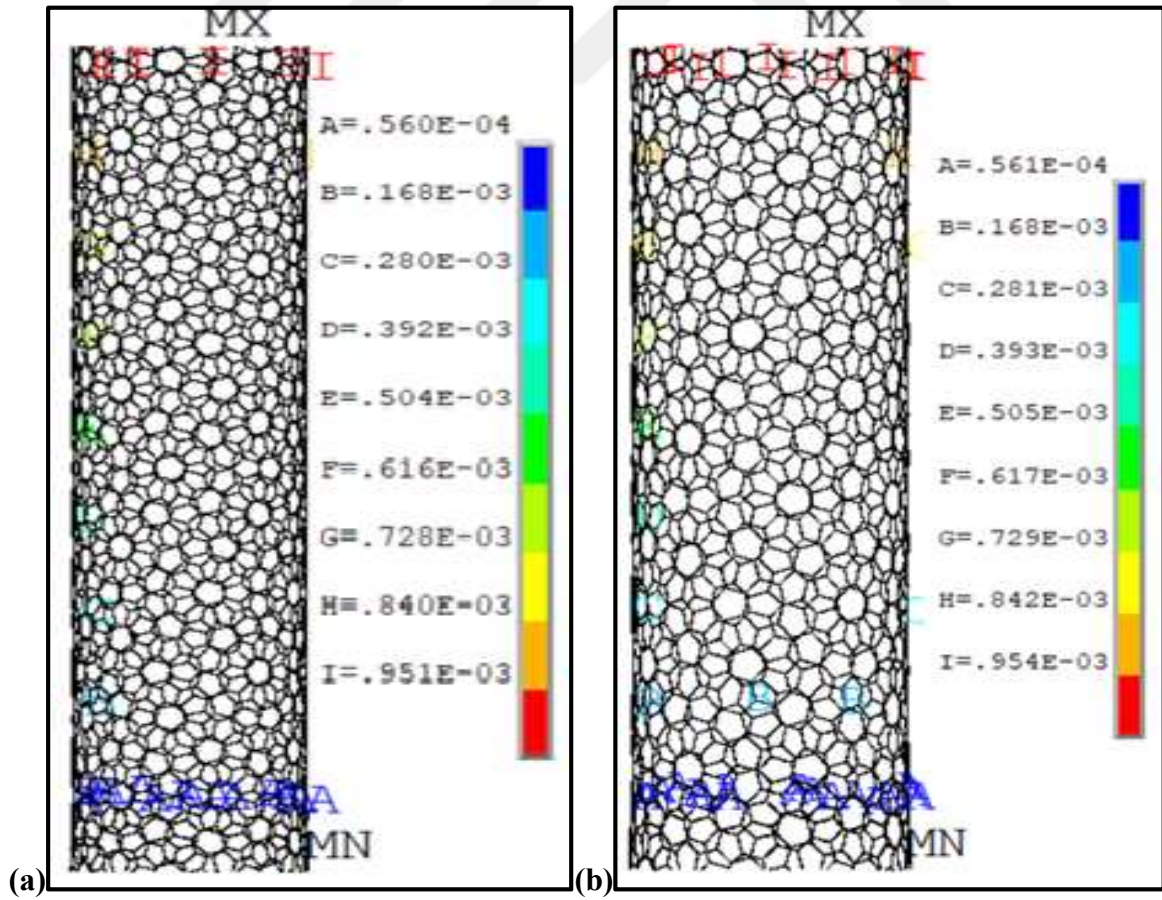
Şekil 64. (a) 144 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 211 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



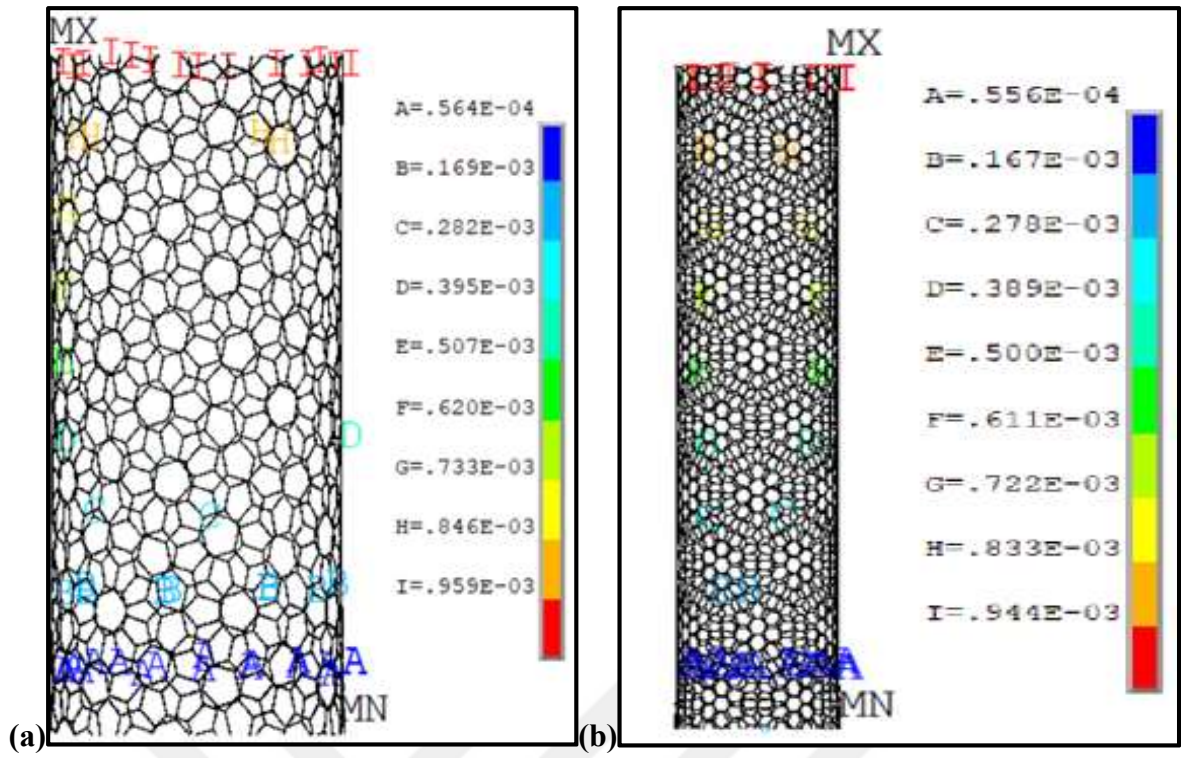
Şekil 65. (a) 212 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 213 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



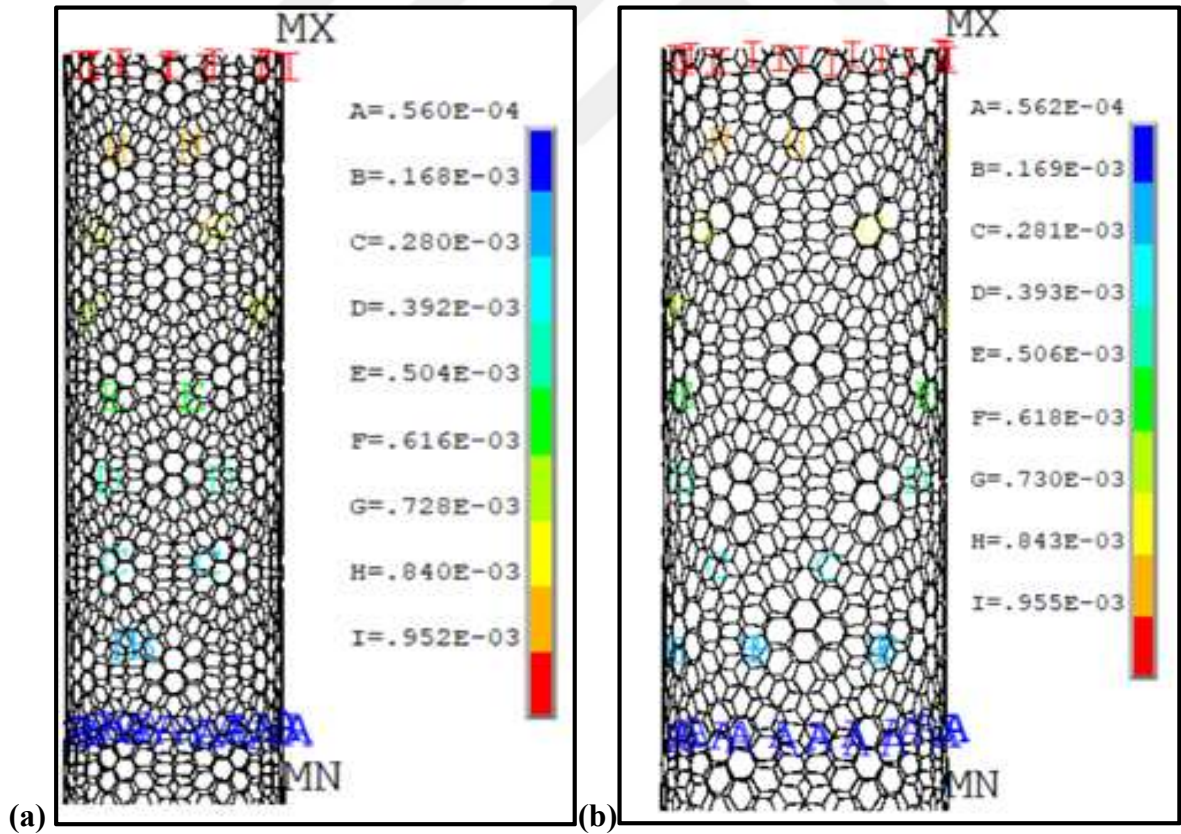
Şekil 66. (a) 214 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 221 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



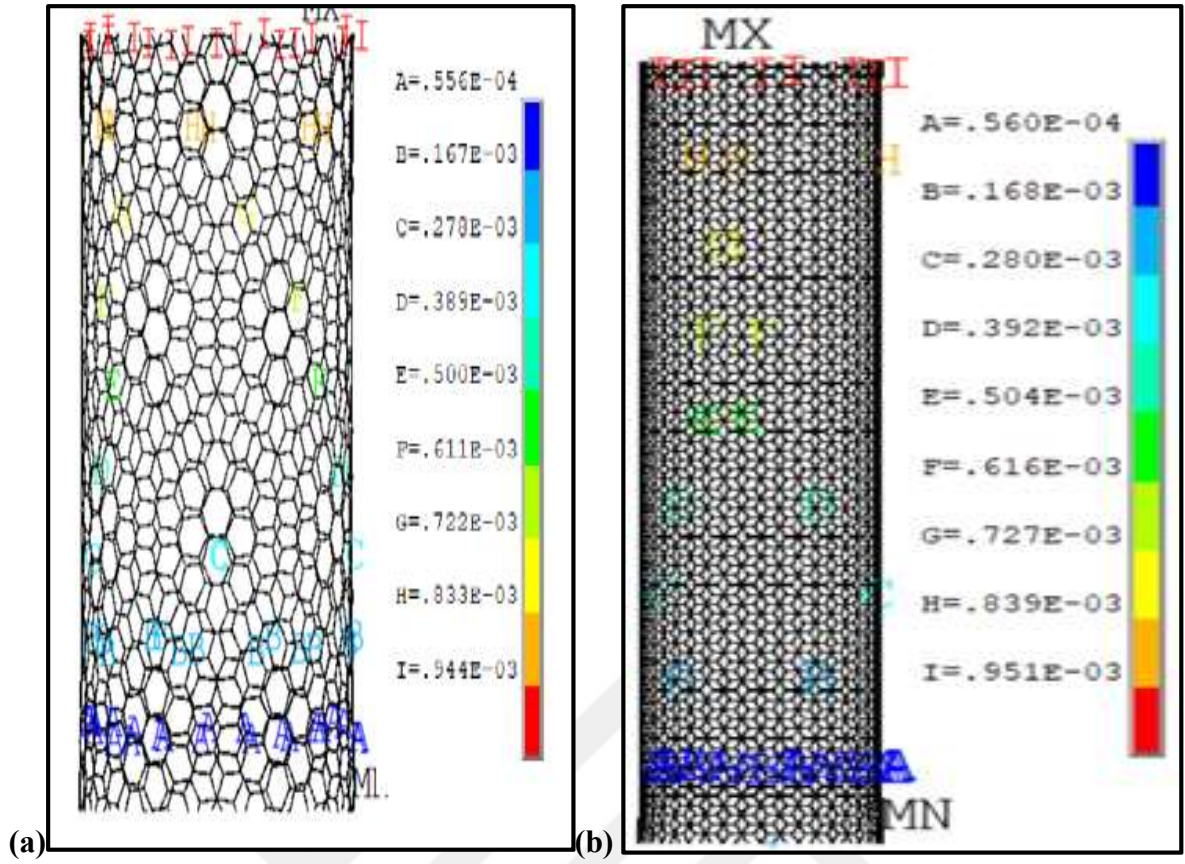
Şekil 67. (a) 222 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 223 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



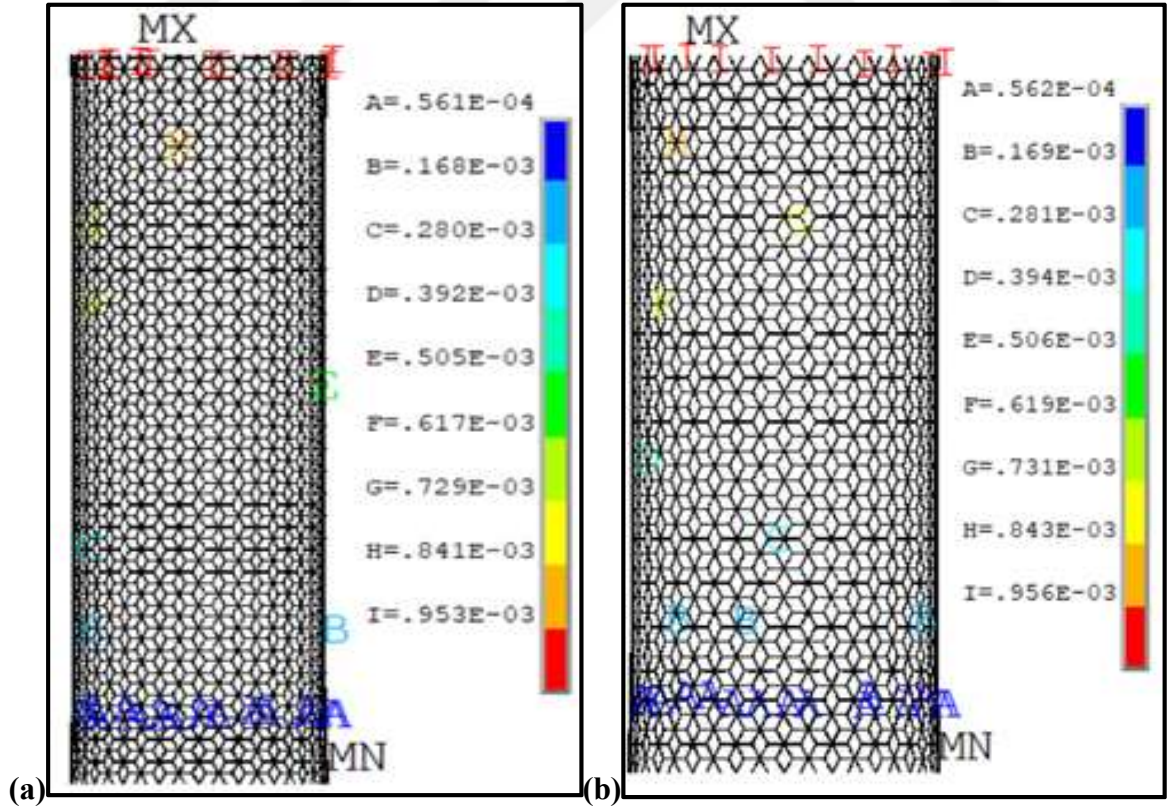
Şekil 68.(a) 224 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 231 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



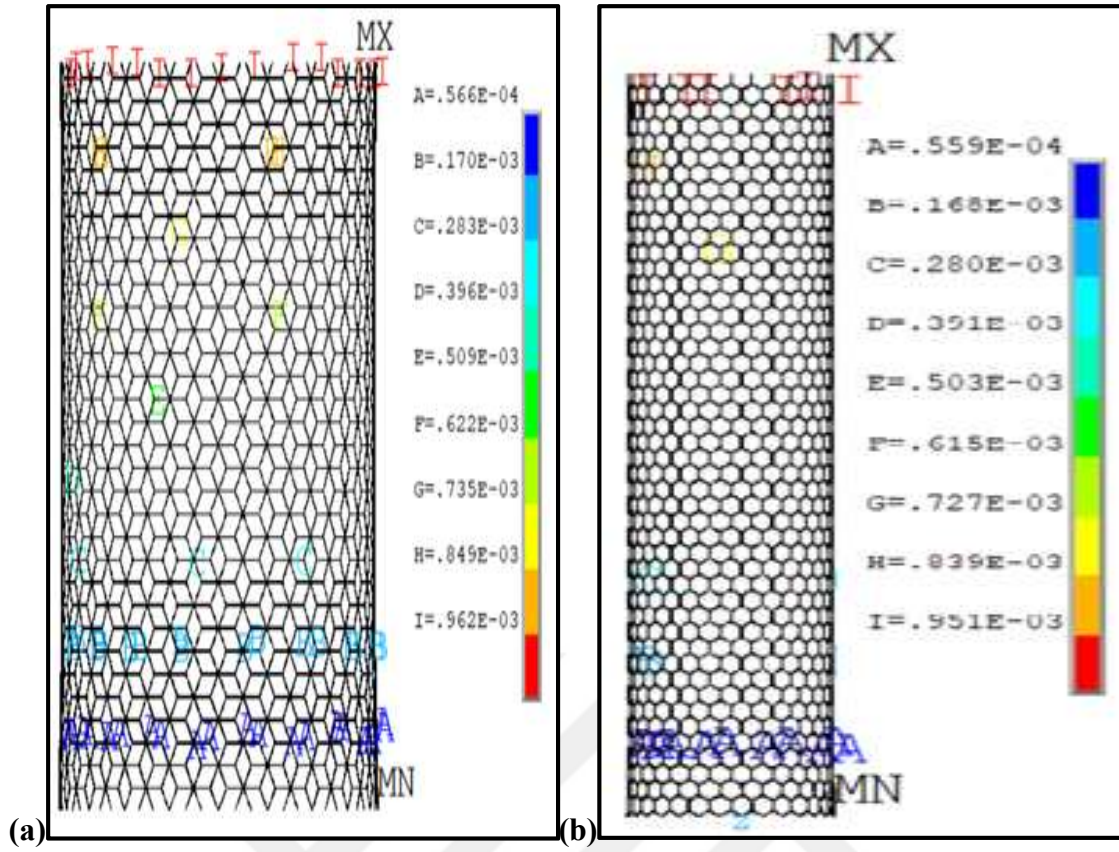
Şekil 69. (a) 232 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 233 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



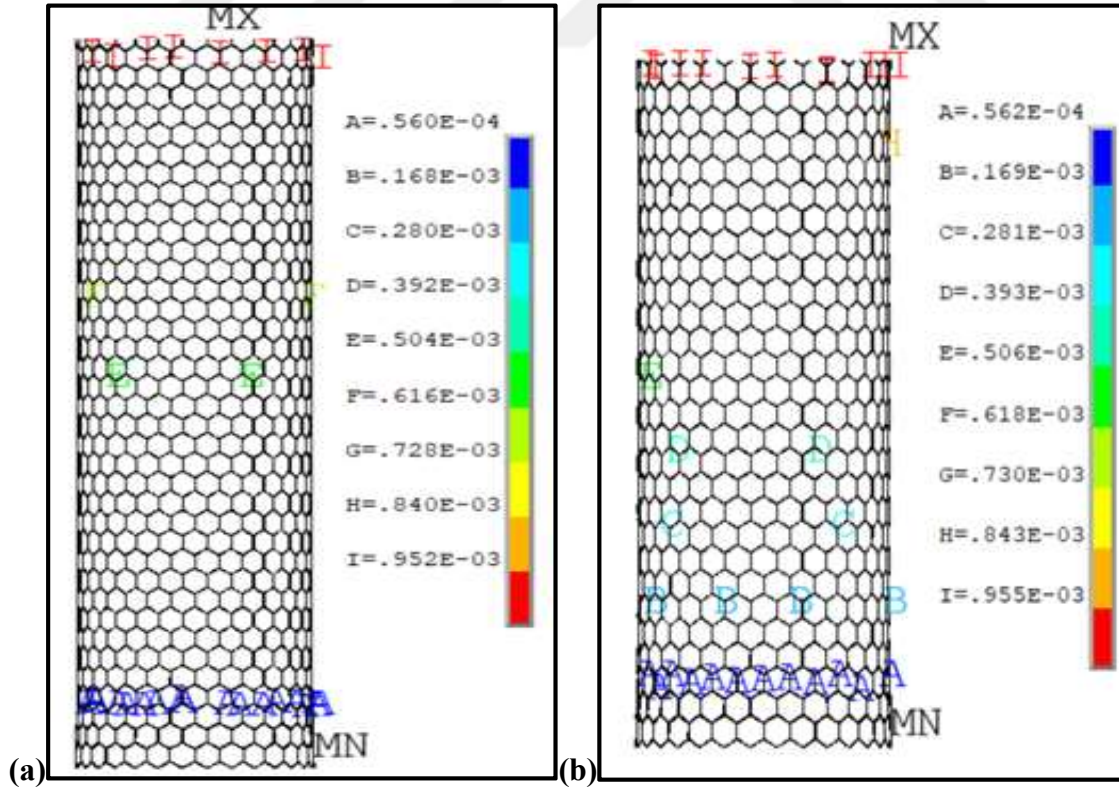
Şekil 70. (a) 234 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 241 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



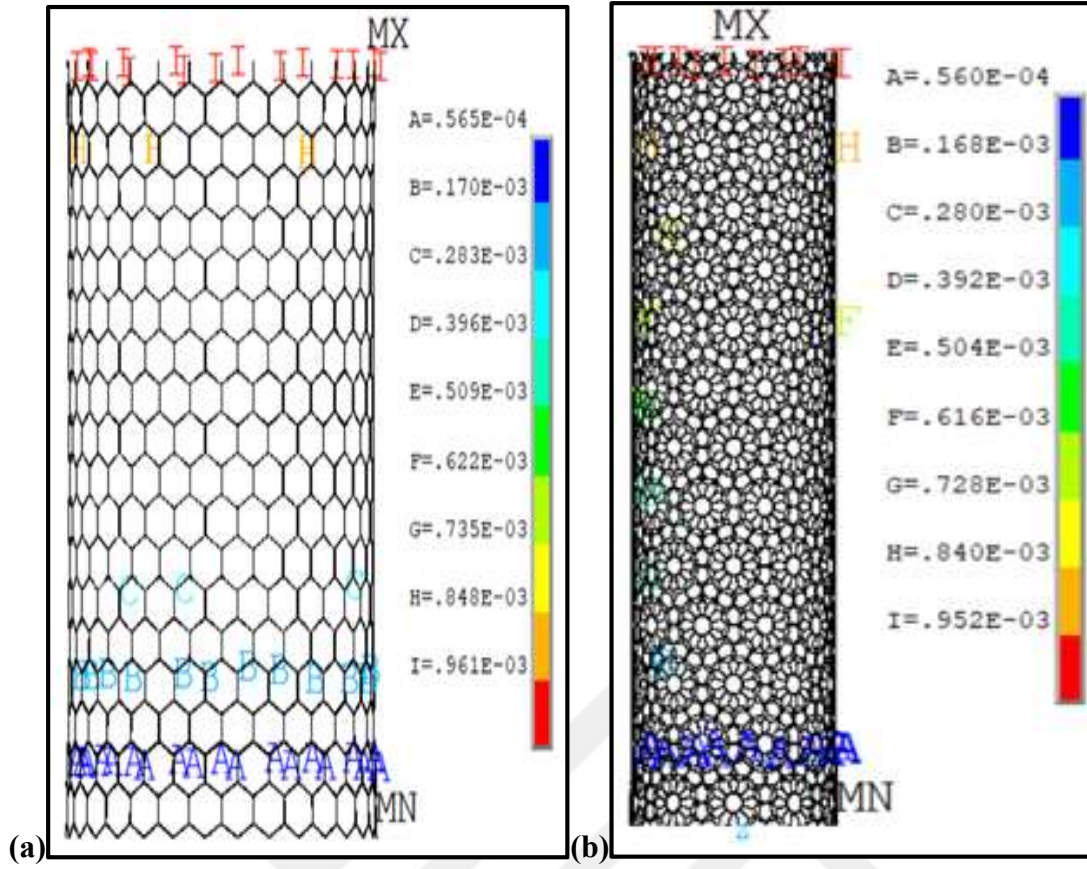
Şekil 71.(a) 242 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 243 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



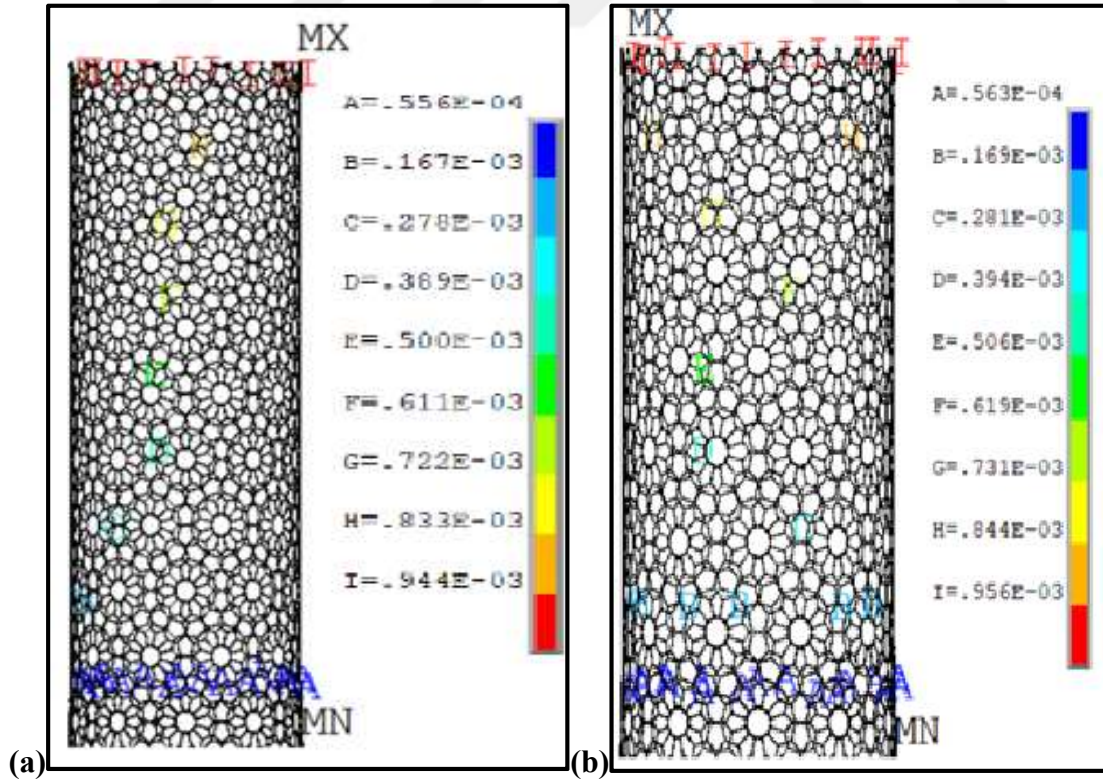
Şekil 72. (a) 244 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 311 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



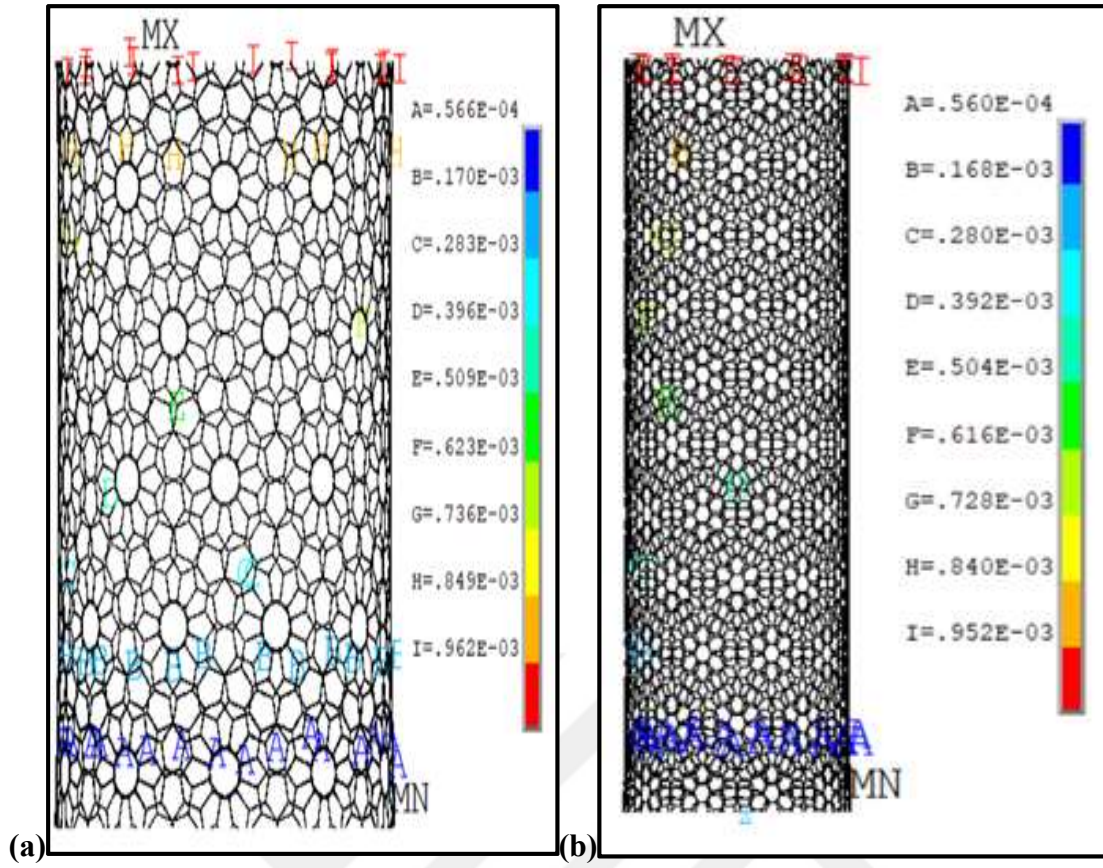
Şekil 73. (a) 312 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 313 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



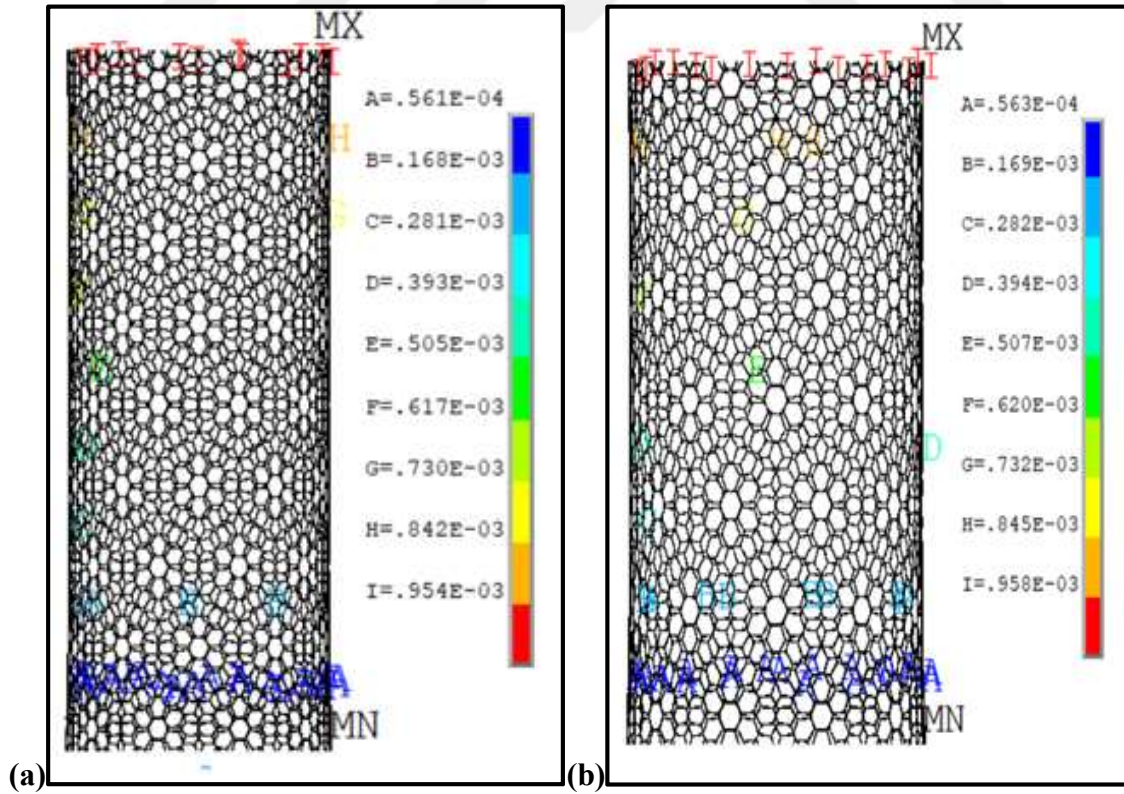
Şekil 74.(a) 314 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 321 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



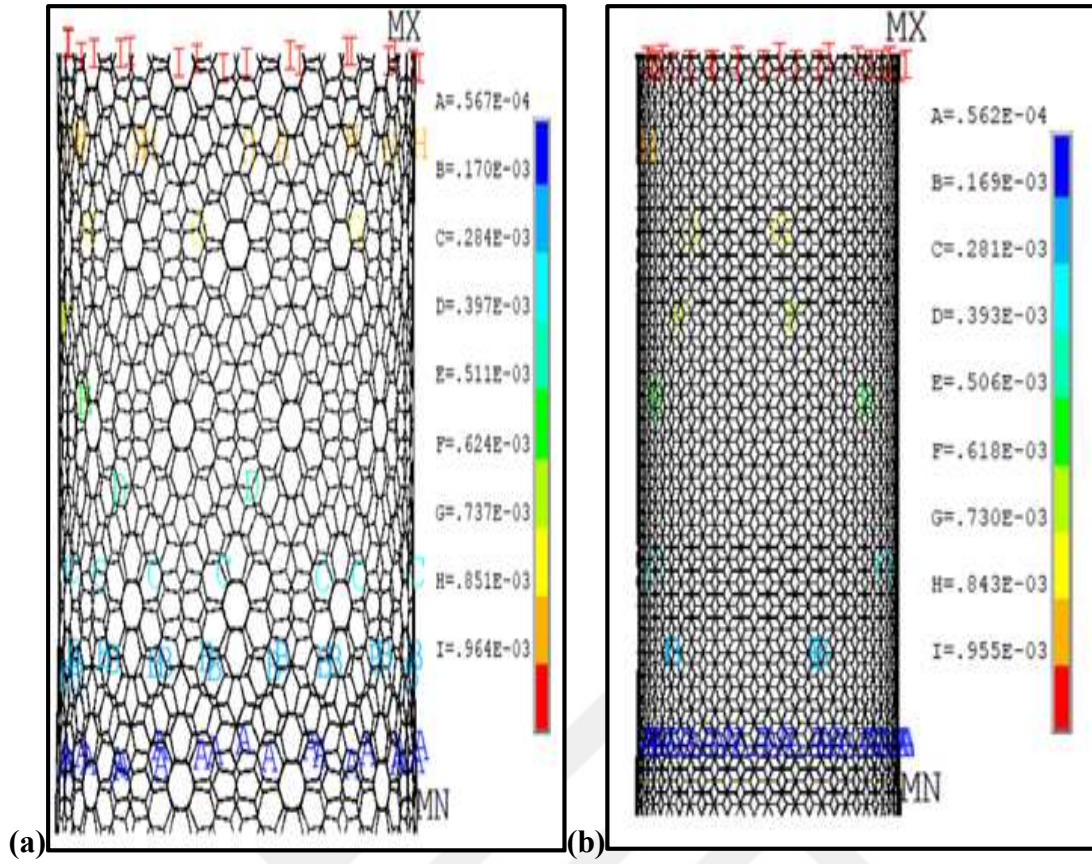
Şekil 75. (a) 322 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 323 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



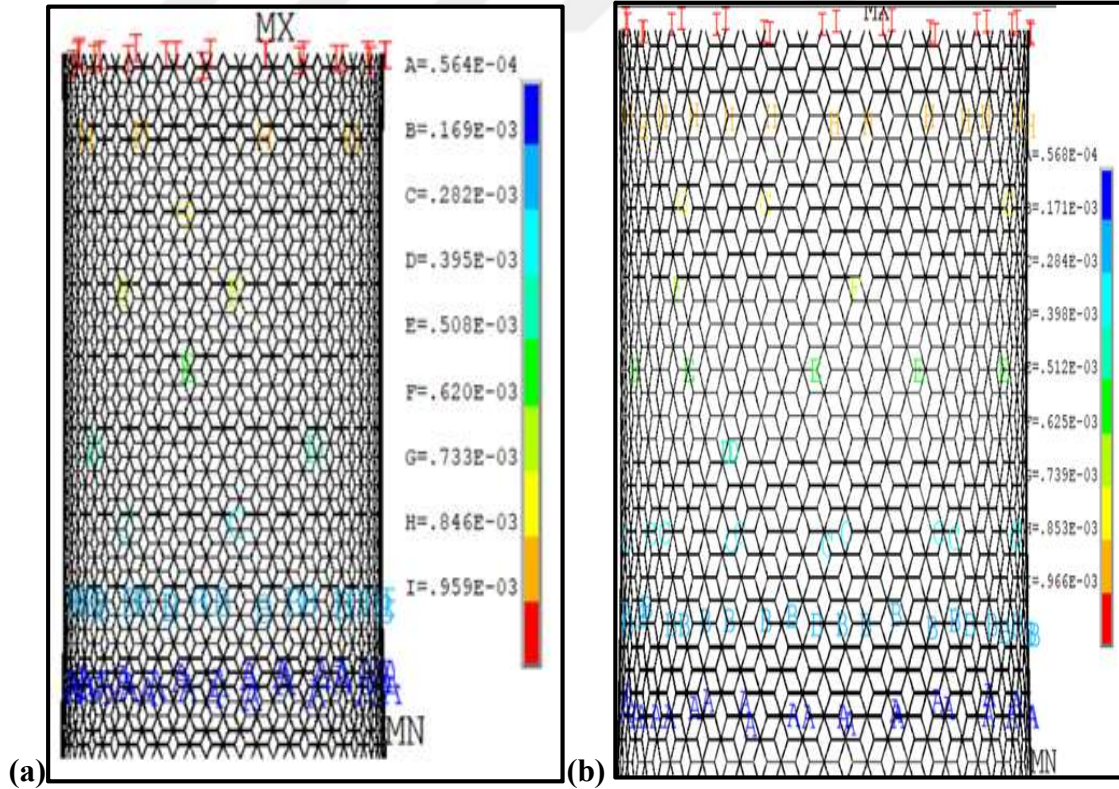
Şekil 76. (a) 324 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 331 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



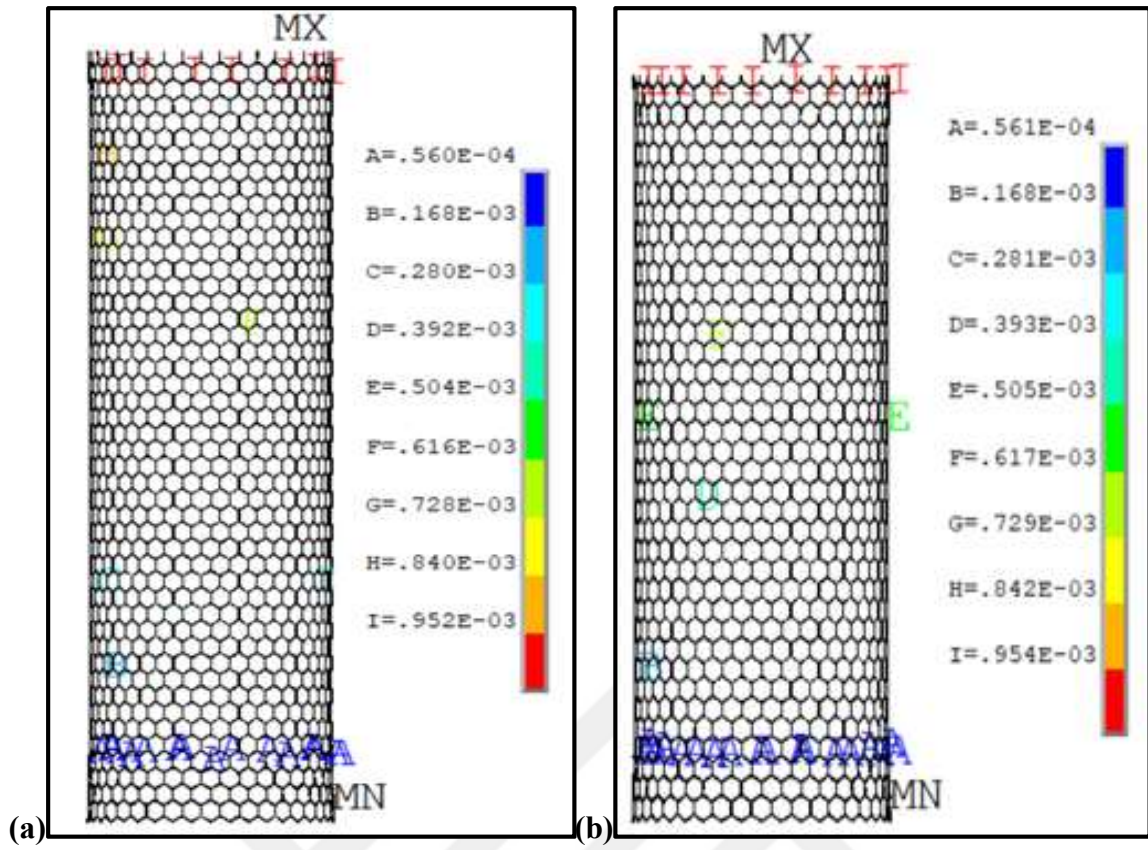
Şekil 77. (a) 332 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 333 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



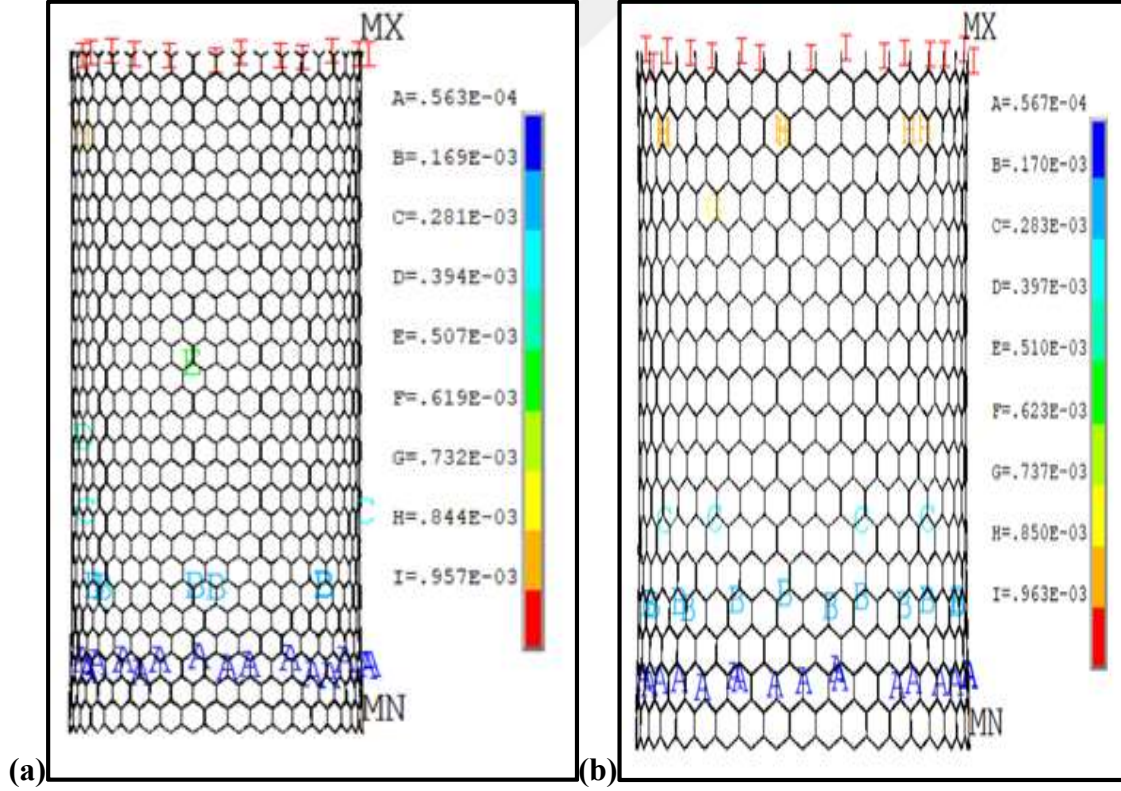
Şekil 78. (a) 334 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 342 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



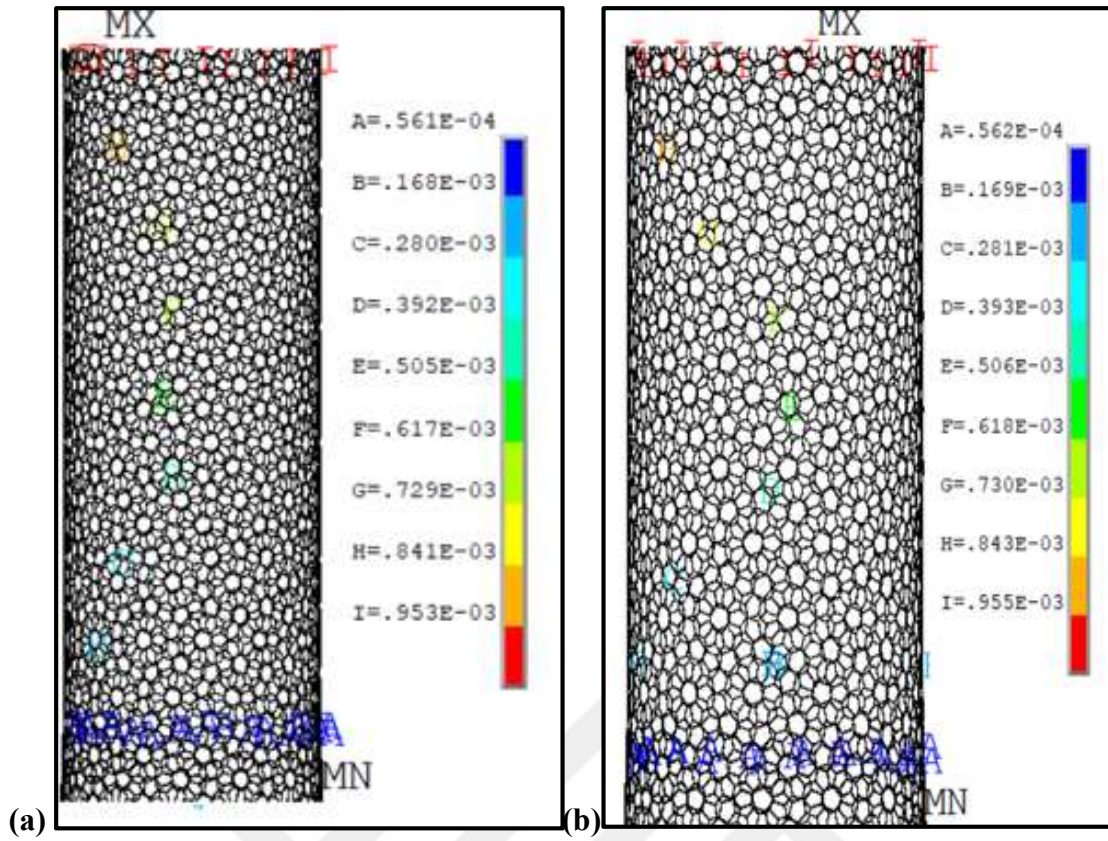
Şekil 79. (a) 343 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 344 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



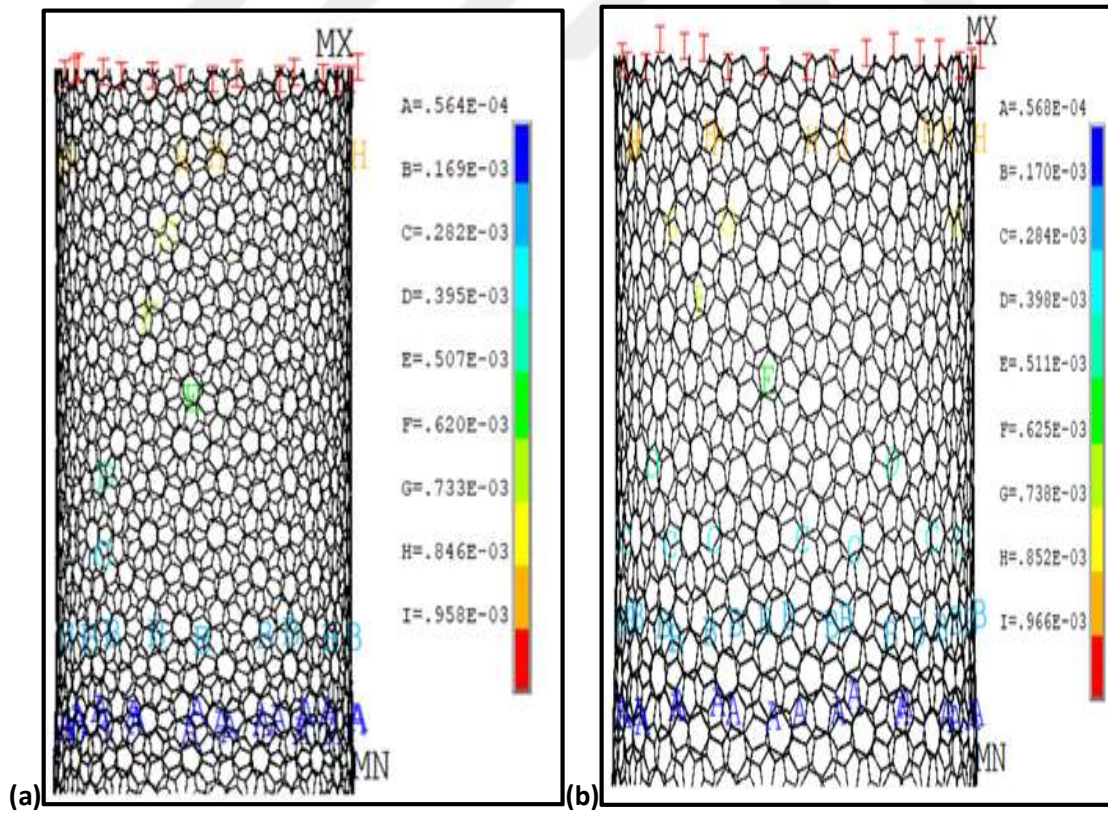
Şekil 80. (a) 411 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 412 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



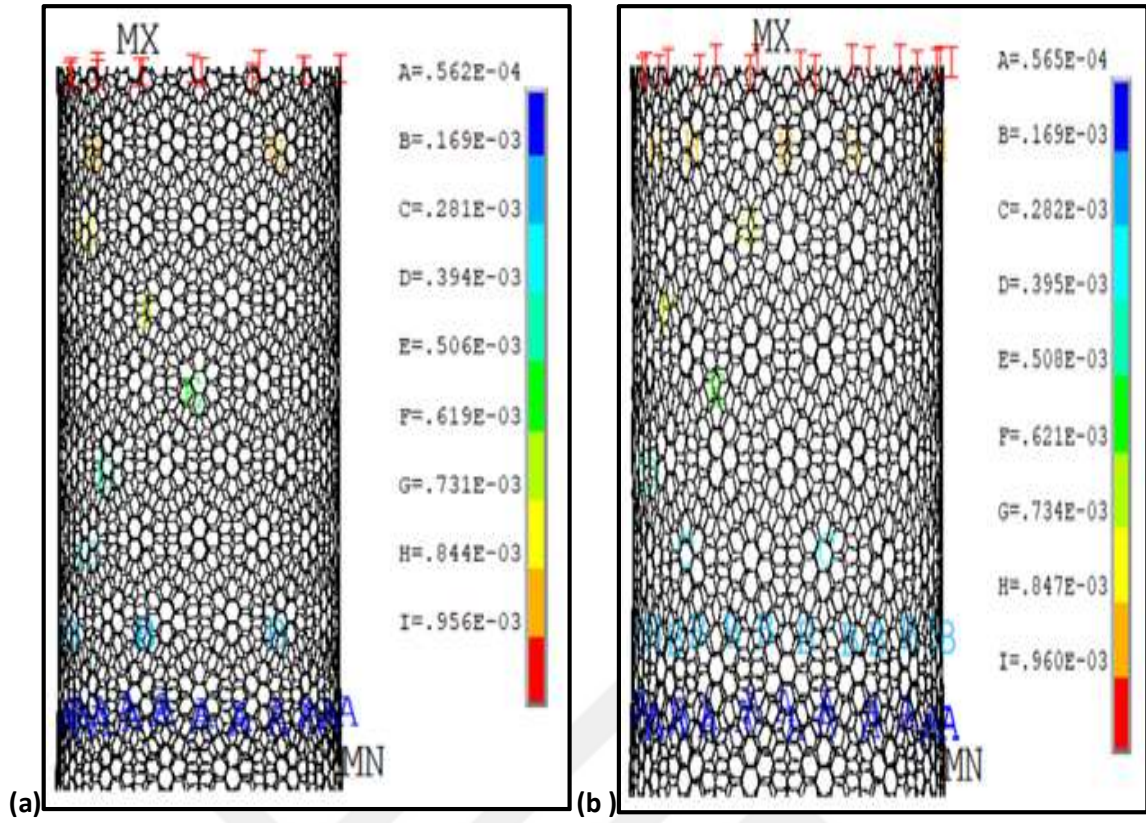
Şekil 81. (a) 413 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 414 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



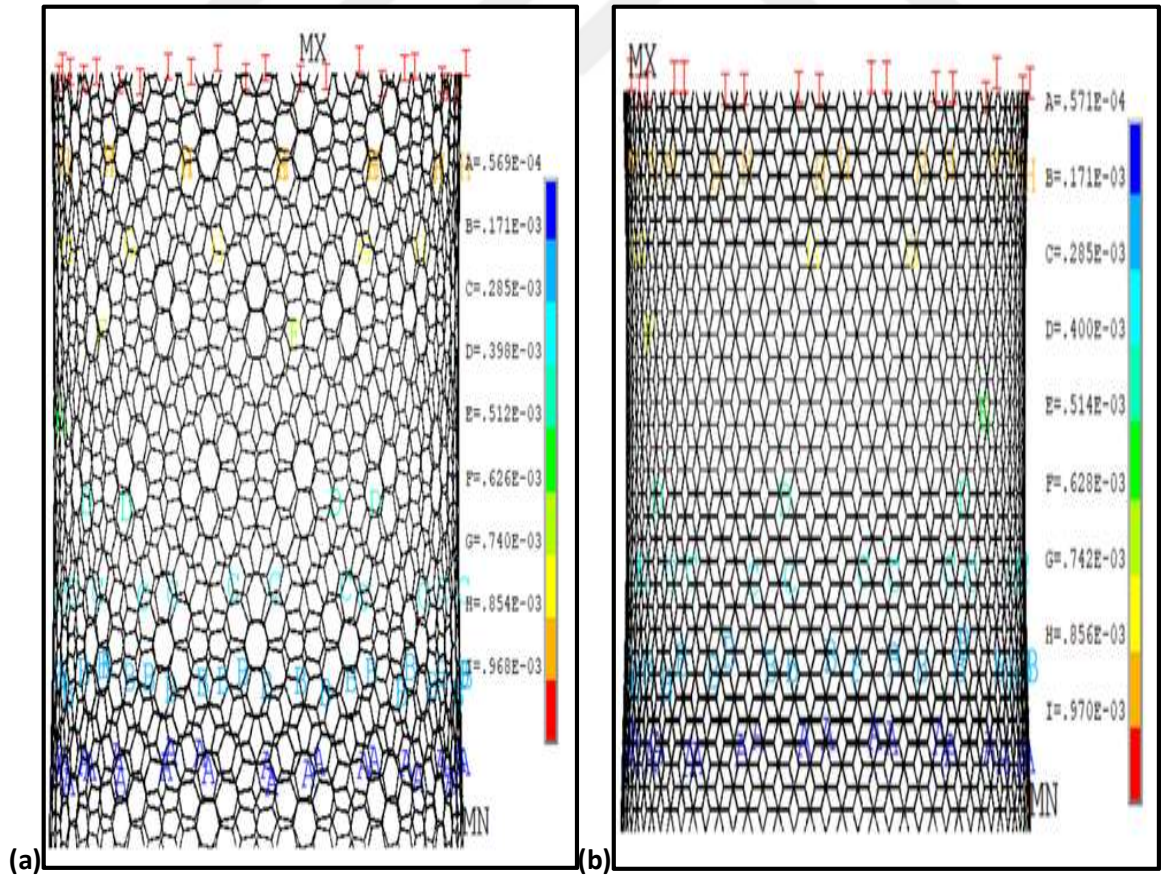
Şekil 82. (a) 421 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 422 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



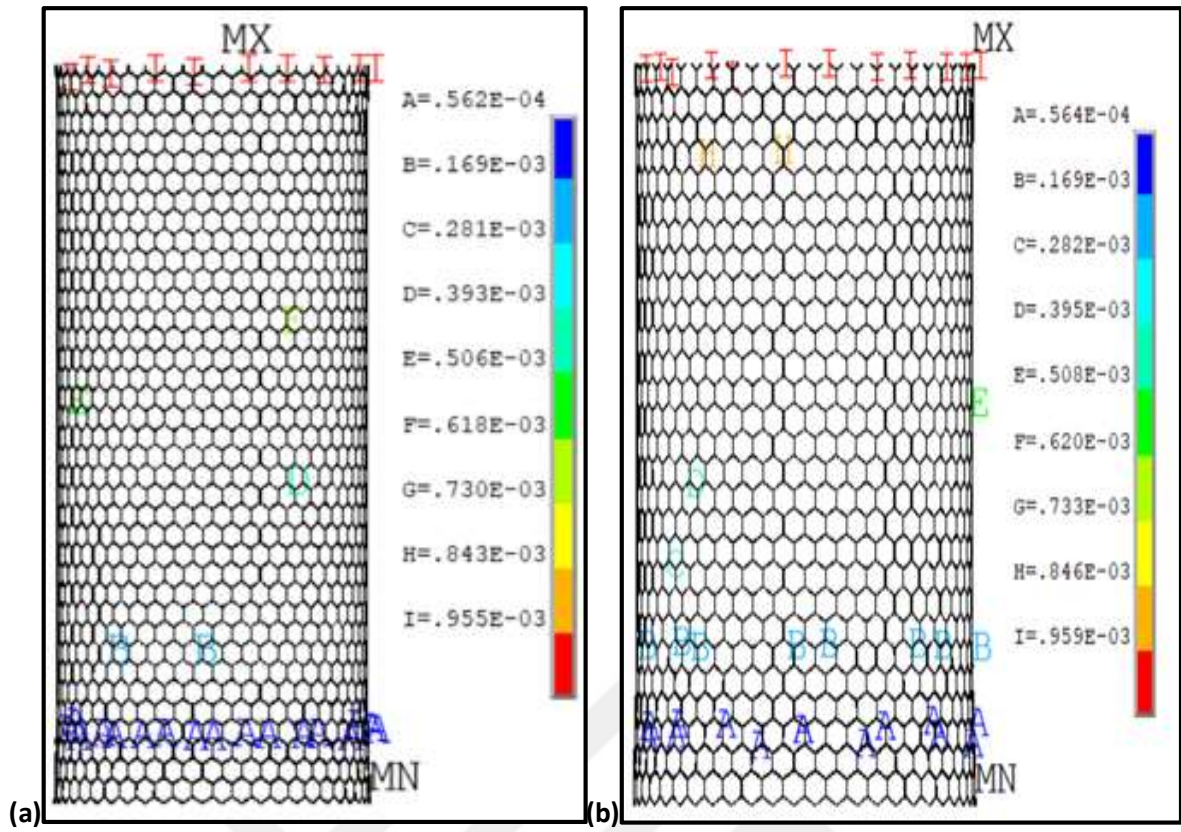
Şekil 83. (a) 423 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi **(b)** 424 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



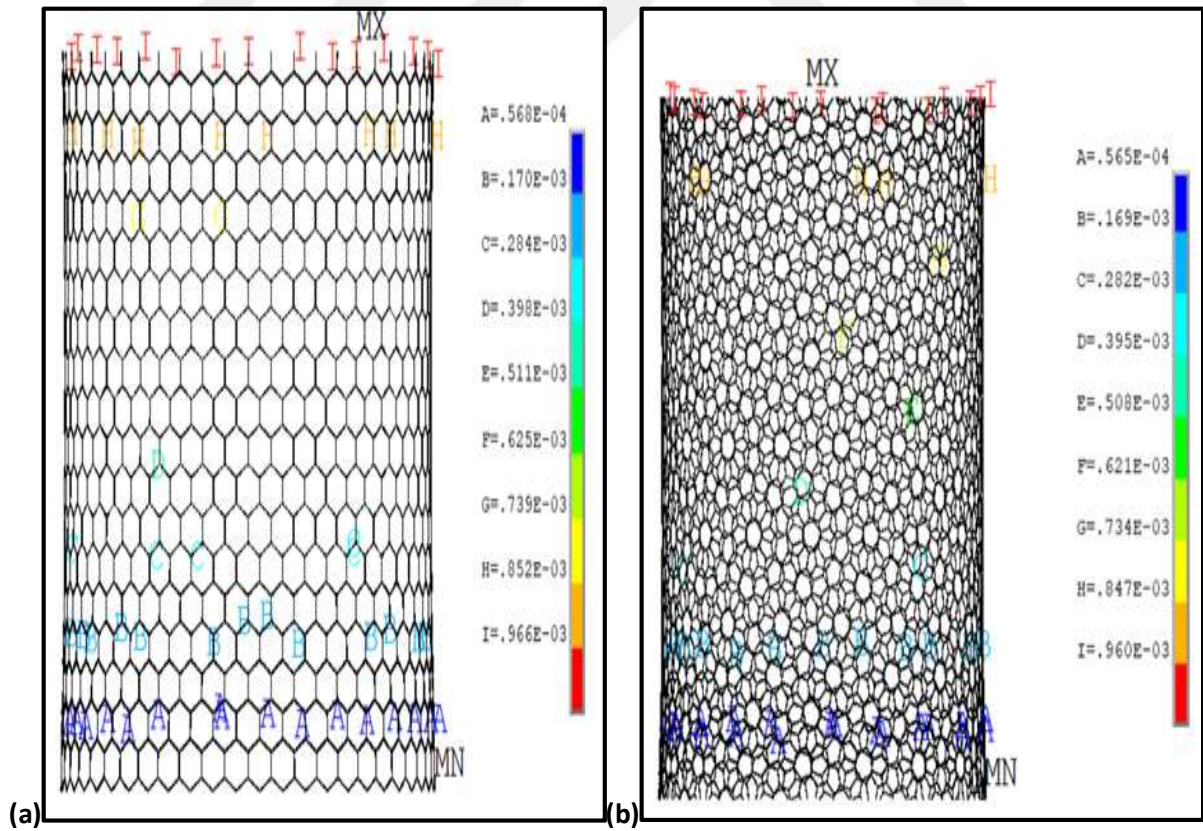
Şekil 84. (a) 432 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 433 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



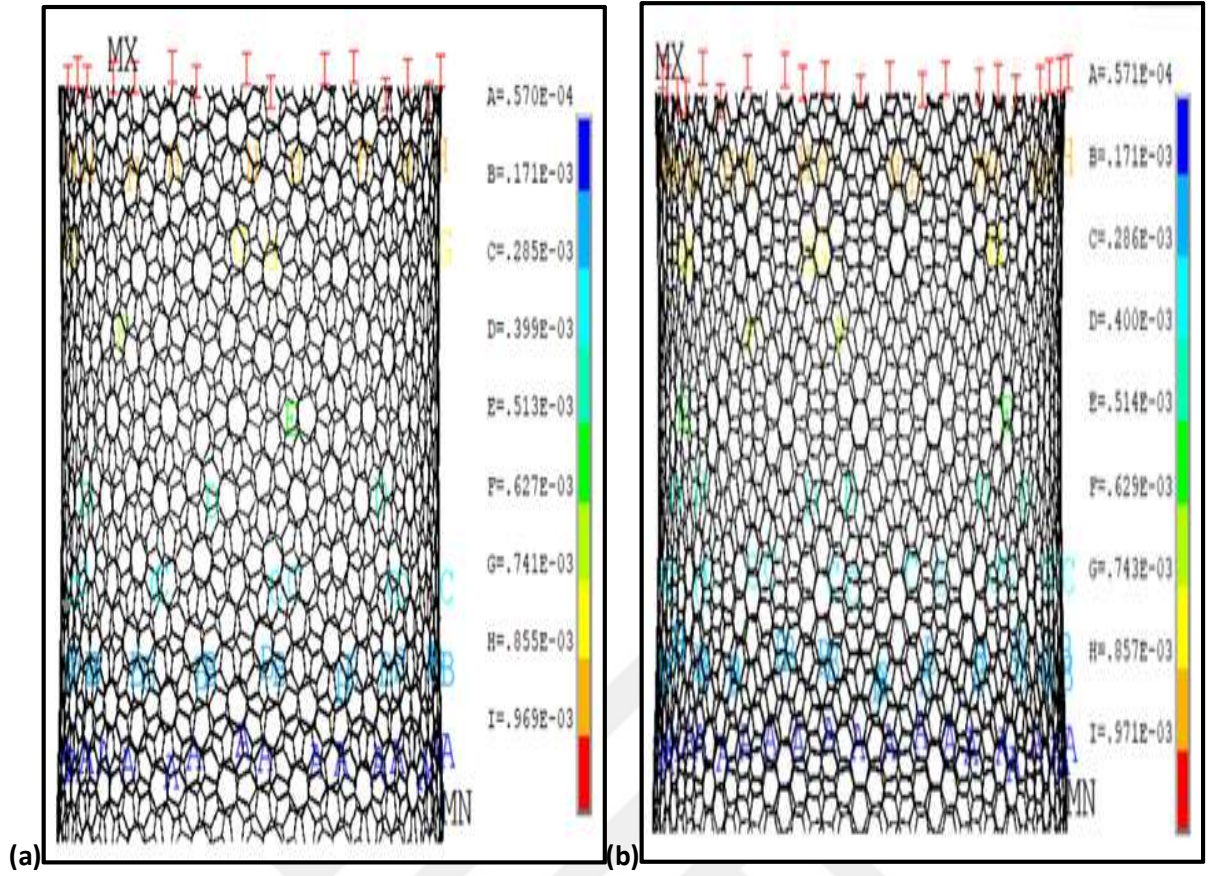
Şekil 85. (a) 434 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 444 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



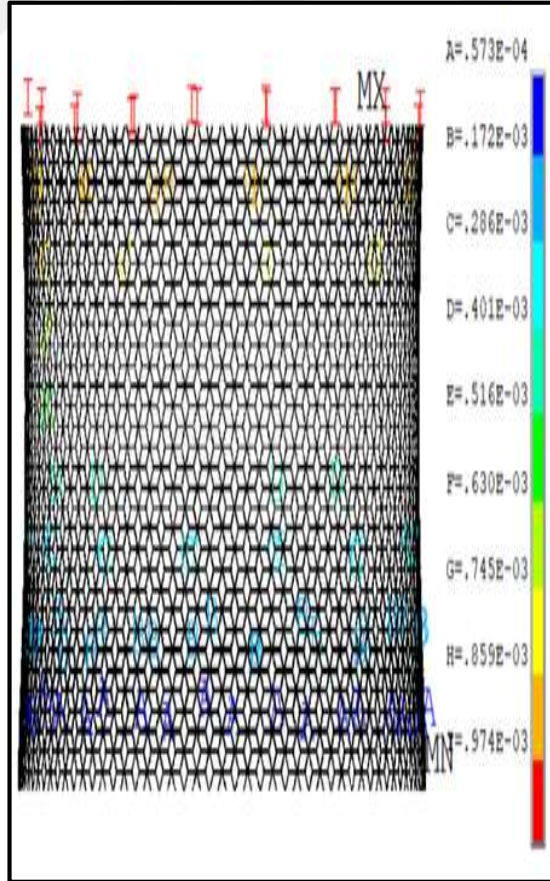
Şekil 86. (a) 512 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 513 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



Şekil 87. (a) 514 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi (b) 523 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değiştirmesi



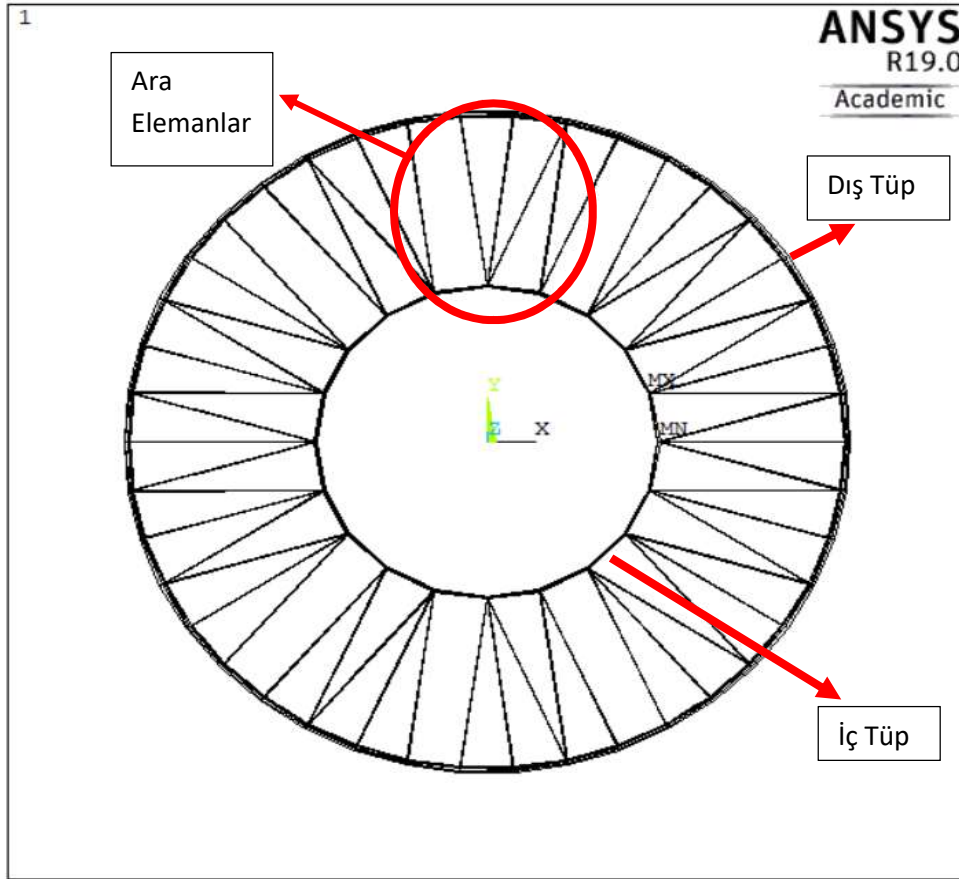
Şekil 88. (a) 524 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değişirmesi (b) 534 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değişirmesi



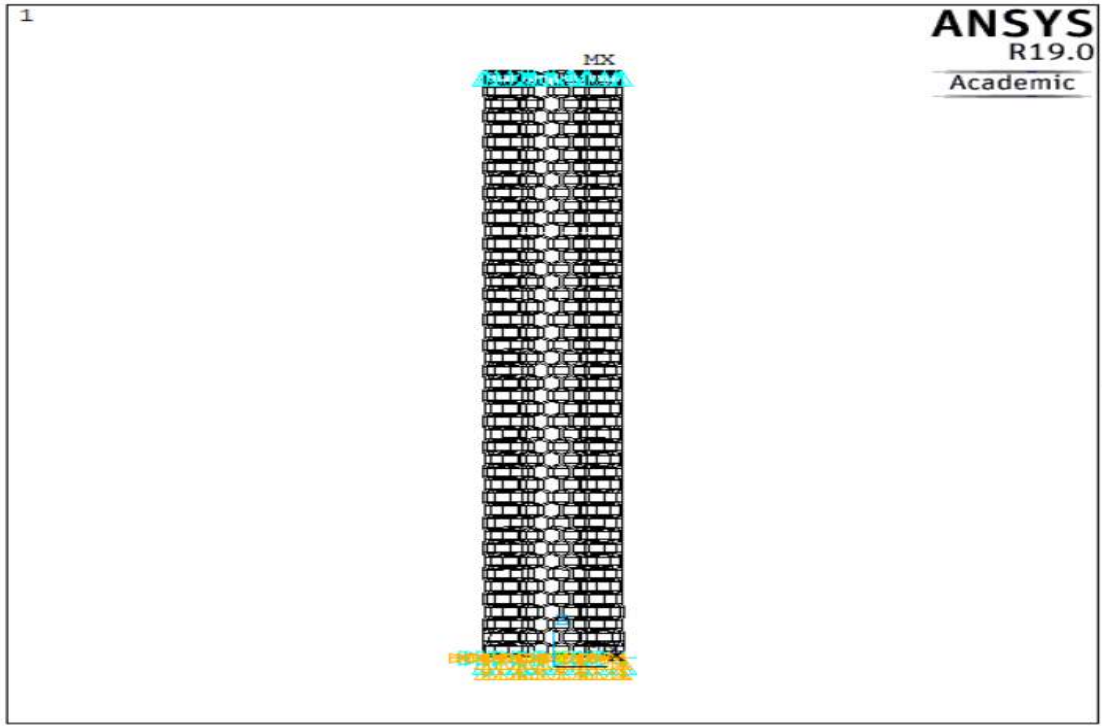
Şekil 89. 544 Nanotüpünün Çözümünden Elde Edilen Z Yönünde Yer Değişirmesi

Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Oluşturulması Ve ANSYS Mechanical APDL'e Aktarılması

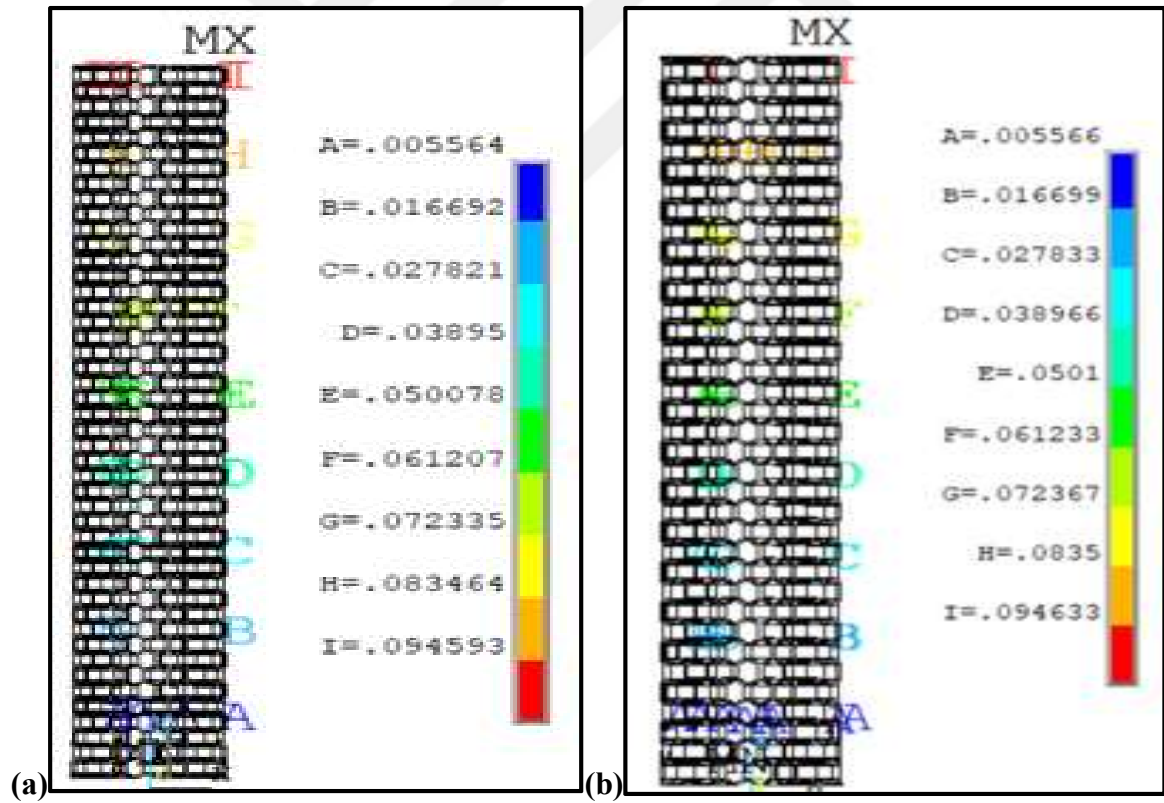
Nanotüp kiraliteleri belirlenip isimlendirmeler yapıldıktan sonra nanotüp modeller programından modeller iç tüp ve dış tüp olarak ayrı ayrı oluşturuldu. Her iki tüpün koordinatları .txt uzantılı kaydedildi ve Excell'e aktarıldı. Önce iç tüp verileri daha sonra farklı bir Excell çalışma kitabında dış tüp verileri nanometreye çevrildi ve dış tüpün değerleri iç tüpün verilerinin sonuna eklenerek tek bir dosya haline getirilerek .csv (CSV Virgülle ayrılmış) uzantılı kaydedildi. Daha sonra csv dosyasında noktalı virgüller(;) virgüle (,) çevrildi ve yeniden kaydedildi. ANSYS APDL'e girilen input ile iç içe tüpler oluşturuldu ve iki tüp arasına eleman ataması yapıldı (Şekil 91). Sınır şartları uygulandıktan sonra (Şekil 92) çözümleme yaptırılmış ve Z yönünde yer değiştirmeleri Şekil 93-110'te verilmiştir.



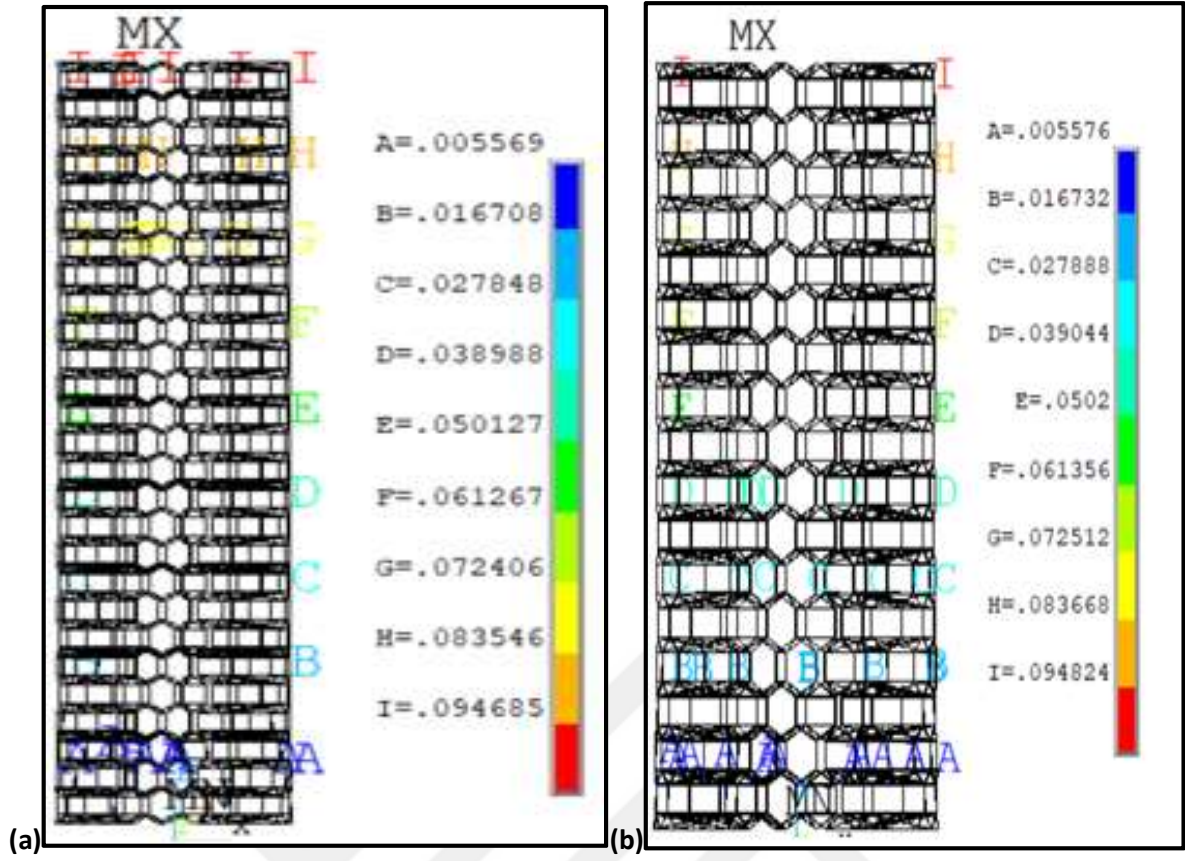
Şekil 90. Z11 çift duvarlı karbon nanotüpünün üst görünümü



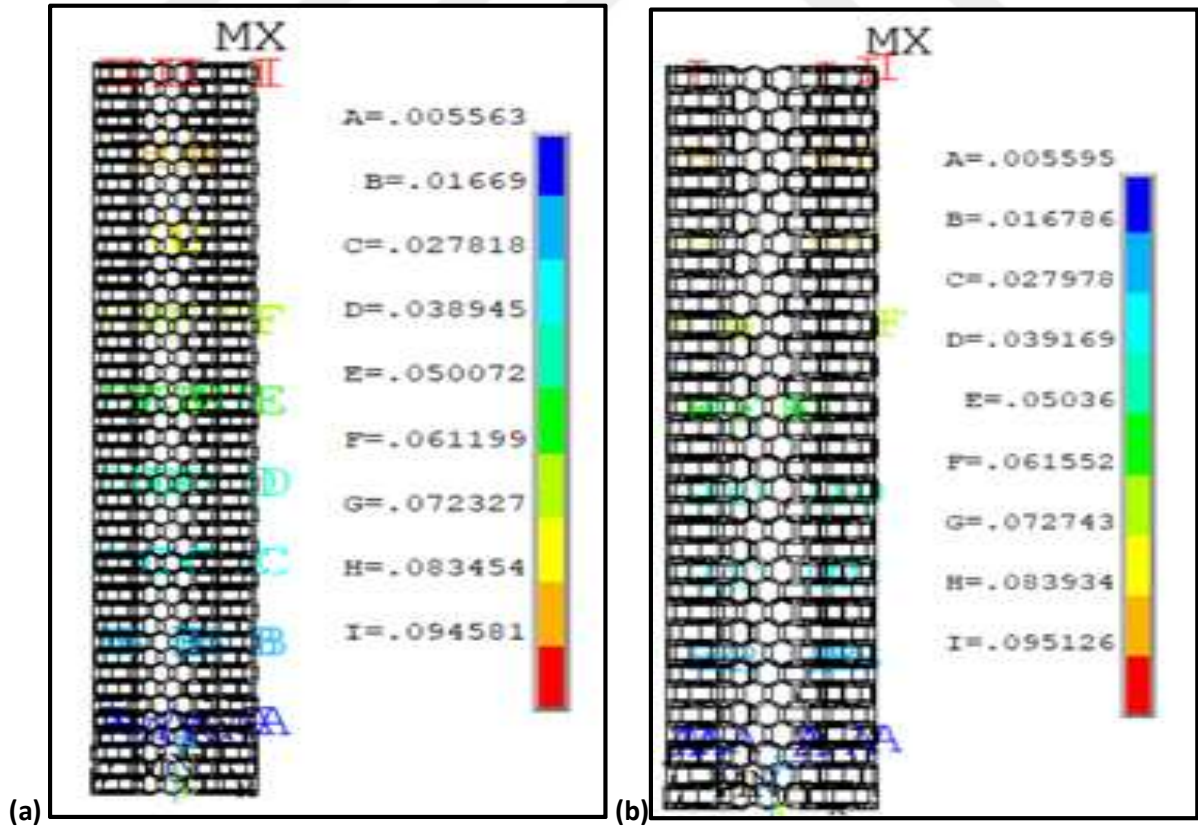
Şekil 91. Z11 Çift Duvarlı Nanotüpün Yükleme ve Sınır Şartları



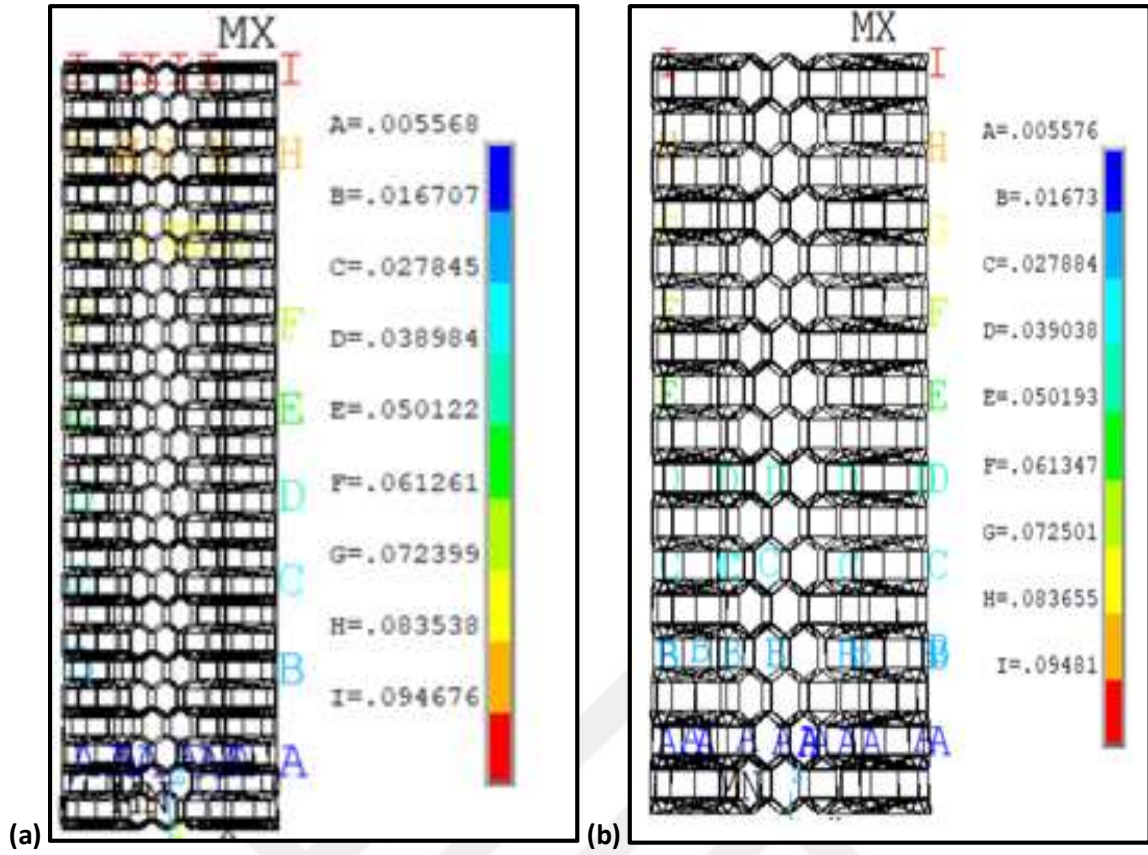
Şekil 92.(a) Z11 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z12 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



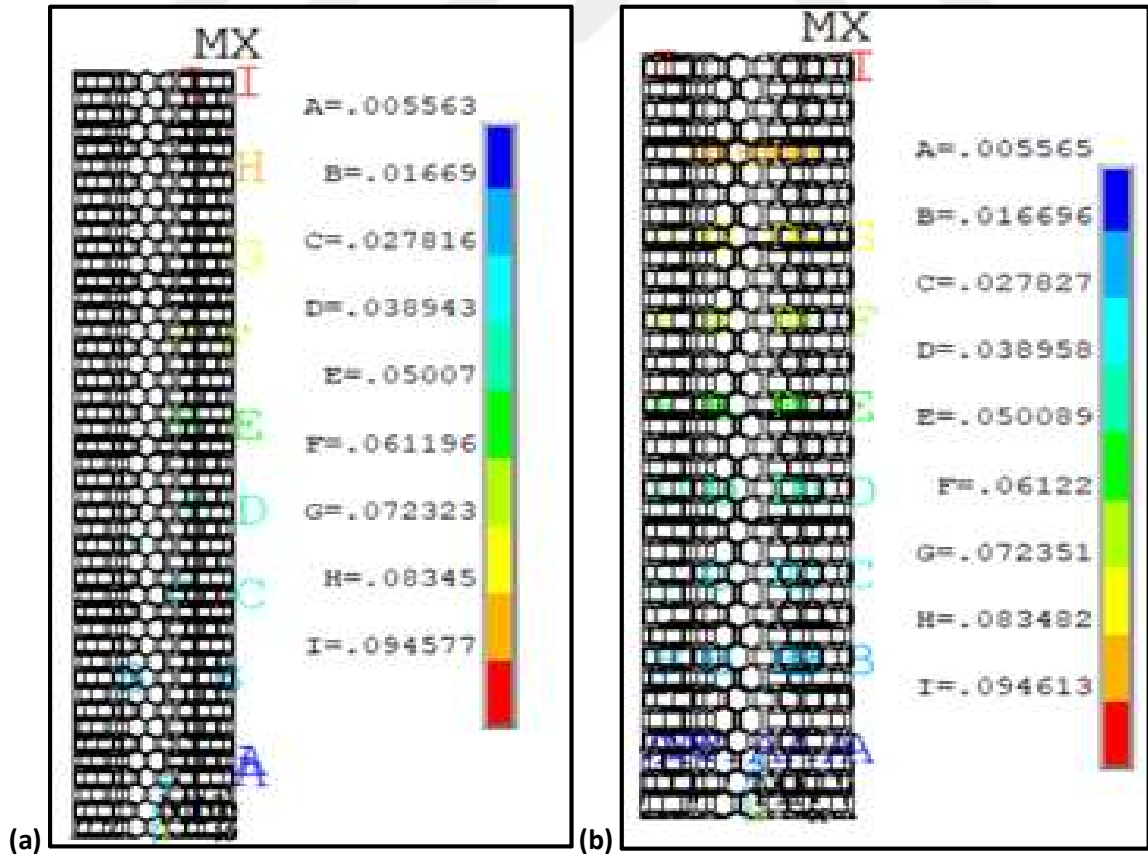
Şekil 93. (a) Z23 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z24 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



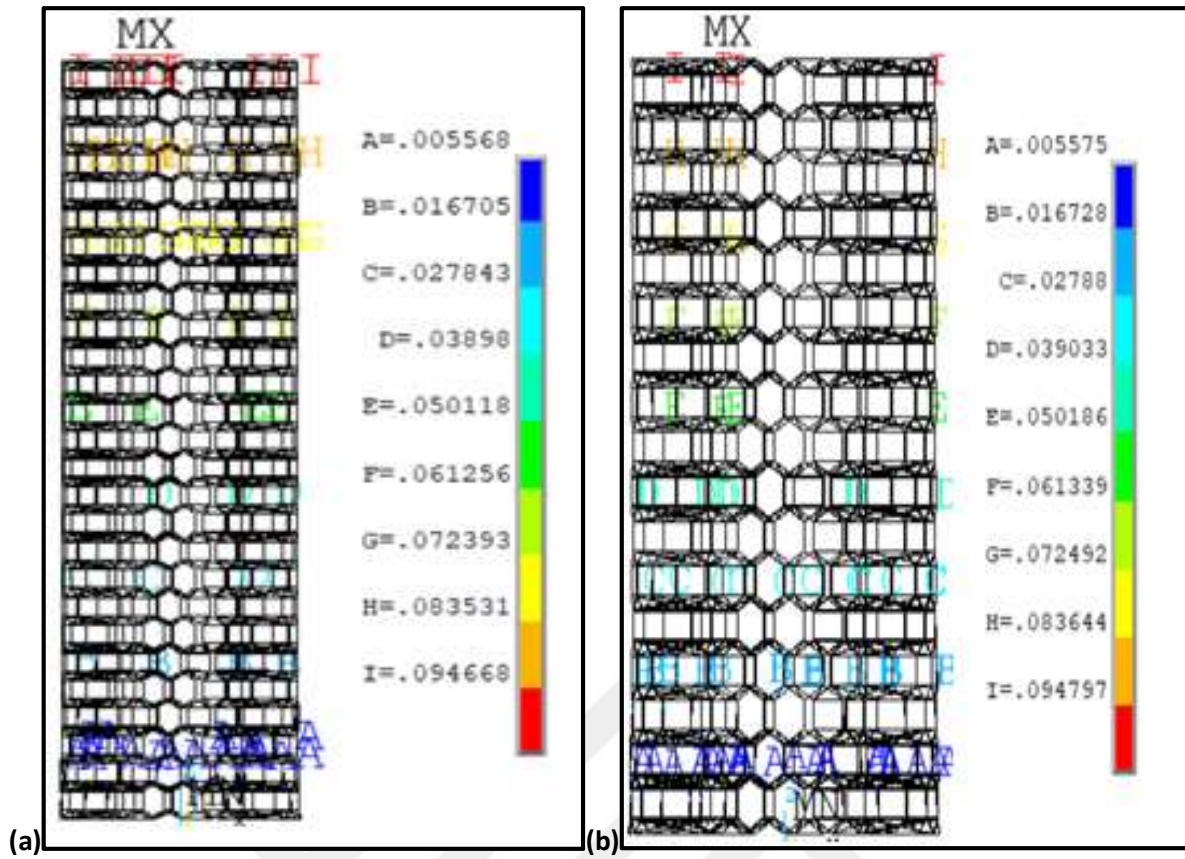
Şekil 94. (a) Z31 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z32 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



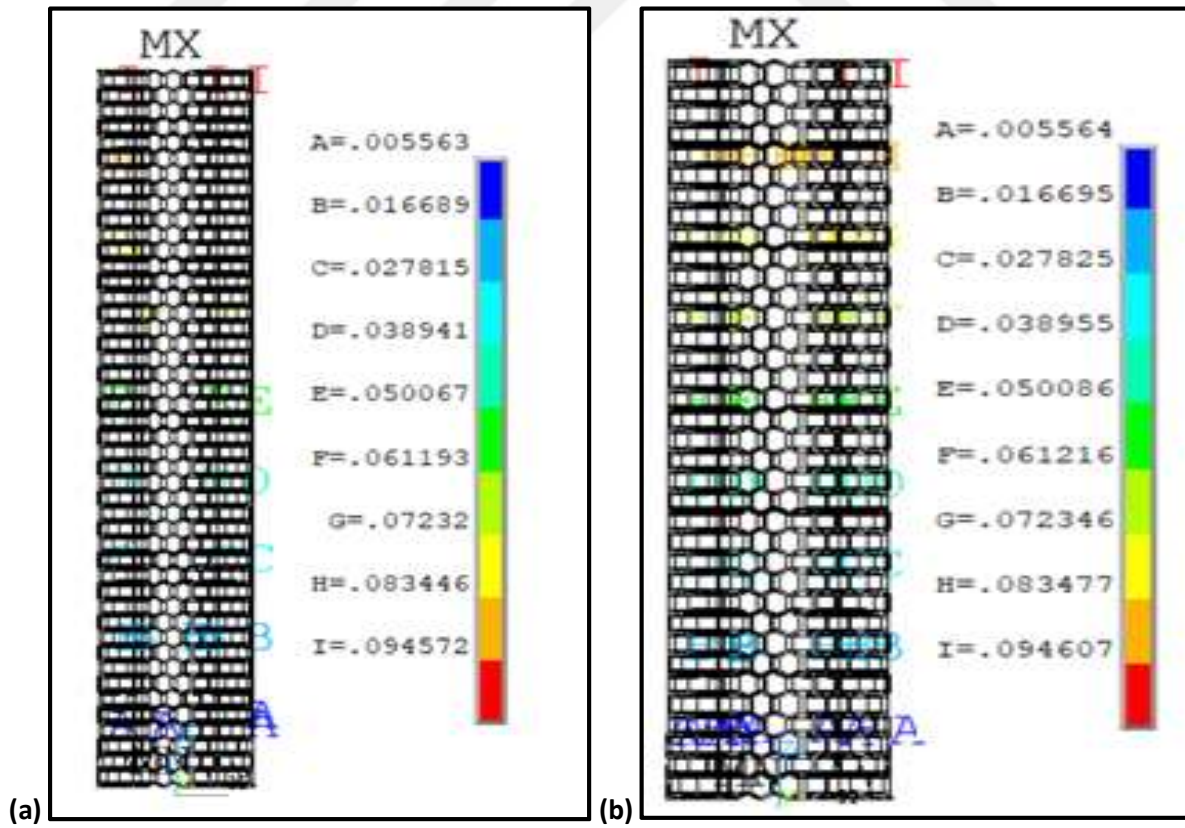
Şekil 95.(a) Z33 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z34 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



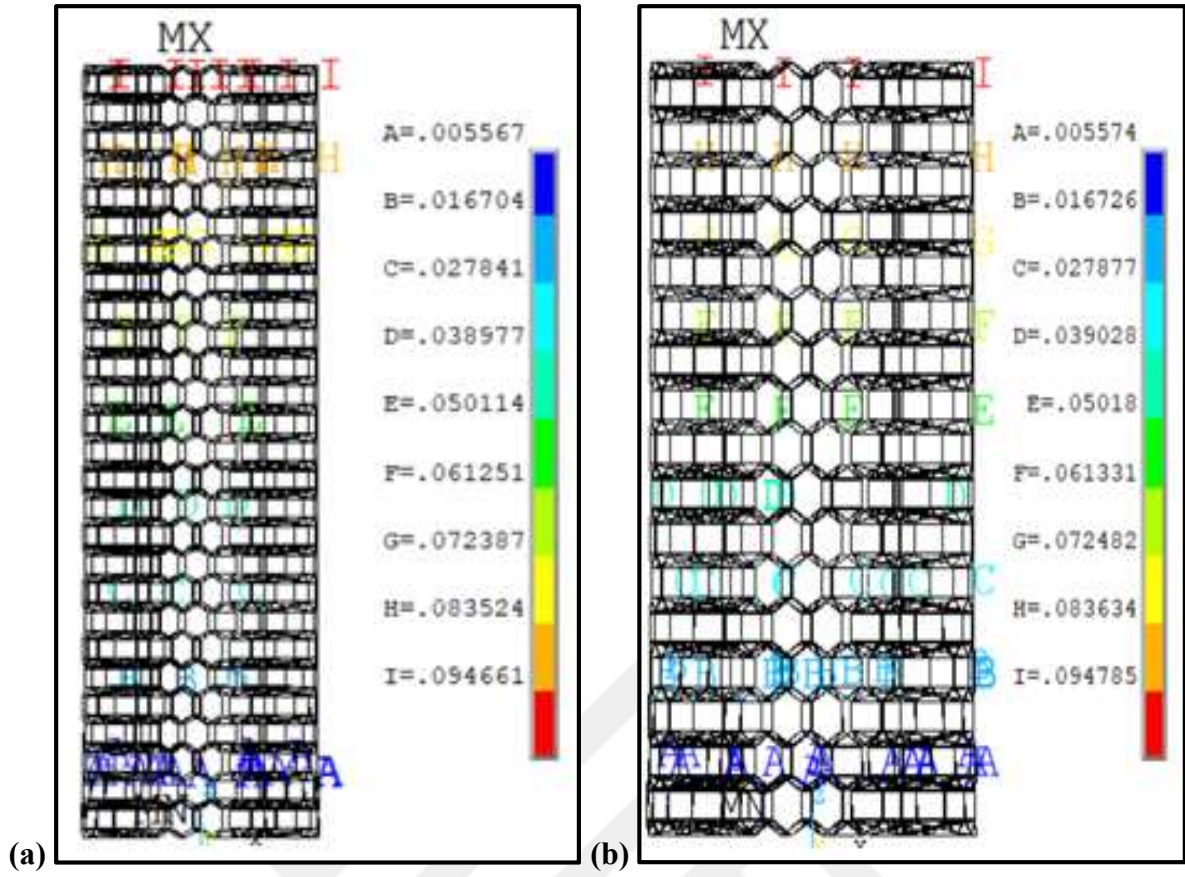
Şekil 96. (a) Z41 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z42 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



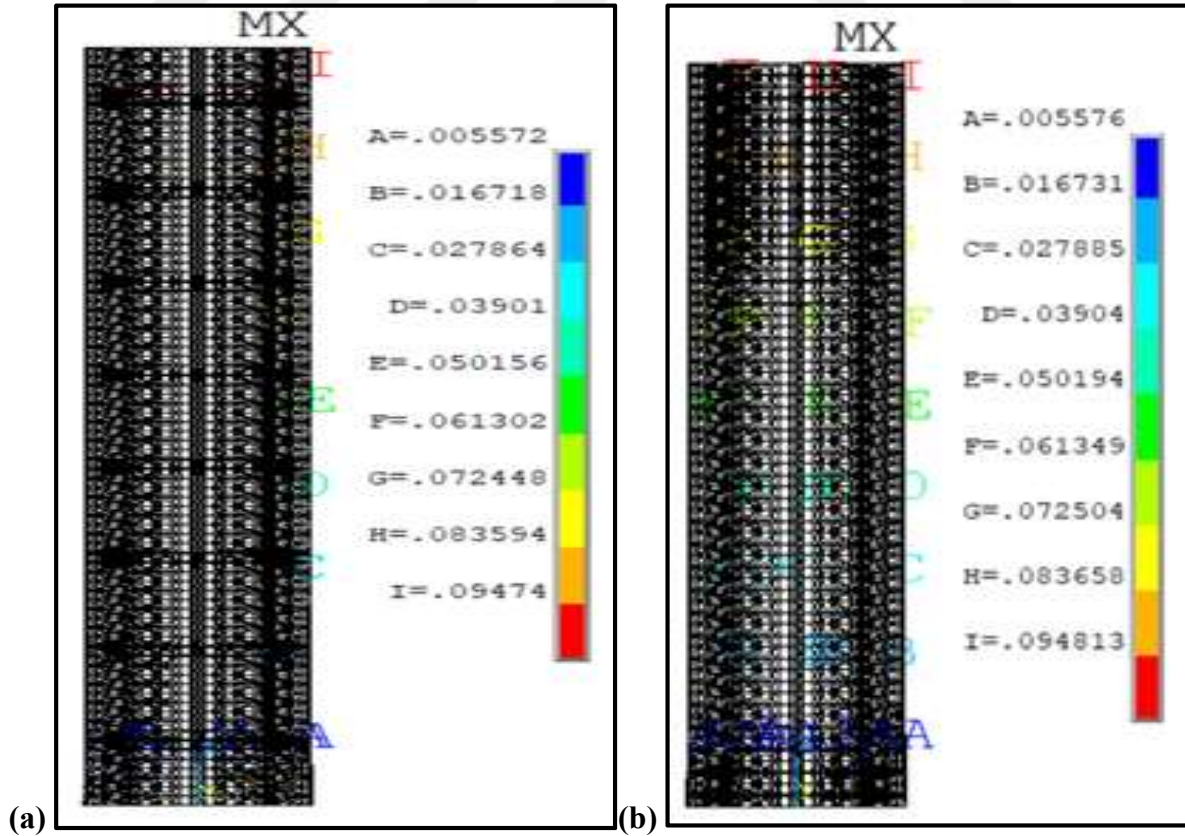
Şekil 97.(a) Z43 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z44 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



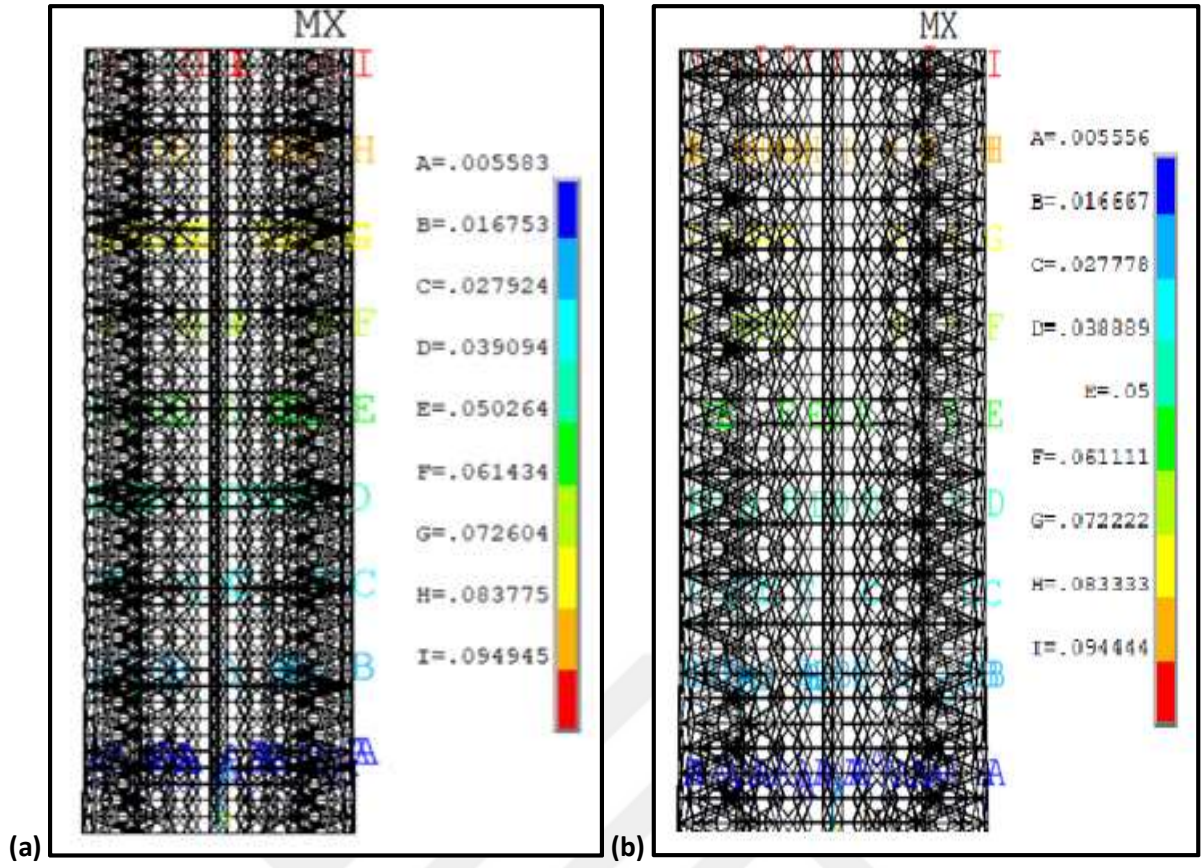
Şekil 98. (a) Z51 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z52 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



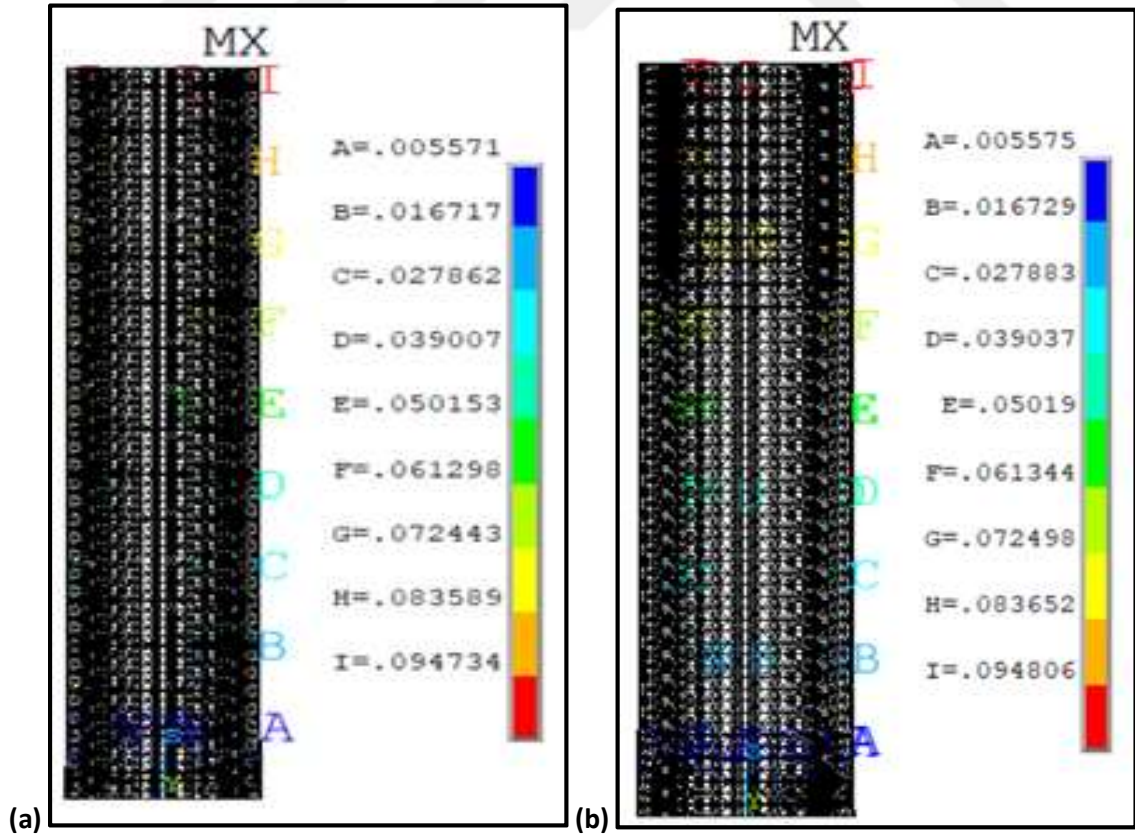
Şekil 99. (a) Z53 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) Z54 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



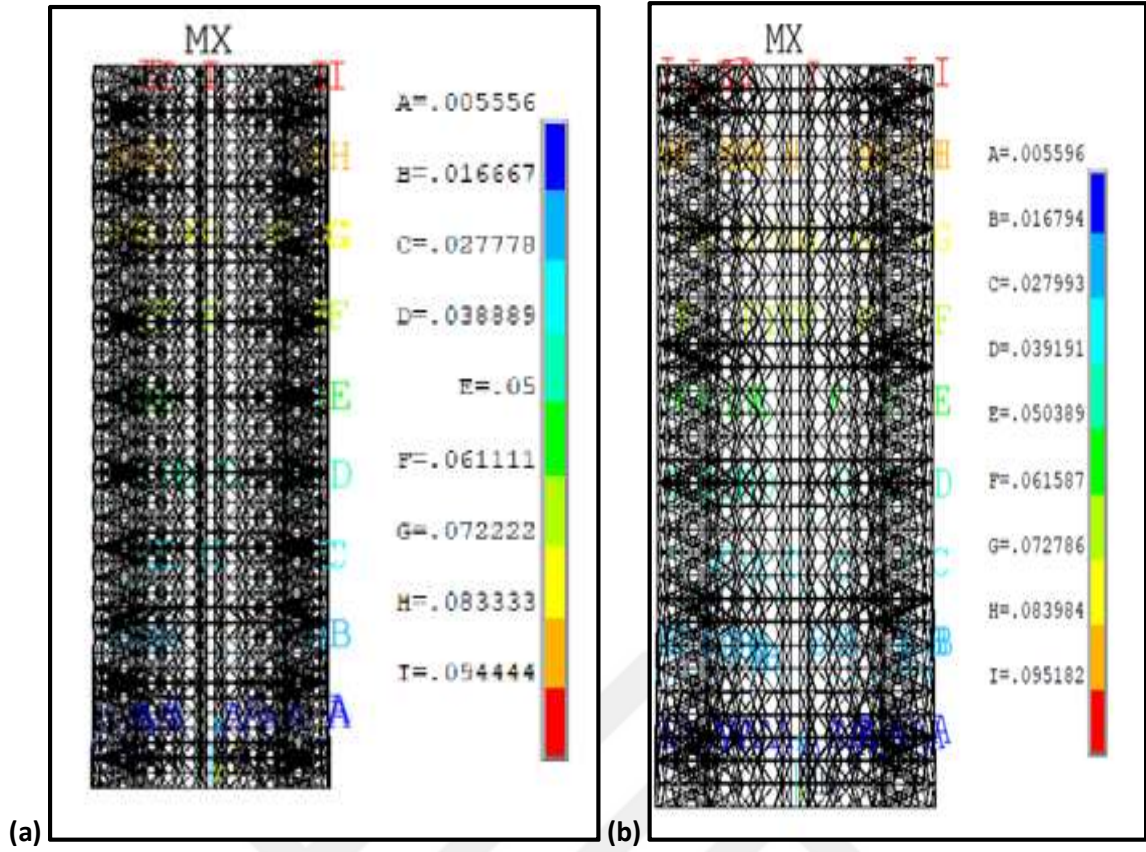
Şekil 100. (a) K11 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K12 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



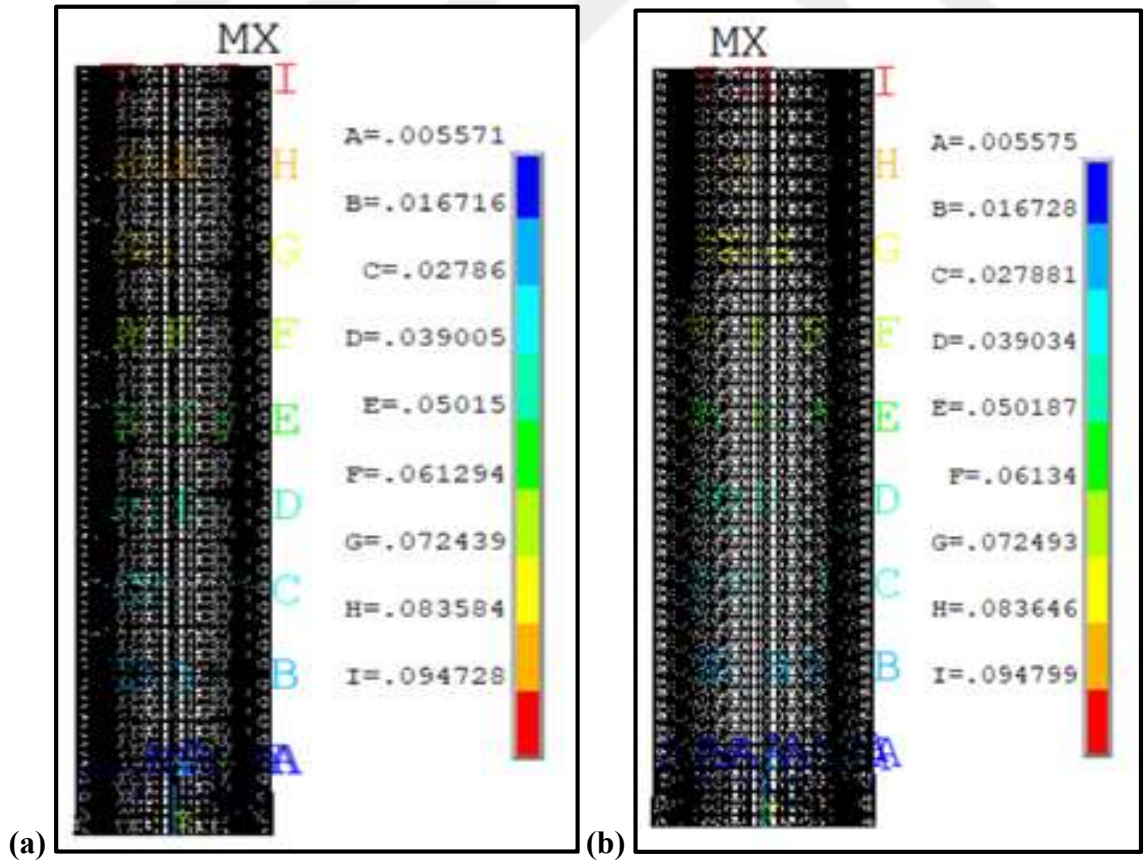
Şekil 101.(a) K13 nanotüpünün çözümden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K14 nanotüpünün çözümden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



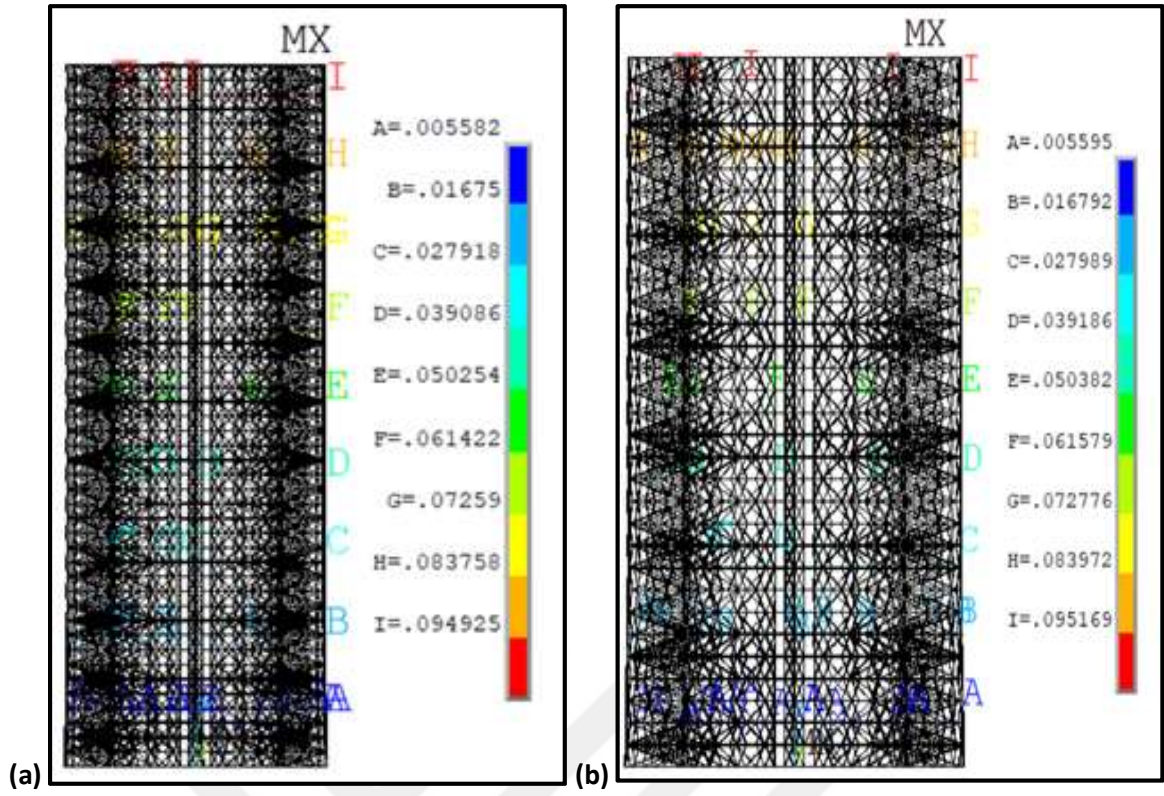
Şekil 102. (a) K21 nanotüpünün çözümden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K22 nanotüpünün çözümden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



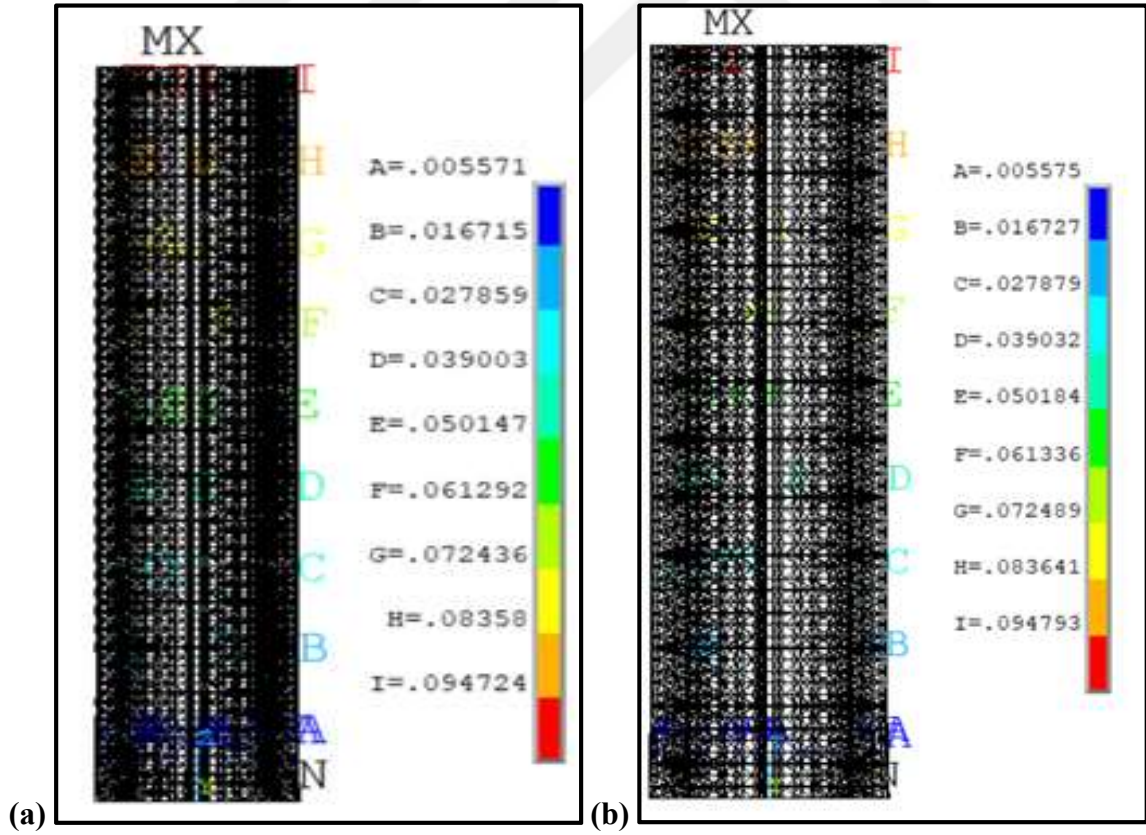
Şekil 103.(a) K23 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K24 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



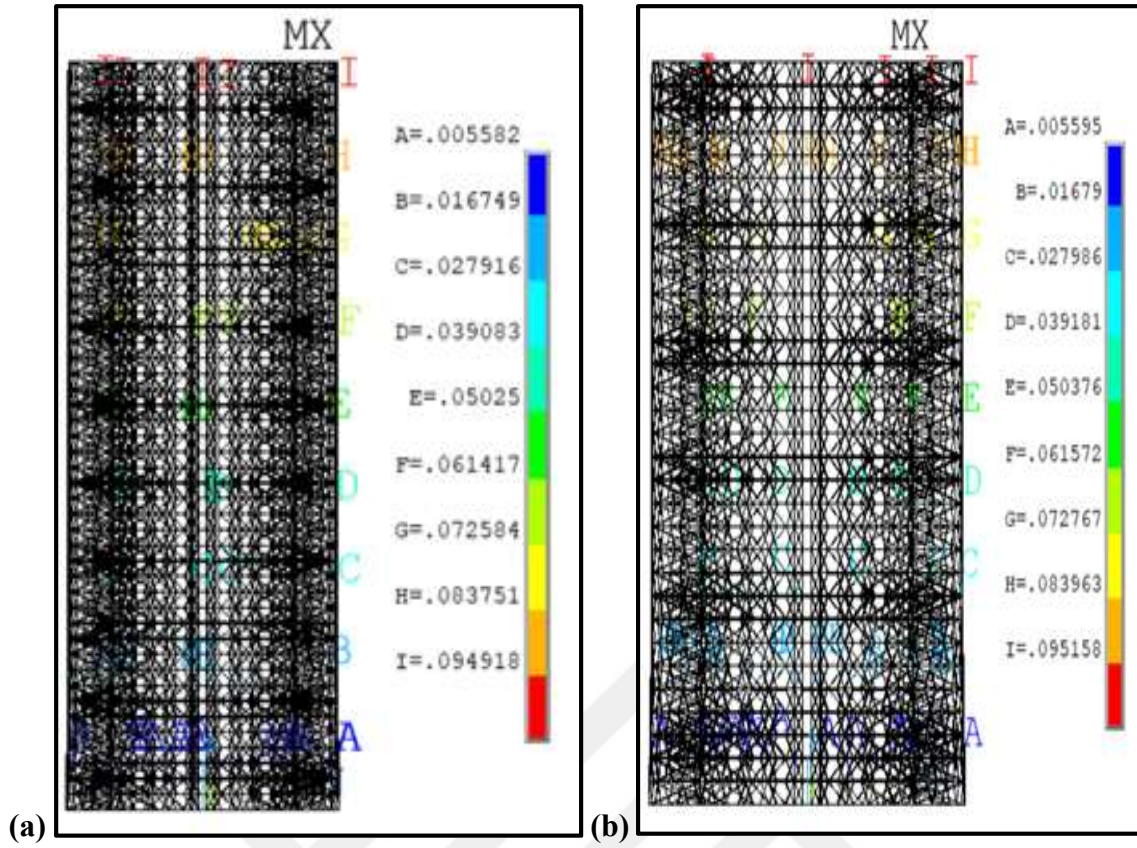
Şekil 104. (a) K31 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K32 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



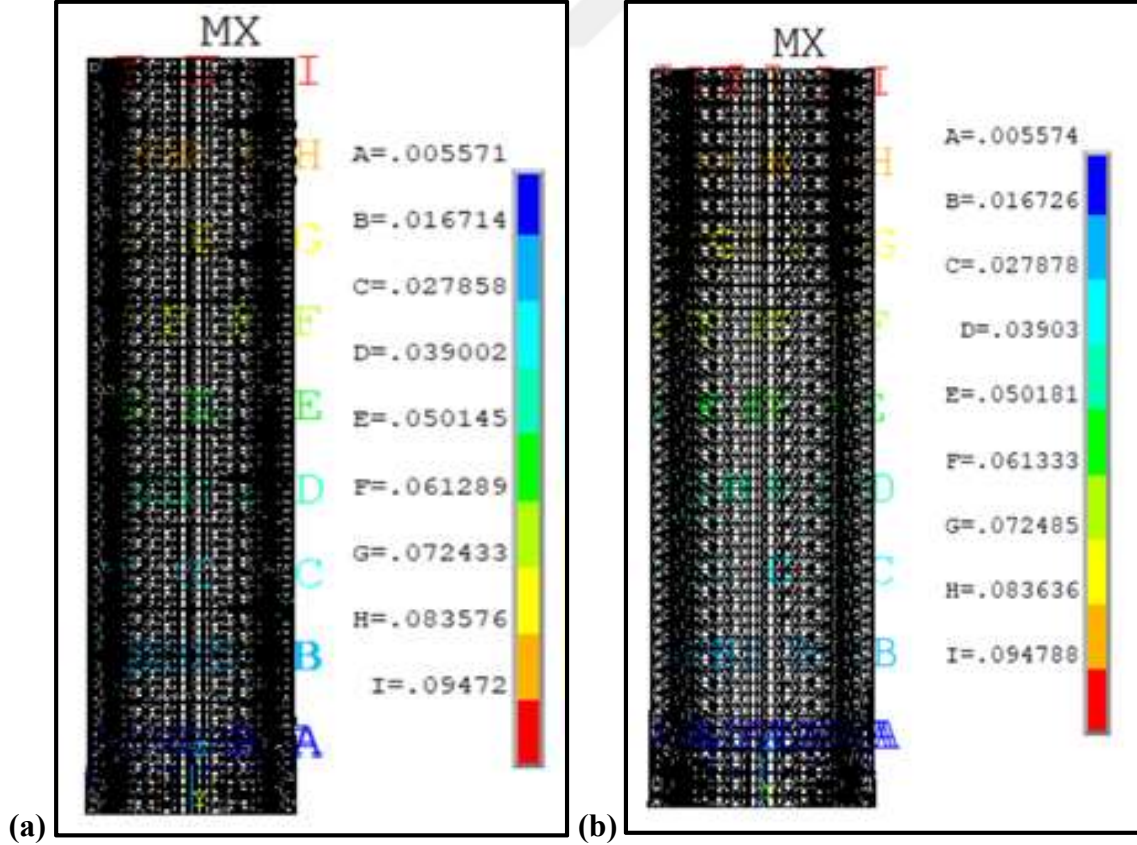
Şekil 105. (a) K33 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K34 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



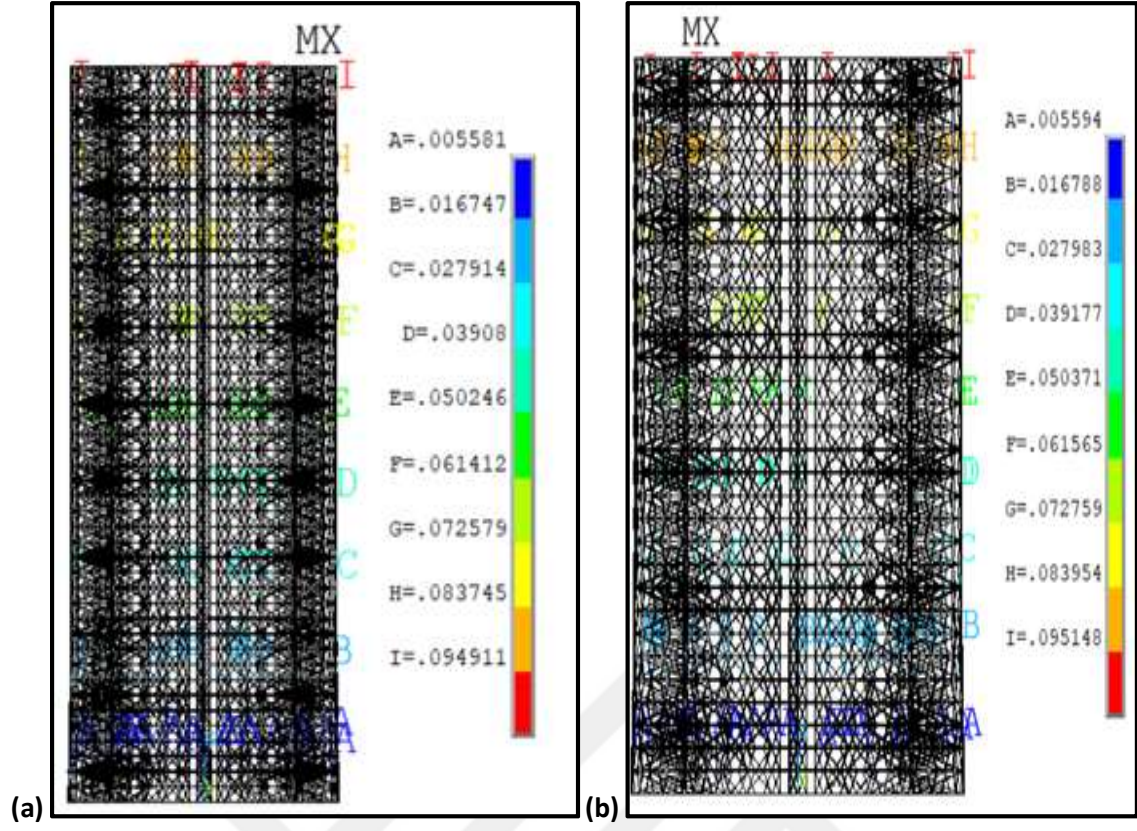
Şekil 106. (a) K41 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K42 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



Şekil 107. (a) K43 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi **(b)** K44 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



Şekil 108. (a) K51 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi **(b)** K52 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi



Şekil 109.(a) K53 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi (b) K54 nanotüpünün çözümünden elde edilen z yönünde yer değiştirmesi

ARAŞTIRMA BULGULARI

Analiz Verileri

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Analiz Sonunda Elde Edilen Veriler

Modeller oluşturulup yüklemeler yapıldıktan sonra Tablo 9-13'te verilen bilgiler değerlendirilmek üzere;

1. Kiralitesi (n,0) olan tüpler için tüp boyundaki uzamanın elastiklik modülüne etkisi (Şekil 111),
2. Kiralitesi (n,n) olan tüpler için tüp boyundaki uzamanın elastiklik modülüne etkisi (Şekil 112),
3. Her bir grup için d değerlerine bağlı olarak boy değişiminin elastiklik modülüne etkisi (Şekil 113-117)
4. Tüm gruplar ele alınarak tüplerin farklı tüp boyundaki değerlerine bağlı olarak tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi (Şekil 118-121) incelenmiştir.

Tablo 9-13'teki veriler incelendiğinde grup içinde tüp çapı değişiminin kiralite değişimine bağlı olduğu ve m değeri arttıkça arttığı gözlemlenmiştir. Aynı kiraliteye ve farklı tüp boyuna sahip tüplerde ise tüp boyu kısaldıkça elastiklik modülü değerlerinde artış olmuştur.

Tablo 8. 1. GRUP modellerinin t p  apı, t p boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik mod l  deęerleri

	MODE					ATOM	NODE	
	L NO	n	m	d (nm)	L (nm)	SAYISI (KEYPOINT)	(D�Ė� M SAYISI)	ELASTİK L� K MOD�L�
1. GRUP	111	10	0	0,7834	10	1130	24297	2,8323
	112	10	0	0,7834	8	1130	24037	2,8203
	113	10	0	0,7834	6	1130	23779	2,8251
	114	10	0	0,7834	4	1130	23510	2,8394
	121	10	3	0,9237	10	1331	28971	2,8278
	122	10	3	0,9237	8	1331	28094	2,8298
	123	10	3	0,9237	6	1331	26261	2,8339
	124	10	3	0,9237	4	1331	24978	2,8420
	131	10	6	1,0968	10	1582	34432	2,8253
	132	10	6	1,0968	8	1582	33246	2,8339
	133	10	6	1,0968	6	1582	30664	2,8373
	134	10	6	1,0968	4	1582	26825	2,8475
	141	10	10	1,357	10	1960	42515	2,8286
	142	10	10	1,357	8	1960	40814	2,8314
	143	10	10	1,357	6	1960	36075	2,8397
	144	10	10	1,357	4	1960	30150	2,8479

Tablo 9. 2. GRUP modellerinin t p  apı, t p boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik mod l  deęerleri

	MODE					ATOM	NODE	
	L NO	n	m	d (nm)	L (nm)	SAYISI (KEYPOINT)	(D�Ė� M SAYISI)	ELASTİK L� K MOD�L�
2. GRUP	211	20	0	1,5669	10	2260	48947	2,8321
	212	20	0	1,5669	8	2260	48687	2,8249
	213	20	0	1,5669	6	2260	48429	2,8357
	214	20	0	1,5669	4	2260	48160	2,8536
	221	20	7	1,9014	10	2740	59665	2,8312
	222	20	7	1,9014	8	2740	58699	2,8361
	223	20	7	1,9014	6	2740	56881	2,8450
	224	20	7	1,9014	4	2740	54259	2,8597
	231	20	14	2,3188	10	3344	72961	2,8343
	232	20	14	2,3188	8	3344	71304	2,8391
	233	20	14	2,3188	6	3344	68608	2,8488
	234	20	14	2,3188	4	3344	63136	2,8650
	241	20	20	2,7139	10	3940	85355	2,8391
	242	20	20	2,7139	8	3940	83654	2,8425
	243	20	20	2,7139	6	3940	78915	2,8522
	244	20	20	2,7139	4	3940	72990	2,8687

Tablo 10. 3. GRUP modellerinin t p  apı, t p boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik mod l  deęerleri

	MODEL NO	n	m	d (nm)	L (nm)	ATOM SAYISI (KEYPOINT)	NODE (D�Ğ�M SAYISI)	ELASTİKLIK MOD�L�
3.GRUP	311	30	0	2,3503	10	3390	73597	2,8401
	312	30	0	2,3503	8	3390	73337	2,8330
	313	30	0	2,3503	6	3390	73079	2,8417
	314	30	0	2,3503	4	3390	72810	2,8648
	321	30	10	2,8247	10	4080	88943	2,8371
	322	30	10	2,8247	8	4080	88124	2,8450
	323	30	10	2,8247	6	4080	86408	2,8537
	324	30	10	2,8247	4	4080	83843	2,8716
	331	30	20	3,4149	10	4930	107495	2,8402
	332	30	20	3,4149	8	4930	106205	2,8468
	333	30	20	3,4149	6	4930	102472	2,8572
	334	30	20	3,4149	4	4930	98361	2,8786
	341	30	30	4,0709	10	5880	128195	2,8425
	342	30	30	4,0709	8	5880	126494	2,8480
	343	30	30	4,0709	6	5880	121755	2,8604
	344	30	30	4,0709	4	5880	115830	2,8839

Tablo 11. 4. GRUP modellerinin t p  apı, t p boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik mod l  deęerleri

	MODE L NO	n	m	d (nm)	L (nm)	ATOM SAYISI (KEYPOINT)	NODE (D�Ğ�M SAYISI)	ELASTİK K MOD�L�
4. GRUP	411	40	0	3,1338	10	4520	98247	2,8440
	412	40	0	3,1338	8	4520	97987	2,8369
	413	40	0	3,1338	6	4520	97729	2,8482
	414	40	0	3,1338	4	4520	97460	2,8751
	421	40	13	3,7482	10	5402	117720	2,8424
	422	40	13	3,7482	8	5402	117243	2,8494
	423	40	13	3,7482	6	5402	115676	2,8594
	424	40	13	3,7482	4	5402	113169	2,8824
	431	40	26	4,5114	10	6502	141900	2,8451
	432	40	26	4,5114	8	6502	140138	2,8522
	433	40	26	4,5114	6	6502	137310	2,8650
	434	40	26	4,5114	4	6502	133220	2,8903
	441	40	40	5,4278	10	7840	171035	2,8477
	442	40	40	5,4278	8	7840	169334	2,8549
	443	40	40	5,4278	6	7840	164595	2,8698
	444	40	40	5,4278	4	7840	158670	2,8963

Tablo 12. 5. GRUP modellerinin t p  apı, t p boyu, atom sayısı, node sayısı ve elastiklik mod l  deęerleri

	MODE					ATOM	NODE	
	L NO	n	m	d (nm)	L (nm)	SAYISI (KEYPOINT)	(D�ę� M SAYISI)	ELASTİK L� K MOD�L�
	511	50	0	3,9172	10	5650	122897	2,8465
	512	50	0	3,9172	8	5650	122637	2,8412
	513	50	0	3,9172	6	5650	122379	2,8536
	514	50	0	3,9172	4	5650	122110	2,8833
	521	50	17	4,726	10	6810	148637	2,8447
	522	50	17	4,726	8	6810	147743	2,8542
	523	50	17	4,726	6	6810	146029	2,8669
5.	524	50	17	4,726	4	6810	143464	2,8922
GRUP	531	50	34	5,7336	10	8262	180264	2,8477
	532	50	34	5,7336	8	8262	178901	2,8581
	533	50	34	5,7336	6	8262	175220	2,8725
	534	50	34	5,7336	4	8262	170984	2,9012
	541	50	50	6,7868	10	9800	213875	2,8499
	542	50	50	6,7868	8	9800	212174	2,8593
	543	50	50	6,7868	6	9800	207435	2,8762
	544	50	50	6,7868	4	9800	201510	2,9068

Modeller oluřturulurken belirlenen Deplasman (ΔL), T p Uzunlukları(L) ve T p  apına(d) baęlı olan Alan(A) bilgileri Tablo 14-18’da verilmiřtir. ANSYS APDL programında yapılan     mlerden elde edilen reaksiyon kuvveti  ıktıları ve t m bu bilgilerden elde edilen Elastiklik Mod l  (E) deęerleri de yine tablolarda yer almaktadır. Tablolardaki deęerlerden Elastiklik Mod lleri, Hooke yasasından yararlanılarak hesaplanmıřtır.

$$\sigma = E \varepsilon \quad (\text{Hooke Yasası})$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (\text{Boyca \% deęiřim})$$

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (\text{Gerilme})$$

$$A = \pi \cdot d \cdot t \quad (t=0.34 \text{ nm})$$

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{F}{A}}{\frac{\Delta L}{L}} \quad (\text{Elastiklik Mod l })$$

Tablo 13. 1.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

GRUP NO	MODEL NO	A($\pi \cdot d \cdot t$)	L (nm)	ΔL (nm)	F (Nn)	E (Tpa)
1. GRUP	111	0,8368	10	0,001	0,237	2,8323
	112	0,8368	8	0,001	0,295	2,8203
	113	0,8368	6	0,001	0,394	2,8251
	114	0,8368	4	0,001	0,594	2,8394
	121	0,9866	10	0,001	0,279	2,8278
	122	0,9866	8	0,001	0,349	2,8298
	123	0,9866	6	0,001	0,466	2,8339
	124	0,9866	4	0,001	0,701	2,8420
	131	1,1715	10	0,001	0,331	2,8253
	132	1,1715	8	0,001	0,415	2,8339
	133	1,1715	6	0,001	0,554	2,8373
	134	1,1715	4	0,001	0,834	2,8475
	141	1,4495	10	0,001	0,41	2,8286
	142	1,4495	8	0,001	0,513	2,8314
	143	1,4495	6	0,001	0,686	2,8397
	144	1,4495	4	0,001	1,032	2,8479

Tablo 14. 2.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

GRUP NO	MODEL NO	A($\pi \cdot d \cdot t$)	L (nm)	ΔL (nm)	F (Nn)	E (Tpa)
2.GRUP	211	1,6737	10	0,001	0,474	2,8321
	212	1,6737	8	0,001	0,591	2,8249
	213	1,6737	6	0,001	0,791	2,8357
	214	1,6737	4	0,001	1,194	2,8536
	221	2,0310	10	0,001	0,575	2,8312
	222	2,0310	8	0,001	0,72	2,8361
	223	2,0310	6	0,001	0,963	2,8450
	224	2,0310	4	0,001	1,452	2,8597
	231	2,4768	10	0,001	0,702	2,8343
	232	2,4768	8	0,001	0,879	2,8391
	233	2,4768	6	0,001	1,176	2,8488
	234	2,4768	4	0,001	1,774	2,8650
	241	2,8988	10	0,001	0,823	2,8391
	242	2,8988	8	0,001	1,030	2,8425
	243	2,8988	6	0,001	1,378	2,8522
	244	2,8988	4	0,001	2,079	2,8687

Tablo 15. 3.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

GRUP NO	MODEL NO	A($\pi \cdot d \cdot t$)	L (nm)	ΔL (nm)	F (Nn)	E (Tpa)
3.GRUP	311	2,5105	10	0,001	0,713	2,8401
	312	2,5105	8	0,001	0,889	2,8330
	313	2,5105	6	0,001	1,189	2,8417
	314	2,5105	4	0,001	1,798	2,8648
	321	3,0172	10	0,001	0,856	2,8371
	322	3,0172	8	0,001	1,073	2,8450
	323	3,0172	6	0,001	1,435	2,8537
	324	3,0172	4	0,001	2,166	2,8716
	331	3,6476	10	0,001	1,036	2,8402
	332	3,6476	8	0,001	1,298	2,8468
	333	3,6476	6	0,001	1,737	2,8572
	334	3,6476	4	0,001	2,625	2,8786
	341	4,3483	10	0,001	1,236	2,8425
	342	4,3483	8	0,001	1,548	2,8480
	343	4,3483	6	0,001	2,073	2,8604
	344	4,3483	4	0,001	3,135	2,8839

Tablo 16. 4.GRUP Modellerinin Tüp Boyu, Kesit Alanı, Deplasmanı, Uygulanan Reaksiyon Kuvveti ve bu değerlerden elde edilen Elastiklik Modülü değerleri

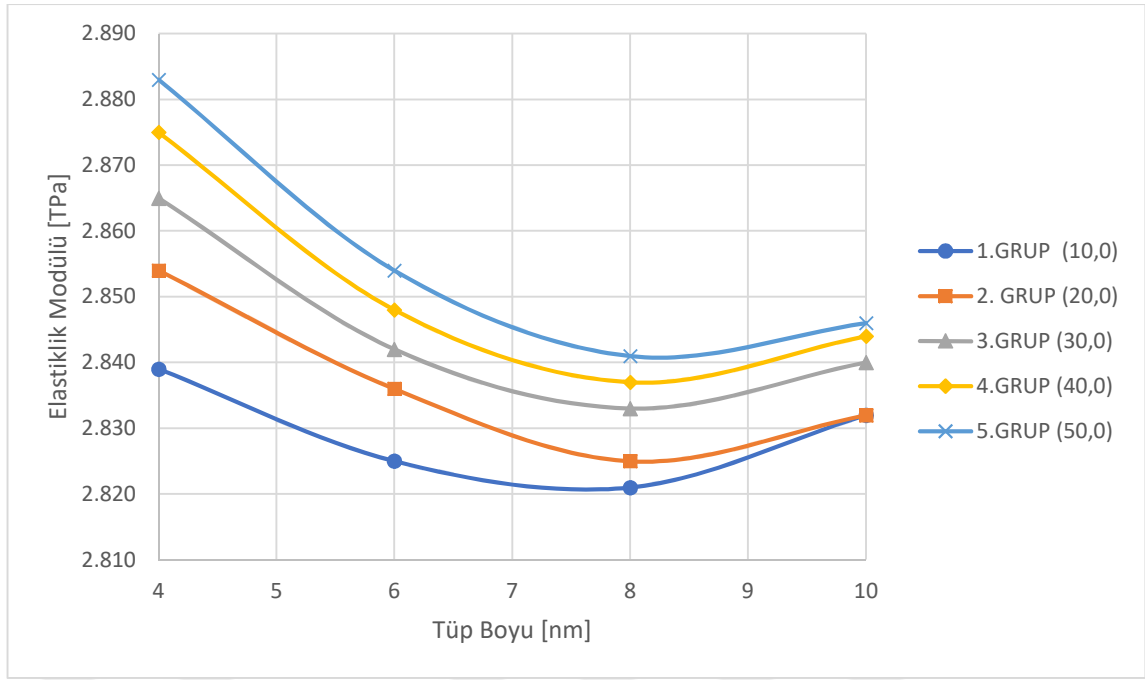
GRUP NO	MODEL NO	A($\pi \cdot d \cdot t$)	L (nm)	ΔL (nm)	F (Nn)	E (Tpa)
4. GRUP	411	3,3473	10	0,001	0,952	2,8440
	412	3,3473	8	0,001	1,187	2,8369
	413	3,3473	6	0,001	1,589	2,8482
	414	3,3473	4	0,001	2,406	2,8751
	421	4,0036	10	0,001	1,138	2,8424
	422	4,0036	8	0,001	1,426	2,8494
	423	4,0036	6	0,001	1,908	2,8594
	424	4,0036	4	0,001	2,885	2,8824
	431	4,8188	10	0,001	1,371	2,8451
	432	4,8188	8	0,001	1,718	2,8522
	433	4,8188	6	0,001	2,301	2,8650
	434	4,8188	4	0,001	3,482	2,8903
	441	5,7977	10	0,001	1,651	2,8477
	442	5,7977	8	0,001	2,069	2,8549
	443	5,7977	6	0,001	2,773	2,8698
	444	5,7977	4	0,001	4,198	2,8963

Tablo 17. 5.GRUP modellerinin tüp boyu, kesit alanı, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

GRUP NO	MODEL NO	A($\pi \cdot d \cdot t$)	L (nm)	ΔL (nm)	F (Nn)	E (Tpa)
5. GRUP	511	4,1841	10	0,001	1,191	2,8465
	512	4,1841	8	0,001	1,486	2,8412
	513	4,1841	6	0,001	1,990	2,8536
	514	4,1841	4	0,001	3,016	2,8833
	521	5,0480	10	0,001	1,436	2,8447
	522	5,0480	8	0,001	1,801	2,8542
	523	5,0480	6	0,001	2,412	2,8669
	524	5,0480	4	0,001	3,650	2,8922
	531	6,1243	10	0,001	1,744	2,8477
	532	6,1243	8	0,001	2,188	2,8581
	533	6,1243	6	0,001	2,932	2,8725
	534	6,1243	4	0,001	4,442	2,9012
	541	7,2493	10	0,001	2,066	2,8499
	542	7,2493	8	0,001	2,591	2,8593
	543	7,2493	6	0,001	3,475	2,8762
	544	7,2493	4	0,001	5,268	2,9068

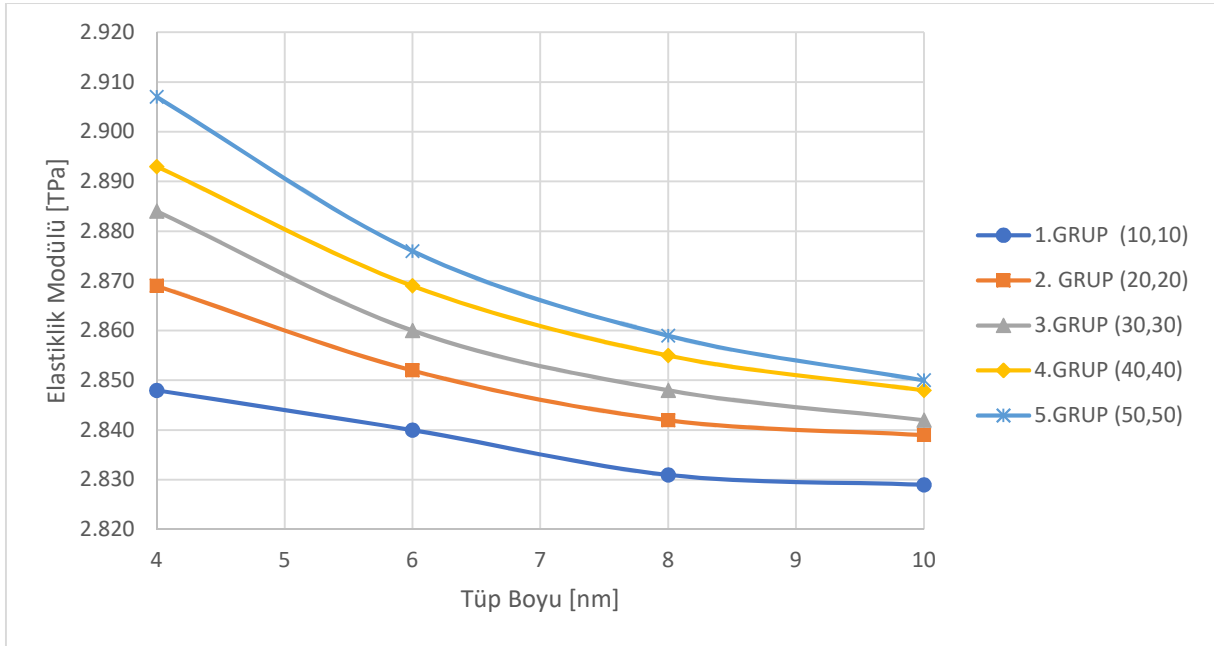
Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Boyundaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi

Hesaplanan Elastiklik modülü değerleri kullanılarak Şekil 111-121’de verilen grafikler oluşturulmuştur. Tüm gruplarda (n,0) olan tüpler için Şekil 111’deki Tüp boyu- Elastiklik Modülü grafiği oluşturuldu. Şekil 111’de görüldüğü gibi her bir grupta artan tüp boyu ile elastiklik modülünde başlangıçta azalma gözlenirken daha sonra artış gözlemlenmiştir. Aynı zamanda n değerine bağlı olarak grupların her biri için elastiklik modülü değeri incelendiğinde L=4 nm tüp boyundan L=10 nm tüp boyuna doğru gidildikçe elastiklik modülü değerleri birbirine yaklaşma eğiliminde olduğu görülmektedir. Yani düşey yönlü bakıldığında L=4 nm’de değerler arası fark fazlayken L=10 nm’de bu fark daha düşüktür.



Şekil 110. Zikzak (n,0) tip nanotüpler için tüp boyu- elastiklik modülü grafiği

Şekil 112’ de (n,n) yani koltuk tipi nanotüplerin Tüp Boyu - Elastiklik Modülü Grafiği incelendiğinde, artan tüp boyu ile elastiklik modülünün azalma eğiliminde olduğu görülmektedir. Tüplerin L=4 nm tüp boyundan L=10 nm tüp boyuna doğru gidildikçe yani tüp boyu uzadıkça her gruptaki elastiklik modülü değerleri birbirine yaklaşmaktadır.

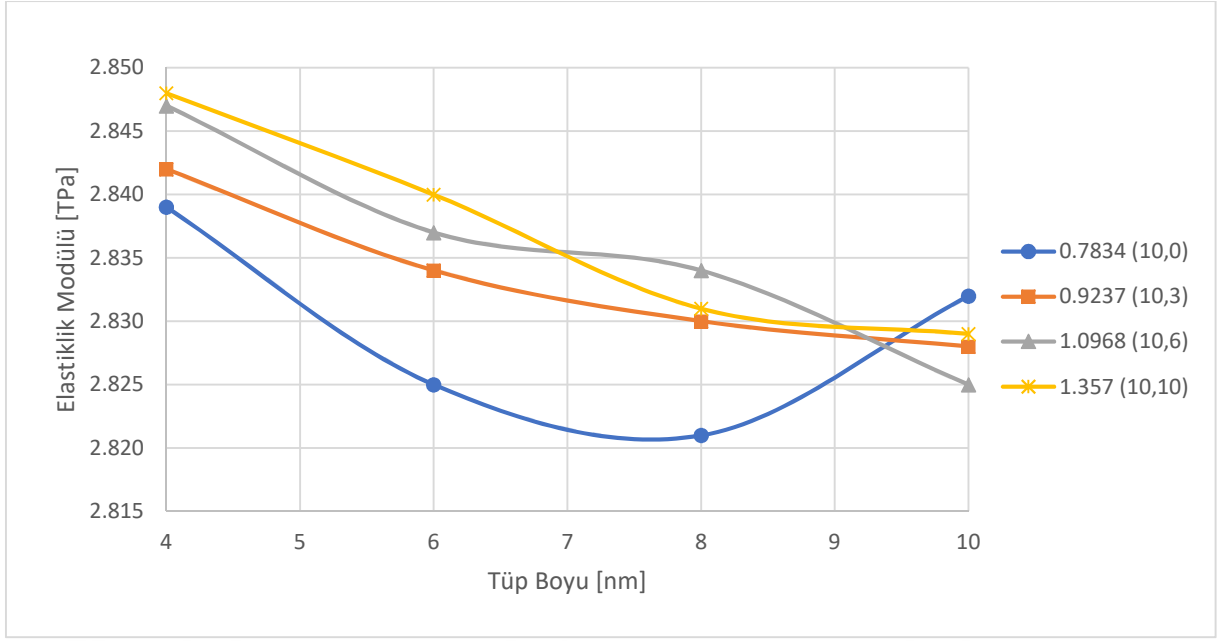


Şekil 111. Koltuk (n,n) tip nanotüpler için tüp boyu- elastiklik modülü grafiği

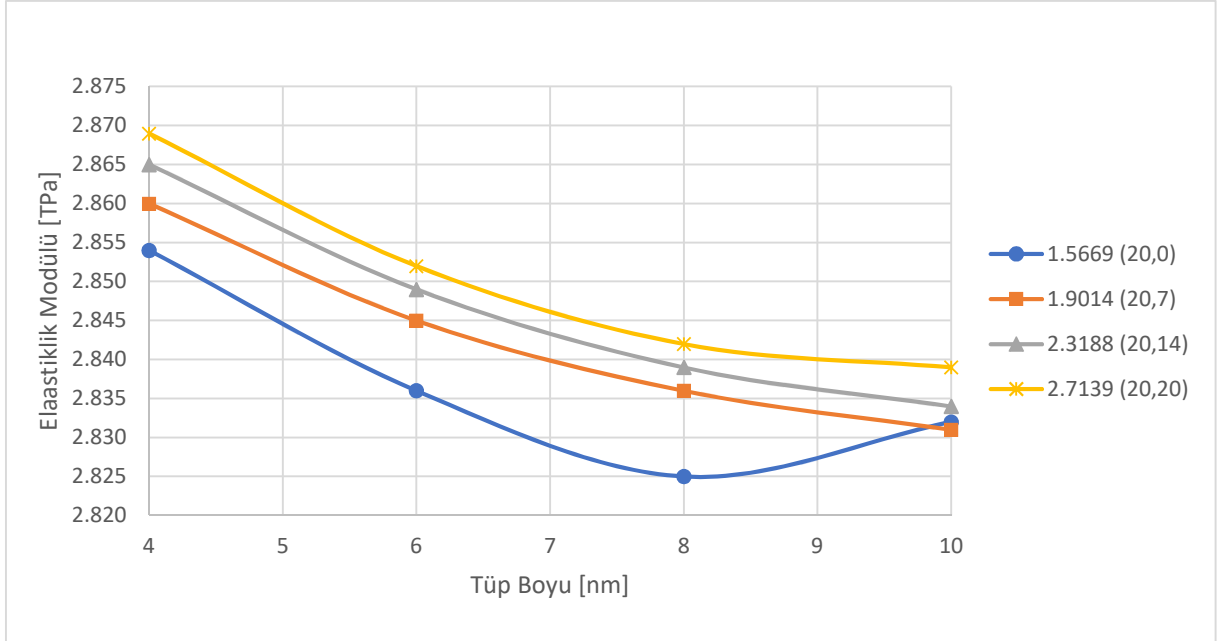
Her grup için Tüp Boyu- Elastiklik Modülü grafiği oluşturulurken kiraliteye bağlı olan tüp çapı değerleri de incelenmiştir. Şekil 113'te 1.GRUP için Tüp Boyu- Elastiklik Modülü grafiği verilmiştir. Nanotüp kiralitesi (10,0) olduğunda tüp çapı 0,7834 nm 'dir. Bu tüp çapı değerinde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değeri başlangıçta azalmış daha sonra artmıştır. Kiral tip nanotüpler olan (10,3) tüpünün çapı 0,9237 nm ve (10,6) tüpünün çapı 1,0968 nm'dir ve bu tüplerde genel eğilim tüp boyu uzadıkça elastiklik modülünde azalma yönündedir. (10,10) nanotüğü için ise tüp çapı 1,357 nm'dir ve belirli bir eğilim olmaksızın 4 nm tüp boyundan 6 nm 'ye geçerken azalmış, 6 nm 'den 8 nm 'ye geçerken artmış, 8 nm'den 10 nm'ye geçerken ise yeniden azalmıştır.

Şekil 114'te 2. GRUP için Tüp Boyu- Elastiklik Modülü Grafiği verilmiştir. Burada (20,0) için tüp çapı 1,5669 nm, (20,7) için 1,9014 nm, (20,14) için 2,3188 nm, (20,20) için ise 2,1739 nm'dir. Bu grafikte genel olarak Tüp boyu uzadıkça Elastiklik Modülü değeri azalma eğilimindedir ancak 1,5669 nm tüpünde durum biraz farklıdır. Bu tüpte tüp boyundaki artışla elastiklik modülü değeri başlarda azalma eğilimindeyken daha sonra artış yönündedir ve diğer tüplerden gittikçe uzaklaşmaktadır.

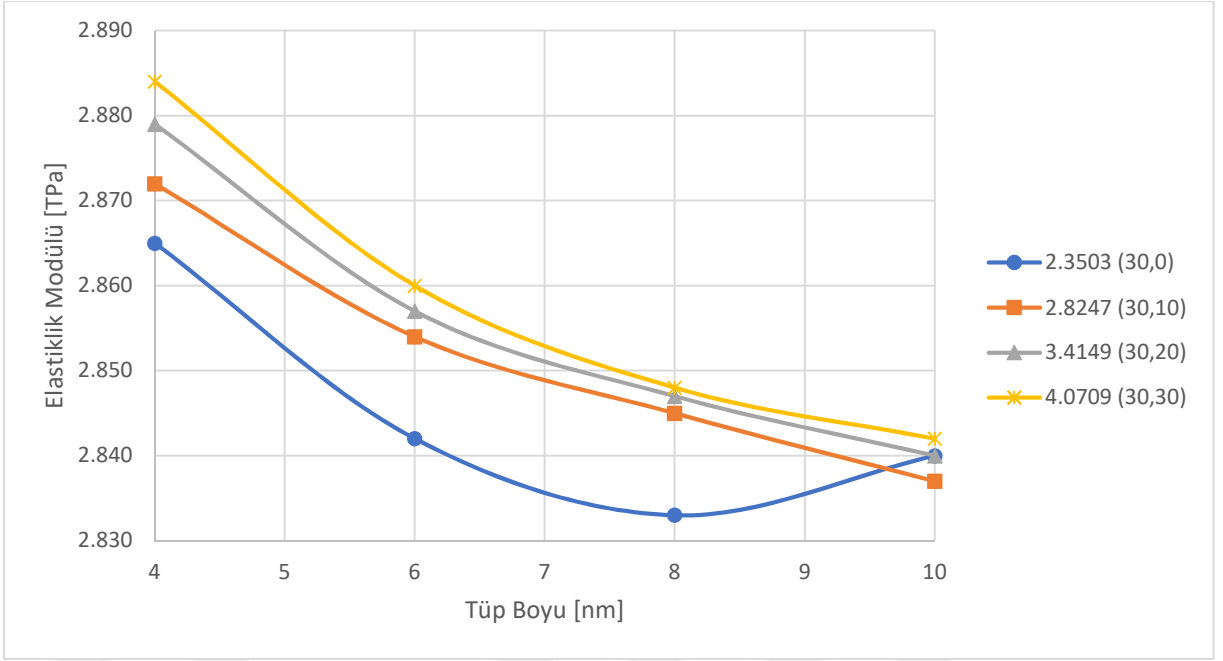
Tüp Boyu- Elastiklik Modülü arasındaki ilişki 3.GRUP için Şekil 115'te , 4. GRUP için Şekil 116'da , 5. GRUP için ise Şekil 117'de verilen grafiklere göre yorumlanacaktır. Şekil 115-117'te verilen grafiklerde (30,0) için tüp çapı 2,3503 nm, (30,10) için 2,8247nm, (30,20) için 3,4149 nm, (30,30) için 4,0709nm'dir. (40,0) için tüp çapı 3,1338 nm , (40,13) için 3,7482 nm, (40,26) için 4,5114 nm ve (40,40) için 5,4278 nm (50,0) için 3,9172 nm, (50,17) için 4,726nm, (50,34) için 5,7336 nm, (50,50) için ise tüp çapı 6,7868 nm'dir. Bu üç grafikte de tıpkı 2. GRUP için olduğu gibi genel eğilim tüp boyu uzadıkça Elastiklik modülünde azalma yönündedir. Buna rağmen (30,0), (40,0) ve (50,0) tüpleri için tüp boyundaki artışla elastiklik modülü değeri başlarda azalma eğilimindeyken daha sonra artış göstermiştir ve diğer tüplerden gittikçe uzaklaşmaktadır.



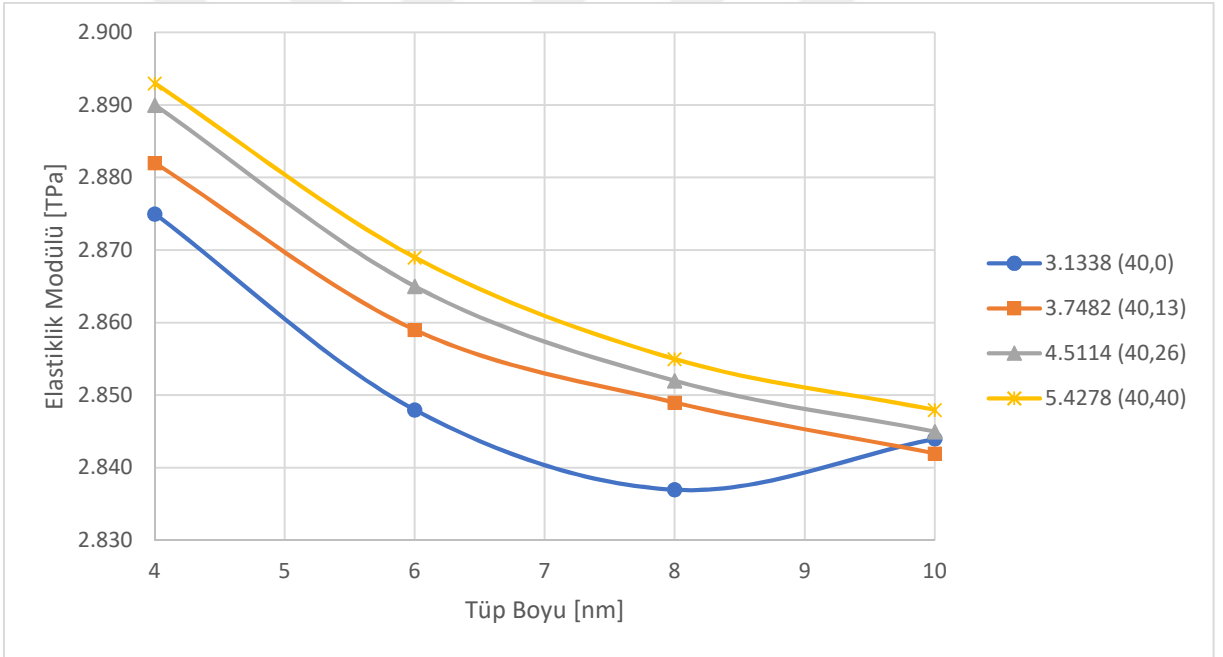
Şekil 112. 1. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği



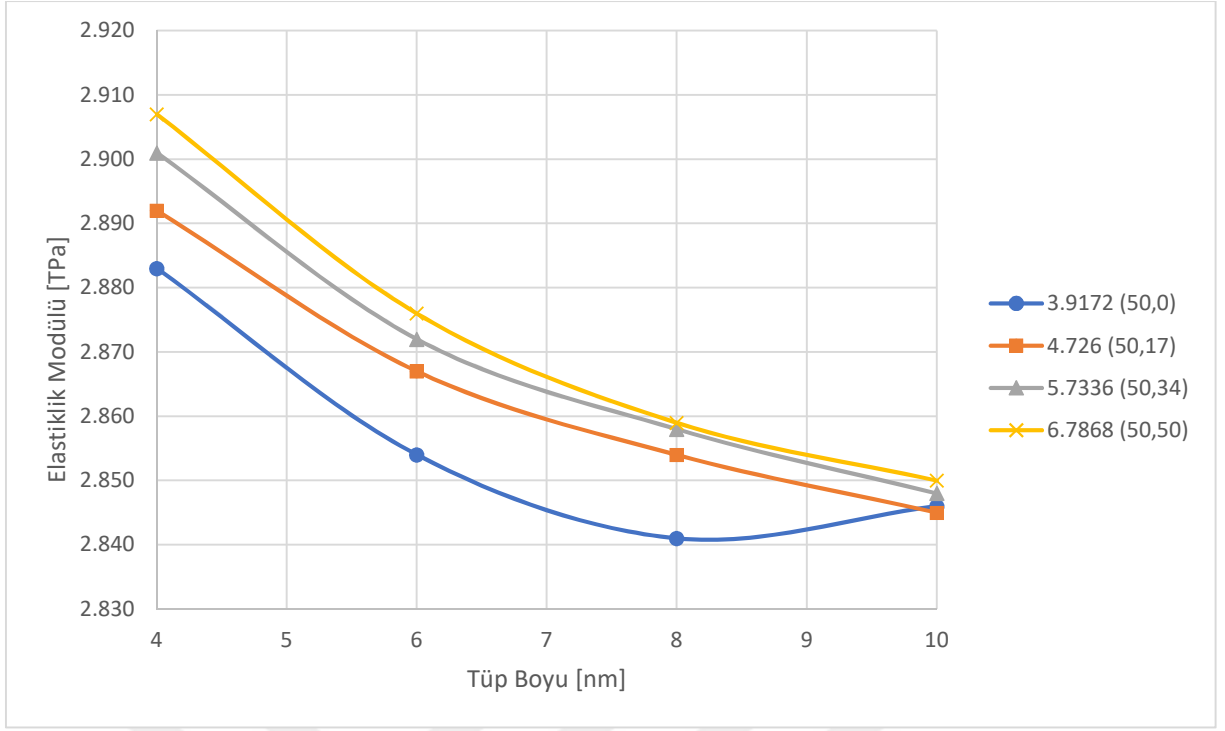
Şekil 113. 2. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği



Şekil 114. 3. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği



Şekil 115. 4. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği



Şekil 116. 5. GRUP tüp çapı değerlerine bağlı olarak tüp boyu- elastiklik modülü grafiği

Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Çapındaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi

Tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisini gözlemlemek için tüp boyu değerleri 10, 8, 6 ve 4 nm olarak belirlendi ve sabit tutuldu. Başlangıçta her grup için tüp çapı değerleri grubun en büyük çap değerine bölünerek normalize edildi (Tablo 19 - 23) ve Şekil 118-121’de verilen grafikler oluşturuldu. L=10 nm tüp boyunda tüp çapının elastiklik modülüne etkisini veren Şekil 118’deki grafik incelendiğinde artan tüp çapıyla birlikte elastiklik modülü değerleri başlangıçta azalmış daha sonra artmıştır. Diğer tüp boylarında ise sürekli bir artış gözlemlenmiştir. Yalnızca L=8 nm tüp boyunda 1. Grup eğrisi (Şekil 119) bu eğilimin dışında kalmıştır.

Tablo 18. 1.GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

Grup No	Tüp Adı	Tüp Çapı	Normalize Edilmiş Tüp Çapı	Tüp Boyu	Elastiklik Modülü
1. GRUP	111	0,7834	0,5773029	10	2,8323
	112	0,7834	0,5773029	8	2,8203
	113	0,7834	0,5773029	6	2,8251
	114	0,7834	0,5773029	4	2,8394
	121	0,9237	0,6806927	10	2,8278
	122	0,9237	0,6806927	8	2,8298
	123	0,9237	0,6806927	6	2,8339
	124	0,9237	0,6806927	4	2,8420
	131	1,0968	0,8082535	10	2,8253
	132	1,0968	0,8082535	8	2,8339
	133	1,0968	0,8082535	6	2,8373
	134	1,0968	0,8082535	4	2,8475
	141	1,357	1	10	2,8286
	142	1,357	1	8	2,8314
	143	1,357	1	6	2,8397
	144	1,357	1	4	2,8479

Tablo 19. 2. GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

Grup No	Tüp Adı	Tüp Çapı	Normalize Edilmiş Tüp Çapı	Tüp Boyu	Elastiklik Modülü
2. GRUP	211	1,5669	0,577361	10	2,8321
	212	1,5669	0,577361	8	2,8249
	213	1,5669	0,577361	6	2,8357
	214	1,5669	0,577361	4	2,8536
	221	1,9014	0,7006154	10	2,8312
	222	1,9014	0,7006154	8	2,8361
	223	1,9014	0,7006154	6	2,8450
	224	1,9014	0,7006154	4	2,8597
	231	2,3188	0,8544162	10	2,8343
	232	2,3188	0,8544162	8	2,8391
	233	2,3188	0,8544162	6	2,8488
	234	2,3188	0,8544162	4	2,8650
	241	2,7139	1	10	2,8391
	242	2,7139	1	8	2,8425
	243	2,7139	1	6	2,8522
	244	2,7139	1	4	2,8687

Tablo 20. 3. GRUP için normalize edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

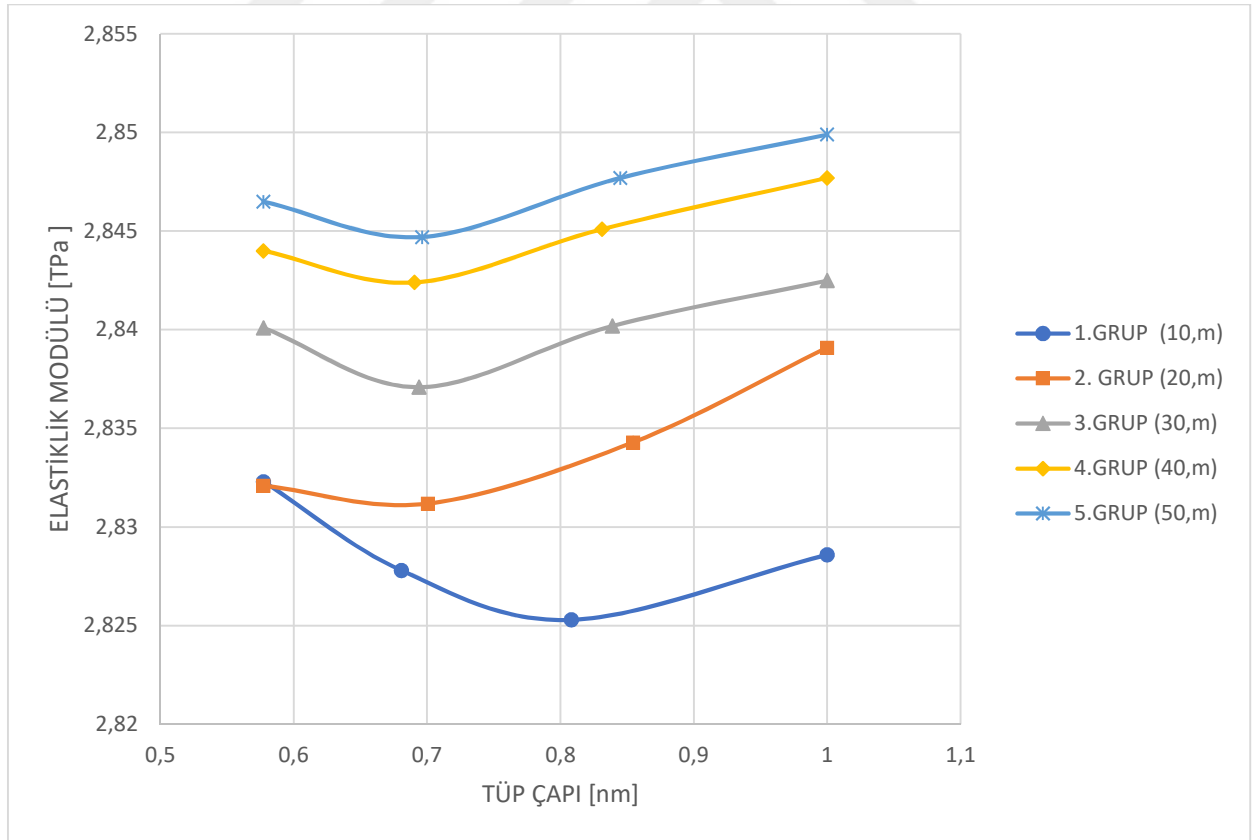
Grup No	Tüp Adı	Tüp Çapı	Normalize Edilmiş Tüp Çapı	Tüp Boyu	Elastiklik Modülü
3. GRUP	311	2,3503	0,5773416	10	2,8401
	312	2,3503	0,5773416	8	2,8330
	313	2,3503	0,5773416	6	2,8417
	314	2,3503	0,5773416	4	2,8648
	321	2,8247	0,693876	10	2,8371
	322	2,8247	0,693876	8	2,8450
	323	2,8247	0,693876	6	2,8537
	324	2,8247	0,693876	4	2,8716
	331	3,4149	0,8388563	10	2,8402
	332	3,4149	0,8388563	8	2,8468
	333	3,4149	0,8388563	6	2,8572
	334	3,4149	0,8388563	4	2,8786
	341	4,0709	1	10	2,8425
	342	4,0709	1	8	2,8480
	343	4,0709	1	6	2,8604
	344	4,0709	1	4	2,8839

Tablo 21. 4. GRUP için edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

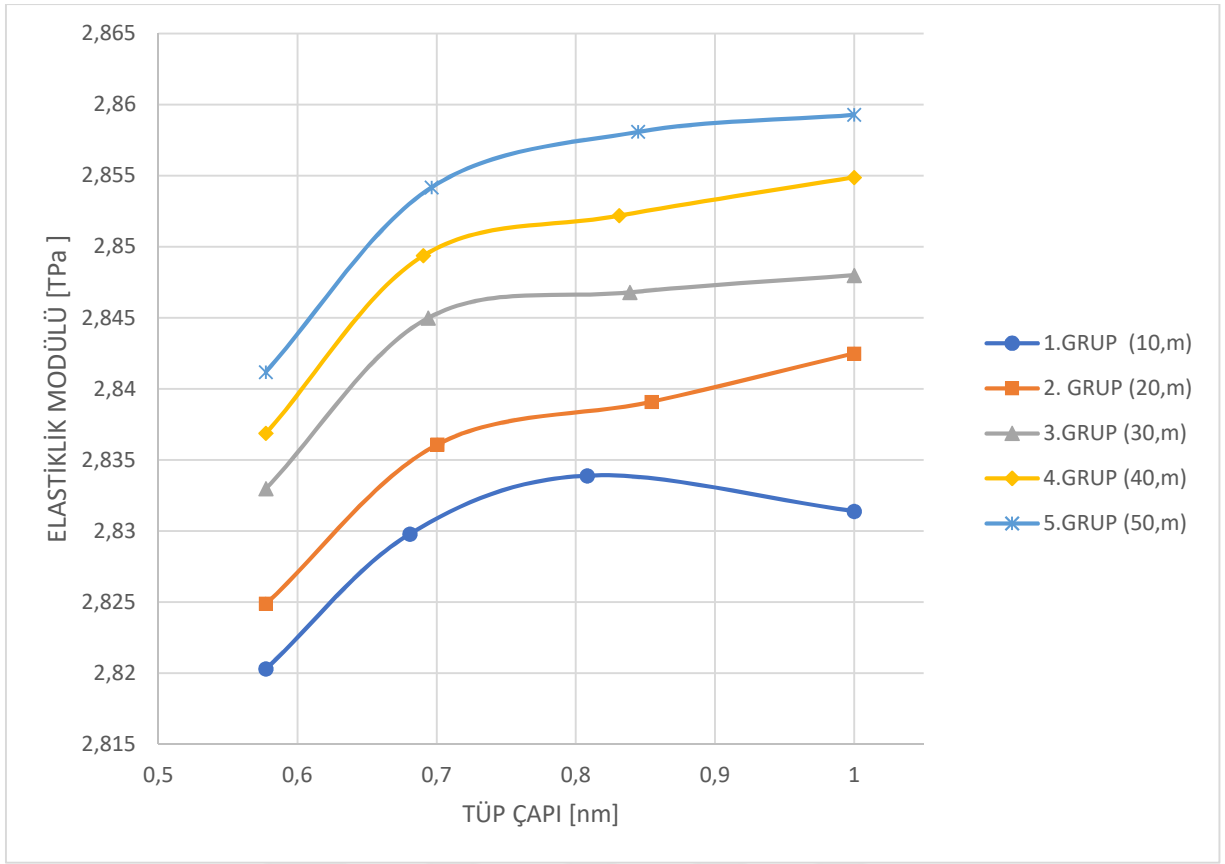
Grup No	Tüp Adı	Tüp Çapı	Normalize Edilmiş Tüp Çapı	Tüp Boyu	Elastiklik Modülü
4. GRUP	411	3,1338	0,577361	10	2,8440
	412	3,1338	0,577361	8	2,8369
	413	3,1338	0,577361	6	2,8482
	414	3,1338	0,577361	4	2,8751
	421	3,7482	0,690556	10	2,8424
	422	3,7482	0,690556	8	2,8494
	423	3,7482	0,690556	6	2,8594
	424	3,7482	0,690556	4	2,8824
	431	4,5114	0,8311655	10	2,8451
	432	4,5114	0,8311655	8	2,8522
	433	4,5114	0,8311655	6	2,8650
	434	4,5114	0,8311655	4	2,8903
	441	5,4278	1	10	2,8477
	442	5,4278	1	8	2,8549
	443	5,4278	1	6	2,8698
	444	5,4278	1	4	2,8963

Tablo 22. 5. GRUP için edilmiş tüp çapı değerleri ve karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

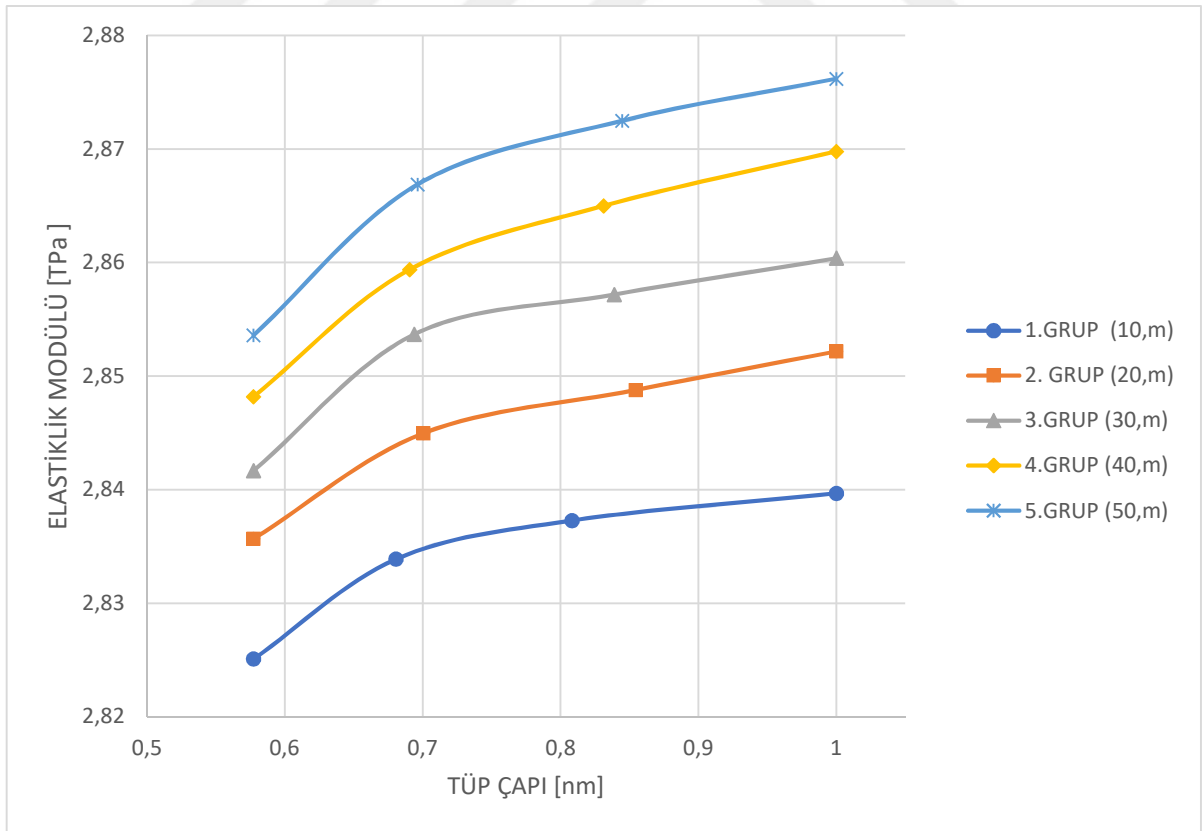
Grup No	Tüp Adı	Tüp Çapı	Normalize Edilmiş Tüp Çapı	Tüp Boyu	Elastiklik Modülü
5. GRUP	511	3,9172	0,5771792	10	2,8465
	512	3,9172	0,5771792	8	2,8412
	513	3,9172	0,5771792	6	2,8536
	514	3,9172	0,5771792	4	2,8833
	521	4,726	0,6963517	10	2,8447
	522	4,726	0,6963517	8	2,8542
	523	4,726	0,6963517	6	2,8669
	524	4,726	0,6963517	4	2,8922
	531	5,7336	0,8448164	10	2,8477
	532	5,7336	0,8448164	8	2,8581
	533	5,7336	0,8448164	6	2,8725
	534	5,7336	0,8448164	4	2,9012
	541	6,7868	1	10	2,8499
	542	6,7868	1	8	2,8593
	543	6,7868	1	6	2,8762
	544	6,7868	1	4	2,9068



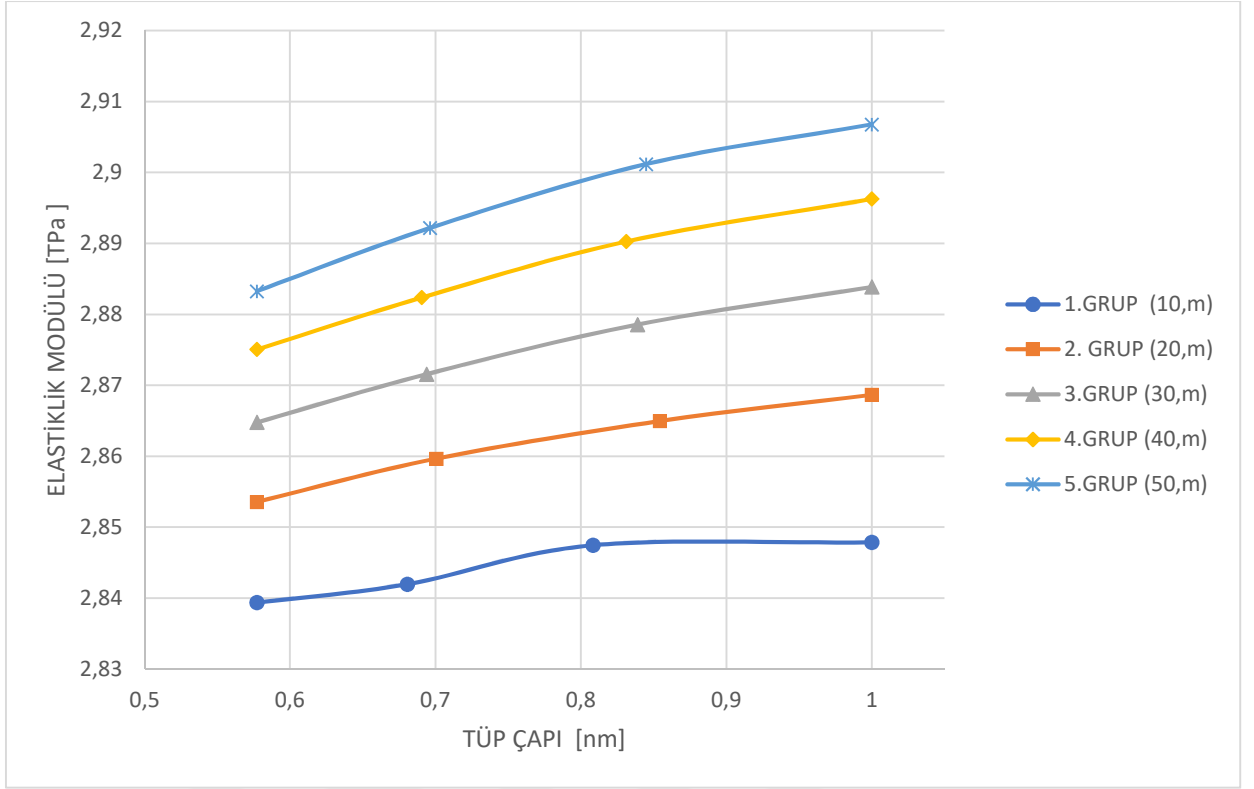
Şekil 117. L=10 nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi



Şekil 118. L=8 nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi



Şekil 119. L=6 nm tüp boyunda tüp çapı- elastiklik modülü değişimi



Şekil 120. L=4 nm Tüp Boyunda Tüp Çapı- Elastiklik Modülü Değişimi

Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Analiz Sonunda Elde Edilen Veriler

Modeller oluşturulup yüklemeler yapıldıktan sonra Tablo 24-25'te verilen bilgiler değerlendirilmek üzere;

1. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüpler için tüp boyundaki uzamanın elastiklik modülüne etkisi (Şekil 122),
2. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüpler için tüp boyundaki uzamanın elastiklik modülüne etkisi (Şekil 123),
3. Farklı boylarda zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüpler için iç tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi (Şekil 124-127), incelenmiştir.

Tablo 24'teki veriler incelendiğinde aynı kiraliteye sahip Zikzak tüplerin tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri başta azalmakta daha sonra artmaktadır ancak Tablo 25'teki veriler incelendiğinde koltuk nanotüpler için aynı kiraliteye sahip tüplerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri azalmaktadır. İç tüp veya dış tüp fark etmeksizin tüp çapına göre değerlendirme yapıldığında ise aynı tüp boyuna sahip ancak farklı kiralitede olan tüplerin tüp çapı arttıkça elastiklik modülü değerlerinde artış gözlemlenmiştir.

Tablo 23. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp boyu, iç tüp çapı, dış tüp çapı ve elastiklik modülü değerleri

KNT TİPİ	GRUPLANDIRMA	İSİMLENDİRME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOY U (nm)	İÇ TÜP ÇAPI (nm)	DIŞ TÜP ÇAPI (nm)	E (TPa)
ZİKZA K KNT	Z1	Z11	(10,0)	(21,0)	10	0,7834	1,6452	4,0016
		Z12	(10,0)	(21,0)	8	0,7834	1,6452	4,0821
		Z13	(10,0)	(21,0)	6	0,7834	1,6452	4,0694
		Z14	(10,0)	(21,0)	4	0,7834	1,6452	4,2773
	Z2	Z21	(11,0)	(22,0)	10	0,8618	1,7236	4,0019
		Z22	(11,0)	(22,0)	8	0,8618	1,7236	4,0824
		Z23	(11,0)	(22,0)	6	0,8618	1,7236	4,0698
		Z24	(11,0)	(22,0)	4	0,8618	1,7236	4,2784
	Z3	Z31	(12,0)	(23,0)	10	0,9401	1,8019	4,0023
		Z32	(12,0)	(23,0)	8	0,9401	1,8019	4,0788
		Z33	(12,0)	(23,0)	6	0,9401	1,8019	4,0709
		Z34	(12,0)	(23,0)	4	0,9401	1,8019	4,2799
	Z4	Z41	(13,0)	(24,0)	10	1,0185	1,8803	4,0026
		Z42	(13,0)	(24,0)	8	1,0185	1,8803	4,0836
		Z43	(13,0)	(24,0)	6	1,0185	1,8803	4,0715
		Z44	(13,0)	(24,0)	4	1,0185	1,8803	4,2812
	Z5	Z51	(14,0)	(25,0)	10	1,0968	1,9586	4,0031
		Z52	(14,0)	(25,0)	8	1,0968	1,9586	4,0843
		Z53	(14,0)	(25,0)	6	1,0968	1,9586	4,0724
		Z54	(14,0)	(25,0)	4	1,0968	1,9586	4,2826

Tablo 24. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp boyu, iç tüp çapı, dış tüp çapı ve elastiklik modülü değerleri

KNT TİPİ	GRUPLANDIRMA	İSİMLENDİRME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOYU (nm)	İÇ TÜP ÇAPI (nm)	DIŞ TÜP ÇAPI (nm)	E (TPa)
KOLTUK KNT	K1	K11	(10,10)	(16,16)	10	1,357	2,1711	4,1115
		K12	(10,10)	(16,16)	8	1,357	2,1711	4,1039
		K13	(10,10)	(16,16)	6	1,357	2,1711	4,1769
		K14	(10,10)	(16,16)	4	1,357	2,1711	4,1939
	K2	K21	(11,11)	(17,17)	10	1,4927	2,3068	4,1123
		K22	(11,11)	(17,17)	8	1,4927	2,3068	4,1048
		K23	(11,11)	(17,17)	6	1,4927	2,3068	4,1782
		K24	(11,11)	(17,17)	4	1,4927	2,3068	4,1961
	K3	K31	(12,12)	(18,18)	10	1,6283	2,4425	4,1130
		K32	(12,12)	(18,18)	8	1,6283	2,4425	4,1056
		K33	(12,12)	(18,18)	6	1,6283	2,4425	4,1794
		K34	(12,12)	(18,18)	4	1,6283	2,4425	4,1981
	K4	K41	(13,13)	(19,19)	10	1,764	2,5782	4,1138
		K42	(13,13)	(19,19)	8	1,764	2,5782	4,1066
		K43	(13,13)	(19,19)	6	1,764	2,5782	4,1809
		K44	(13,13)	(19,19)	4	1,764	2,5782	4,2004
	K5	K51	(14,14)	(20,20)	10	1,8997	2,7139	4,1145
		K52	(14,14)	(20,20)	8	1,8997	2,7139	4,1075
		K53	(14,14)	(20,20)	6	1,8997	2,7139	4,1822
		K54	(14,14)	(20,20)	4	1,8997	2,7139	4,2024

Tablo 25. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp düğüm sayısı, dış tüp düğüm sayısı ve toplam düğüm sayısı değerleri

KNT TİPİ	GRUPLANDIRMA	İSİMLENDİRME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOYU	İÇ TÜP DÜĞÜM SAYISI	DIŞ TÜP DÜĞÜM SAYISI	TOPLAM DÜĞÜM SAYISI
ZİKZAK KNT	Z1	Z11	(10,0)	(21,0)	10	940	1974	2914
		Z12	(10,0)	(21,0)	8	740	1550	2294
		Z13	(10,0)	(21,0)	6	560	1176	1736
		Z14	(10,0)	(21,0)	4	360	756	1116
	Z2	Z21	(11,0)	(22,0)	10	1034	2068	3102
		Z22	(11,0)	(22,0)	8	814	1628	2442
		Z23	(11,0)	(22,0)	6	616	1232	1848
		Z24	(11,0)	(22,0)	4	396	792	1188
	Z3	Z31	(12,0)	(23,0)	10	1128	2162	3290
		Z32	(12,0)	(23,0)	8	888	1701	2589
		Z33	(12,0)	(23,0)	6	672	1288	1960
		Z34	(12,0)	(23,0)	4	432	828	1260
	Z4	Z41	(13,0)	(24,0)	10	1222	2256	3478
		Z42	(13,0)	(24,0)	8	962	1776	2738
		Z43	(13,0)	(24,0)	6	728	1334	2072
		Z44	(13,0)	(24,0)	4	468	864	1332
	Z5	Z51	(14,0)	(25,0)	10	1316	2350	3666
		Z52	(14,0)	(25,0)	8	1036	1850	2886
		Z53	(14,0)	(25,0)	6	784	1400	2184
		Z54	(14,0)	(25,0)	4	504	900	1404

Tablo 26. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp kiralitesi, dış tüp kiralitesi, tüp düğüm sayısı, dış tüp düğüm sayısı ve toplam düğüm sayısı değerleri

KNT TİPİ	GRUPLANDI RMA	İSİMLENDİR ME	İÇ TÜP	DIŞ TÜP	TÜP BOYU	İÇ TÜP DÜĞÜ M SAYISI	DIŞ TÜP DÜĞÜM SAYISI	TOPLA M DÜĞÜM SAYISI
KOLTUK KNT	K1	K11	(10,10)	(16,16)	10	1640	2624	4264
		K12	(10,10)	(16,16)	8	1320	2112	3432
		K13	(10,10)	(16,16)	6	980	1568	2548
		K14	(10,10)	(16,16)	4	660	1056	1716
	K2	K21	(11,11)	(17,17)	10	1804	2788	4592
		K22	(11,11)	(17,17)	8	1452	2244	3696
		K23	(11,11)	(17,17)	6	1078	1666	2744
		K24	(11,11)	(17,17)	4	726	1122	1848
	K3	K31	(12,12)	(18,18)	10	1968	2952	4920
		K32	(12,12)	(18,18)	8	1584	2376	3960
		K33	(12,12)	(18,18)	6	1176	1764	2940
		K34	(12,12)	(18,18)	4	792	1188	1980
	K4	K41	(13,13)	(19,19)	10	2132	3116	5248
		K42	(13,13)	(19,19)	8	1716	2508	4224
		K43	(13,13)	(19,19)	6	1274	1862	3136
		K44	(13,13)	(19,19)	4	858	1254	2112
	K5	K51	(14,14)	(20,20)	10	2292	3280	5576
		K52	(14,14)	(20,20)	8	1848	2640	4488
		K53	(14,14)	(20,20)	6	1372	1960	3332
		K54	(14,14)	(20,20)	4	924	1320	2244

Modeller oluşturulurken belirlenen Deplasman (ΔL), Tüp Uzunlukları(L) ve Tüp Çaplarına(d) bağlı olan Alan(A) bilgileri Tablo 28-29’da verilmiştir. ANSYS APDL programında yapılan çözümlerden elde edilen reaksiyon kuvveti çıktıları ve tüm bu bilgilerden elde edilen Elastiklik Modülü (E) değerleri de yine tablolarda yer almaktadır. Tablolardaki değerlerden Elastiklik Modülleri, Hooke yasasından yararlanılarak hesaplanmıştır.

$$\sigma = E\varepsilon \quad (\text{Hooke Yasası})$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (\text{Boyca \% değişim})$$

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (\text{Gerilme})$$

$$A_{dış} = \pi d_{dış} \frac{t}{2}$$

$$A_{iç} = \pi d_{iç} \frac{t}{2}$$

$$d_o = \frac{d_{iç} + d_{dış}}{2}$$

$$\Delta d = \frac{d_{dış} - d_{iç}}{2}$$

$$A_{orta} = \pi d_o \Delta d$$

$$A = A_{iç} + A_{dış} + A_{orta} \quad (\text{Alan})$$

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{F}{A}}{\frac{\Delta L}{L}} \quad (\text{Elastiklik Modülü})$$

Tablo 27. Zizak tip modellerin iç tüp çapı, dış tüp çapı, kesit alanı, tüp boyu, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

TÜP KODU	d_iç(nm)	d_dış(nm)	A(nm ²)	L(nm)	ΔL	F(Nn)	E(TPa)
Z11	0,7834	1,6452	2,1041	10	0,1	0,11768E-006	4,0016
Z12	0,7834	1,6452	2,1041	8	0,1	0,15006E-006	4,0821
Z13	0,7834	1,6452	2,1041	6	0,1	0,19946E-006	4,0694
Z14	0,7834	1,6452	2,1041	4	0,1	0,31447E-006	4,2773
Z21	0,8618	1,7236	2,2102	10	0,1	0,12529E-006	4,0019
Z22	0,8618	1,7236	2,2102	8	0,1	0,15976E-006	4,0824
Z23	0,8618	1,7236	2,2102	6	0,1	0,21236E-006	4,0698
Z24	0,8618	1,7236	2,2102	4	0,1	0,33486E-006	4,2784
Z31	0,9401	1,8019	2,3162	10	0,1	0,13289E-006	4,0023
Z32	0,9401	1,8019	2,3162	8	0,1	0,16929E-006	4,0788
Z33	0,9401	1,8019	2,3162	6	0,1	0,22528E-006	4,0709
Z34	0,9401	1,8019	2,3162	4	0,1	0,35527E-006	4,2799
Z41	1,0185	1,8803	2,4223	10	0,1	0,14050E-006	4,0026
Z42	1,0185	1,8803	2,4223	8	0,1	0,17918E-006	4,0836
Z43	1,0185	1,8803	2,4223	6	0,1	0,23820E-006	4,0715
Z44	1,0185	1,8803	2,4223	4	0,1	0,37570E-006	4,2812
Z51	1,0968	1,9586	2,5283	10	0,1	0,14811E-006	4,0031
Z52	1,0968	1,9586	2,5283	8	0,1	0,18889E-006	4,0843
Z53	1,0968	1,9586	2,5283	6	0,1	0,25112E-006	4,0724
Z54	1,0968	1,9586	2,5283	4	0,1	0,39613E-006	4,2826

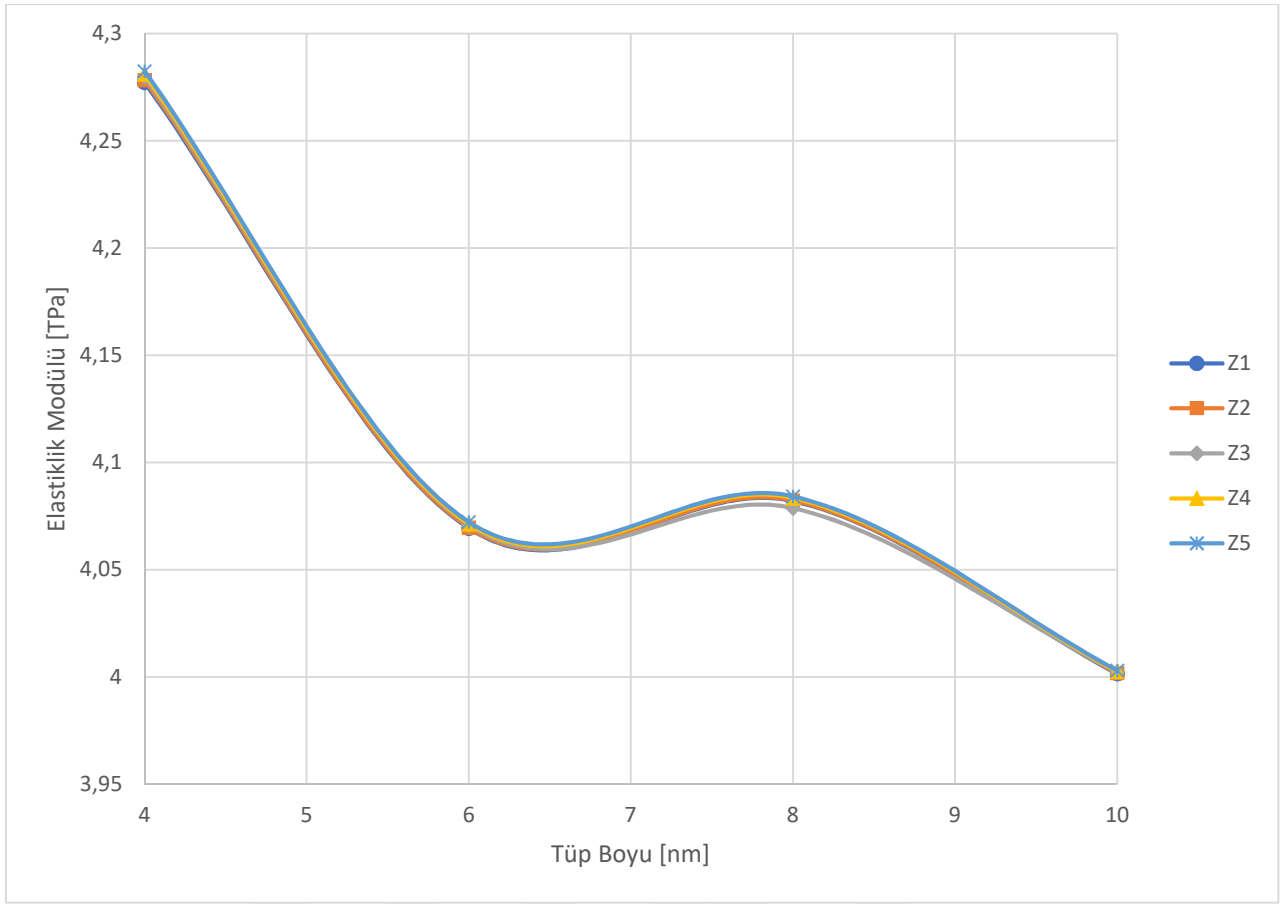
Tablo 28. Koltuk tip modellerin iç tüp çapı, dış tüp çapı, kesit alanı, tüp boyu, deplasmanı, uygulanan reaksiyon kuvveti ve bu değerlerden elde edilen elastiklik modülü değerleri

TÜP KODU	d_iç(nm)	d_dış(nm)	A(nm ²)	L(nm)	ΔL	F(Nn)	E(TPa)
K11	1,357	2,1711	2,6906	10	0,1	0,17022E-006	4,1115
K12	1,357	2,1711	2,6906	8	0,1	0,21238E-006	4,1039
K13	1,357	2,1711	2,6906	6	0,1	0,28821E-006	4,1769
K14	1,357	2,1711	2,6906	4	0,1	0,43408E-006	4,1939
K21	1,4927	2,3068	2,8642	10	0,1	0,18335E-006	4,1123
K22	1,4927	2,3068	2,8642	8	0,1	0,22877E-006	4,1048
K23	1,4927	2,3068	2,8642	6	0,1	0,31048E-006	4,1782
K24	1,4927	2,3068	2,8642	4	0,1	0,46772E-006	4,1961
K31	1,6283	2,4425	3,0380	10	0,1	0,19649E-006	4,1130
K32	1,6283	2,4425	3,0380	8	0,1	0,24517E-006	4,1056
K33	1,6283	2,4425	3,0380	6	0,1	0,33277E-006	4,1794
K34	1,6283	2,4425	3,0380	4	0,1	0,50139E-006	4,1981
K41	1,764	2,5782	3,2116	10	0,1	0,20963E-006	4,1138
K42	1,764	2,5782	3,2116	8	0,1	0,26158E-006	4,1066
K43	1,764	2,5782	3,2116	6	0,1	0,35508E-006	4,1809
K44	1,764	2,5782	3,2116	4	0,1	0,53510E-006	4,2004
K51	1,8997	2,7139	3,3851	10	0,1	0,22277E-006	4,1145
K52	1,8997	2,7139	3,3851	8	0,1	0,27799E-006	4,1075
K53	1,8997	2,7139	3,3851	6	0,1	0,37739E-006	4,1822
K54	1,8997	2,7139	3,3851	4	0,1	0,56882E-006	4,2024

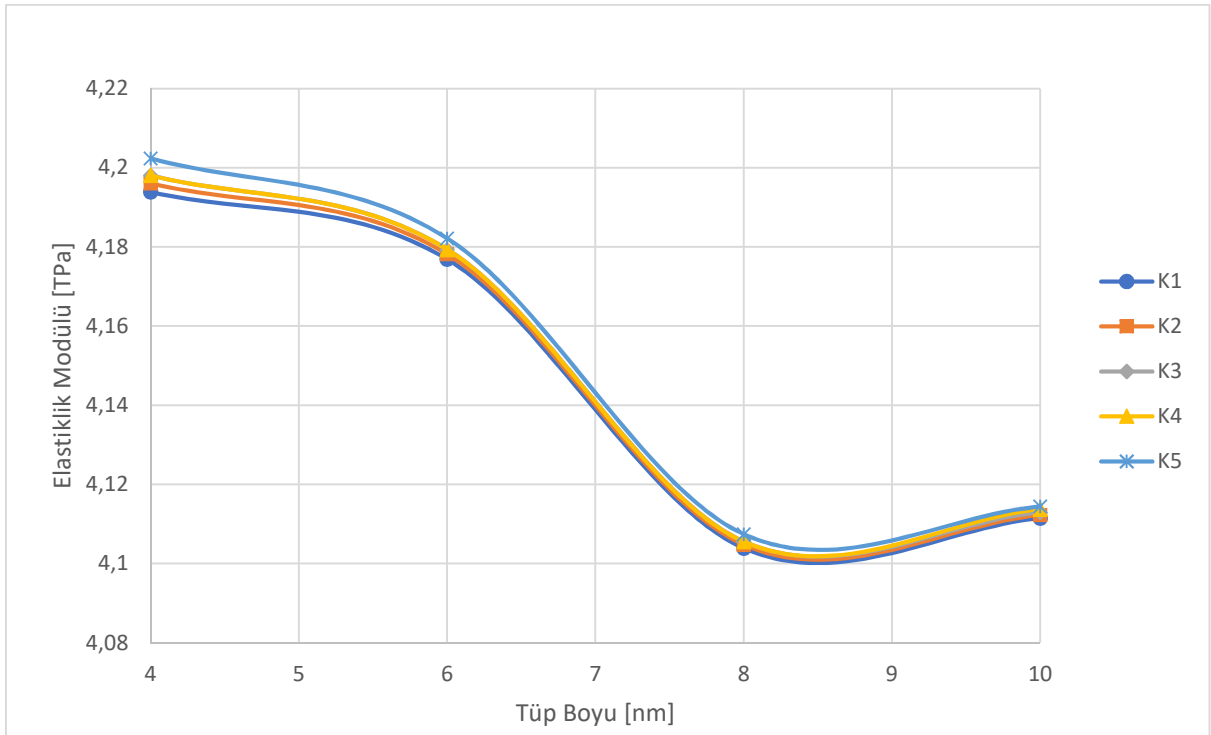
Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Boyundaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi

Hesaplanan elastiklik modülü değerlerinden yararlanılarak Tüp Boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisini gözlemlemek için Şekil 122-123'te verilen grafikler elde edildi. Şekil 122'de Zikzak Tip Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Boyundaki Değişimin Elastiklik modülüne etkisi verilmiştir. Z1 grubu (10,0) - (21,0), Z2 grubu (11,0) - (22,0), Z3 grubu (12,0) - (23,0), Z4 grubu (13,0) - (24,0) ve Z5 grubu (14,0) - (25,0) tüplerinden oluşmaktadır. Şekil 122'de verilen grafikte Zikzak tip çift duvarlı KNT'lerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değeri başta azalmış daha sonra nispeten artmış ve yeniden azalmıştır.

K1 grubu (10,10) - (16,16), K2 grubu (11,11) - (17,17), K3 grubu (12,12) - (18,18), K4 grubu (13,13) - (19,19) ve K5 grubu (14,14) - (20,20) tüplerinden oluşmaktadır. Şekil 123'te Koltuk tip çift duvarlı KNT'lerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değeri sürekli azalmış daha sonra nispeten artmıştır. Ayrıca farklı gruplarda tüpleri en kısa boydayken elastiklik modülü değerleri birbirine daha uzak değerler almış tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri birbirine yaklaşmış ve aynı değer etrafında toplanmıştır.



Şekil 121. Zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisi



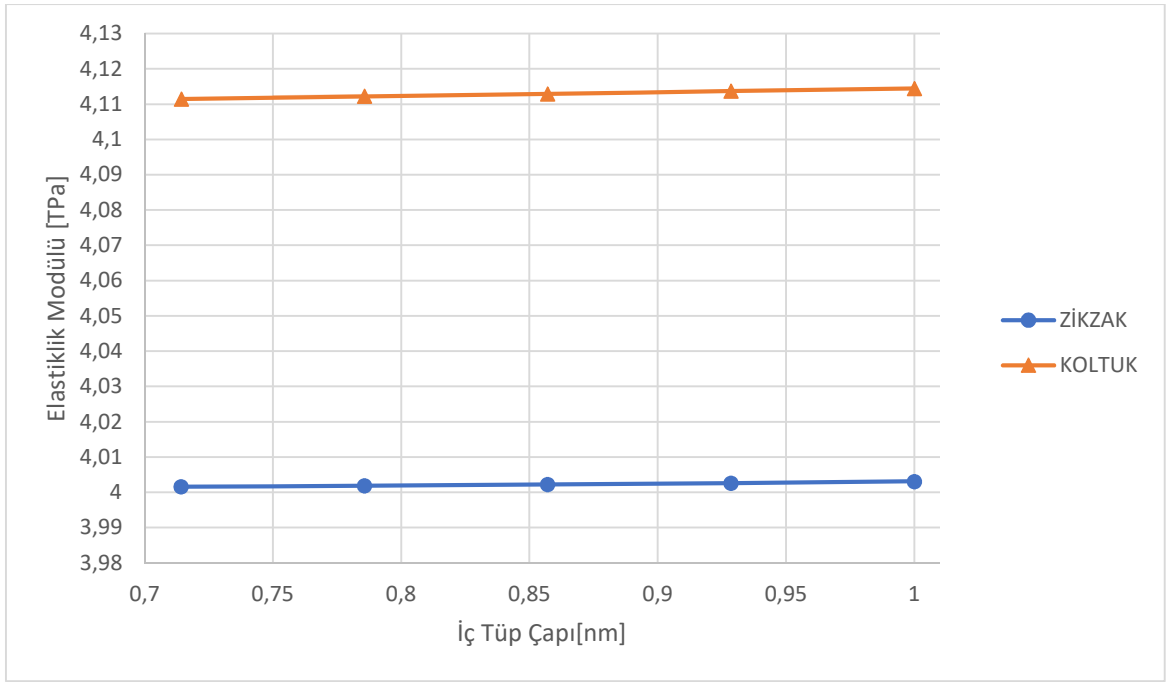
Şekil 122. Koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisi

Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerde Tüp Çapındaki Değişimin Elastiklik Modülüne Etkisi

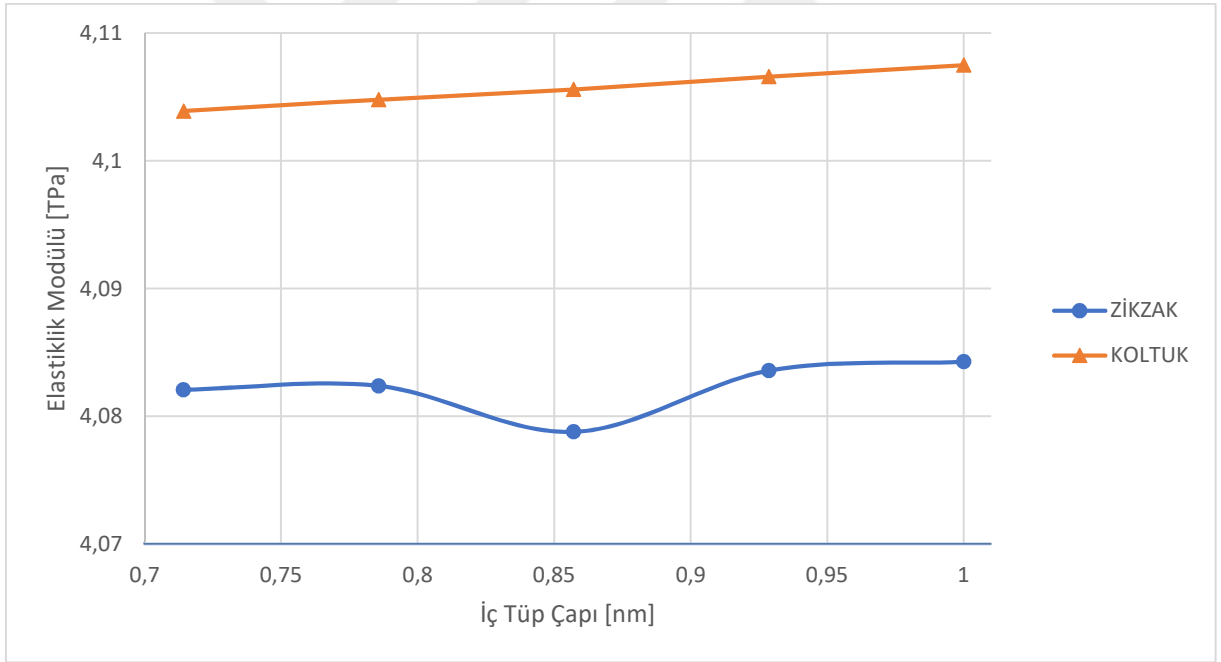
Tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisini gözlemlemek için tüp boyu değerleri 10, 8, 6 ve 4 nm olarak belirlenerek sabit tutuldu. Yatay ekseninde iç tüp çapı değerleri normalize edilerek (Tablo 30) Şekil 124-127’de verilen grafikler oluşturuldu. Oluşturulan grafikler incelendiğinde 10 nm, 8 nm ve 6nm tüp boyunda çift duvarlı zikzak karbon nanotüplerin elastiklik modülü değerlerinin çift duvarlı koltuk karbon nanotüplerin elastiklik modülü değerlerine göre daha düşük olduğu görülmektedir. Ancak 4nm tüp boyunda bu durum tam tersidir yani koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modülü değerleri zikzak tip çift duvarlı karbon nanotüplere göre daha düşüktür. Şekil 124’te verilen $L=10$ nm tüp boyunda her iki tip KNT için elastiklik modülü değerleri iç tüp çapı arttıkça az da olsa artma eğilimindedir. $L=8$ nm için Şekil 125’e bakıldığında koltuk tip KNT’lerde artış daha doğrusalken zikzak tip KNT’lerde bu artış paraboliktir ve önce artmış sonra azalmış ve daha sonra tekrar atmıştır. $L=6$ nm tüp boyu için Şekil 126’da verilen grafiğe göre her iki tip KNT’nin elastiklik modülü değerinde de doğrusal bir artış gözlemlenmiştir. $L=4$ nm tüp boyu için Şekil 127’de verilen grafik incelendiğinde ise yine her iki KNT tipindeki artış doğrusaldır.

Tablo 29. Çift duvarlı knt’lerde iç tüp çapına göre normalize edilmiş iç tüp çapı değerleri ve bunlara karşılık gelen elastiklik modülü değerleri

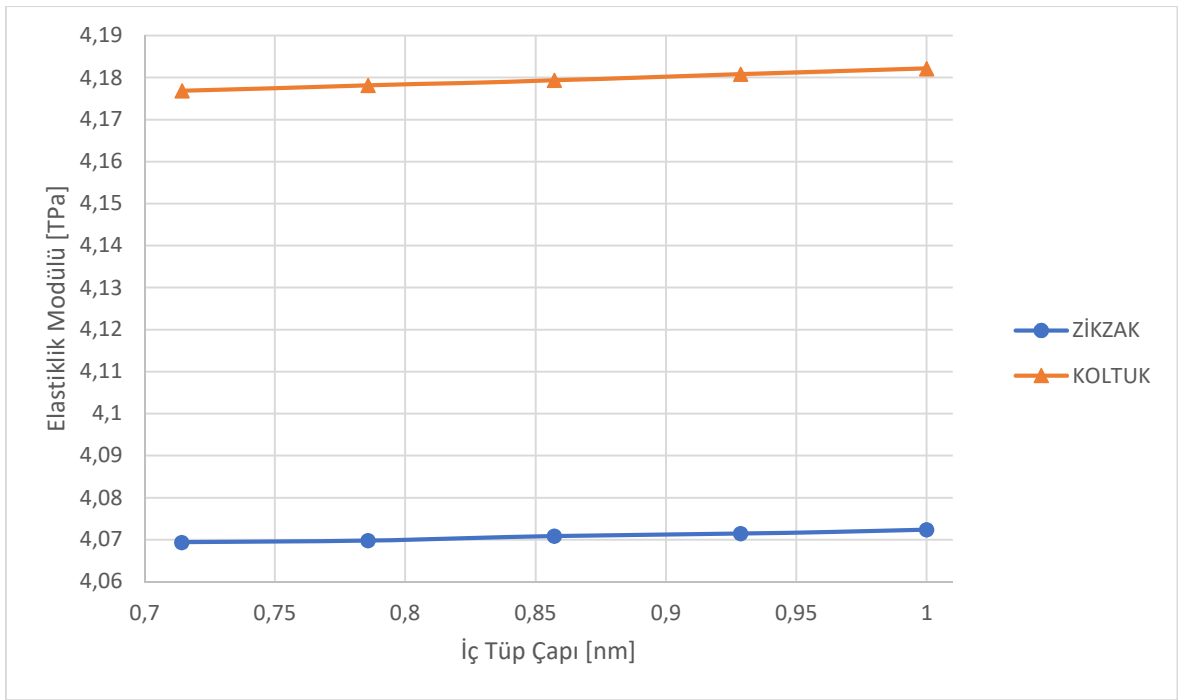
KNT TİPİ	Tüp Kodu	İç Tüp Çapı	Normalize Edilmiş İç Çap	Tüp Boy	Elastiklik Modülü
ZİKZAK	Z11	0,7834	0,71425	10	4,0016
	Z12	0,7834	0,71425	8	4,0821
	Z13	0,7834	0,71425	6	4,0694
	Z14	0,7834	0,71425	4	4,2773
	Z21	0.8618	0,78574	10	4,0019
	Z22	0.8618	0,78574	8	4,0824
	Z23	0.8618	0,78574	6	4,0698
	Z24	0.8618	0,78574	4	4,2784
	Z31	0,9401	0,85712	10	4,0023
	Z32	0,9401	0,85712	8	4,0788
	Z33	0,9401	0,85712	6	4,0709
	Z34	0,9401	0,85712	4	4,2799
	Z41	1,0185	0,92861	10	4,0026
	Z42	1,0185	0,92861	8	4,0836
	Z43	1,0185	0,92861	6	4,0715
	Z44	1,0185	0,92861	4	4,2812
	Z51	1,0968	1	10	4,0031
	Z52	1,0968	1	8	4,0843
	Z53	1,0968	1	6	4,0724
	Z54	1,0968	1	4	4,2826
KOLTUK	K11	1,357	0,71432	10	4,1115
	K12	1,357	0,71432	8	4,1039
	K13	1,357	0,71432	6	4,1769
	K14	1,357	0,71432	4	4,1939
	K21	1,4927	0,78575	10	4,1123
	K22	1,4927	0,78575	8	4,1048
	K23	1,4927	0,78575	6	4,1782
	K24	1,4927	0,78575	4	4,1961
	K31	1,6283	0,85713	10	4,1130
	K32	1,6283	0,85713	8	4,1056
	K33	1,6283	0,85713	6	4,1794
	K34	1,6283	0,85713	4	4,1981
	K41	1,764	0,92856	10	4,1138
	K42	1,764	0,92856	8	4,1066
	K43	1,764	0,92856	6	4,1809
	K44	1,764	0,92856	4	4,2004
	K51	1,8997	1	10	4,1145
	K52	1,8997	1	8	4,1075
	K53	1,8997	1	6	4,1822
	K54	1,8997	1	4	4,2024



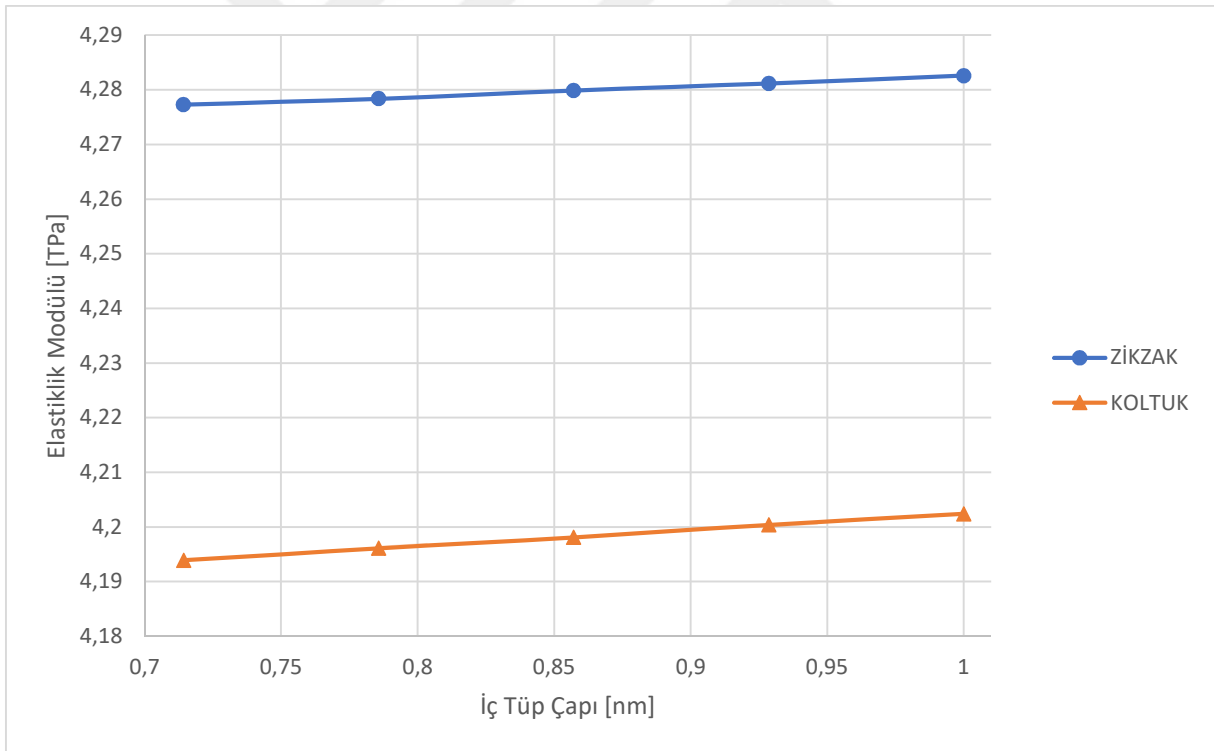
Şekil 123. $L= 10$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi



Şekil 124. $L= 8$ nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi



Şekil 125. L= 6 nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi



Şekil 126. L= 4 nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapındaki değişimin elastiklik modülüne etkisi

SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez kapsamında karbon nanotüplerin farklı yükler altında davranışları sonlu elemanlar yöntemiyle incelenmiştir.

Sonlu elemanlar yöntemi karmaşık problemleri çözmede önemli bir araç olmakla birlikte ANSYS Mechanical APDL gibi sonlu elemanlar yönteminin bilgisayar destekli uygulaması olan programlar sayesinde problem çözme süresi daha kısa olmaktadır.

Bu tezde ilk adımda tek duvarlı karbon nanotüpler kiralitesine bağlı olarak gruplandırılmış, modellenmiş ve ANSYS APDL yardımıyla 0,001 nm'lik deplasman uygulanarak elastiklik modülü değerleri hesaplanmıştır. İkinci adımda ise iki farklı tek duvarlı karbon nanotüp iç içe geçirilerek çift duvarlı karbon nanotüpler elde edilmiş ve 0,1 nm'lik deplasman uygulanarak ANSYS program çıktısı olarak alınan reaksiyon kuvveti yardımıyla elastiklik modülü değeri hesaplanmıştır.

Bu çalışma sonucunda;

- 1) Tek duvarlı zikzak karbon nanotüplerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri parabolik olarak azalmıştır.
- 2) Tek duvarlı koltuk karbon nanotüplerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerinde artış gözlemlenmiş ve bu artışın doğrusal bir değişime yakın olduğu gözlemlenmiştir.
- 3) 1. GRUP Tüp çapı değerlerine bağlı Tüp boyu- Elastiklik modülü ilişkisi incelendiğinde m parametresindeki artışla her tüp boyu için farklı sonuçlar elde edilmiştir. Tüp boyu, 4 nm'den 8 nm'ye doğru uzadıkça tüm tüplerde elastiklik modülü değeri azalmıştır. Ancak 6 nm tüp boyunda en yüksek elastiklik modülü değeri (10,10) kiraliteye sahip tüpteyken 8 nm tüp boyunda (10,3) , 10 nm tüp boyunda yeniden (10,10) kiraliteye sahip karbon nanotüpte görülmüştür. Yani (10,m) kiraliteye sahip tek duvarlı karbon nanotüplerde belirli bir eğilim izlenmemiştir.
- 4) 2. GRUP'ta (20,m) kiraliteye sahip tüpler kullanılmış (20,0) kiraliteden (20,20) kiraliteye doğru gidildikçe her tüp boyunda en yüksek değer (20,20) nanotüpünde gözlemlenmiştir. Tüp boyu 4nm, 6nm ve 8nm için en düşük elastiklik modülü değeri (20,0) olmasına rağmen 10nm tüp boyunda en küçük değer (20,14) kiraliteye sahip tüptedir. Buna ek olarak her tüp boyunda (20,0)'dan (20,20)'e doğru gidildikçe elastiklik modülü değerleri artmıştır.

- 5) 3. GRUP, 4. GRUP ve 5. GRUP verilerinde de aynı durum söz konusudur. Karbon nanotüplerin kiralitesi $m=0$ 'dan $n=m$ 'e doğru gittikçe elastiklik modülü değeri de artmaktadır. $n=m$ olduğunda ise bu durum parabolik bir davranış göstererek önce azalmış daha sonra artmıştır.
- 6) 10 nm tüp boyunda tüp çapındaki değişimin Elastiklik modülüne etkisi incelendiğinde artan tüp çapı ile elastiklik modülü değerleri parabolik bir davranış göstererek başlangıçta arttığı daha sonra azaldığı gözlemlenmiştir.
- 7) 8 nm tüp boyunda artan tüp çapıyla (10,m) kiraliteye sahip karbon nanotüplerde elastiklik modülü başlangıçta parabolik olarak artmış daha sonra azalmıştır. (20,m) , (30,m) , (40,m) , (50,m) tüplerinde ise elastiklik modülü değerleri artan tüp çapıyla birlikte parabolik olarak artmıştır.
- 8) 6 nm tüp boyunda artan tüp çapı ile elastiklik modülü değerleri artmıştır.
- 9) 4 nm tüp boyunda artan tüp çapıyla elastiklik modülü değerleri artmıştır. Bu boyda artış diğer boylara göre daha doğrusal bir artış olmuştur.
- 10) Çift duvarlı zikzak karbon nanotüplerde tüp boyundaki değişimin elastiklik modülüne etkisi incelendiğinde, kullanılan tüm nanotüplerin boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri başlangıçta azalmış daha sonra nispeten artmış ve tekrar azalmıştır. Buna ek olarak aynı tüp boyuna ,farklı kiraliteye sahip çift duvarlı karbon nanotüplerin elastiklik modülü aynı değer etrafında toplanmıştır.
- 11) Çift duvarlı koltuk karbon nanotüplerde tüp boyu uzadıkça elastiklik modülü değerleri bir süre azalmış daha sonra artmaya başlamıştır. Tüp boyu minimum değerini alırken her bir tüpün elastiklik modülü değeri diğer tüplerin elastiklik modülü değerlerine daha uzakken tüp boyu maksimum değerini aldığı anda tüm tüplerin elastiklik modülü değerleri birbirine çok daha yakın değerler almıştır.
- 12) Çift duvarlı karbon nanotüplerin iç tüp çaplarına göre değerlendirme yapılmıştır. 10 nm tüp boyuna sahip zikzak ve koltuk tip çift duvarlı karbon nanotüplerde tüp çapı büyüdükçe elastiklik modülü değerleri artmıştır. Zikzak tüplerin elastiklik modülü değerleri 4-4,01 TPa , koltuk tüplerin elastiklik modülü değerleri 4,11-4,12 TPa aralığındadır.
- 13) 8 nm tüp boyunda çift duvarlı zikzak karbon nanotüplerde iç tüp çapı büyüdükçe elastiklik modülü değerleri önce artmış daha sonra azalmış ve yeniden artmıştır. Çift duvarlı koltuk karbon nanotüplerde sürekli bir artış olmuştur. Zikzak tüplerin elastiklik modülü 4,07-4,09 TPa arasında değer alırken koltuk tüplerin elastiklik modülü 4,10-4,11 TPa arasında değer almıştır.

- 14) 6 nm t p boyunda artan i  t p  apı ile elastiklik mod l  deęerleri hem zikzak hemde koltuk tip  ift duvarlı karbon nanot pler i in artmıřtır.  ift duvarlı zikzak karbon nanot plerin elastiklik mod l  4,06-4,08 TPa aralıęında  ift duvarlı koltuk karbon nanot plerin elastiklik mod l  4,17-4,19 TPa aralıęında deęerler almıřtır.
- 15) 4 nm t p boyunda artan i  t p  apıyla hem koltuk hemde zikzak  ift duvarlı karbon nanot plerde elastiklik mod l  deęerleri artıř g stermiřtir. Koltuk tipi nanot plerde elastiklik mod l  deęerleri 4,19-4,21 TPa arasında yer alırken zikzak tipi nanot plerde 4,27-4,29 TPa arasında deęerler alarak ilk defa  ift duvarlı zikzak karbon nanot plerin elastiklik mod l  deęerleri  ift duvarlı koltuk karbon nanot plerin elastiklik mod l  deęerlerinden y ksek aralıkta deęerler almıřtır.

Bu  alıřma sonucunda elde edilen veriler ıřıęında gelecekte yapılacak  alıřmalar i in  oneriler řu řekildedir:

Koltuk, zikzak ve kiral tip tek ve  ift duvarlı karbon nanot plerde daha fazla sayıda model oluřturarak elastiklik mod l   zerine sonlu elemanlar y ntemi ile  alıřmalar yapılabilir. Bunun yanı sıra hem sonlu elemanlar y ntemi ile hem de deneysel olarak termal analizleri de  oneriler arasındadır.  ift ve tek duvarlı KNT'lerin fiber olarak kullanıldıęı kompozit yapılarda mevcuttur.  rneęin; AlMg alařımında KNT katkısının daha hafif ve mekanik olarak daha iyi bir malzeme  retimi konusunda  alıřmalar literat rde vardır. Farklı matriks yapılara farklı oranlarda KNT katkısı ile malzemelerin mekanik  zelliklerindeki etkisi incelenebilir. Son olarak Epoksi-KNT kompozitlerinin elyaf bir kumař ile kompozit oluřturduktan sonra kumařın mekanik  zelliklerinde iyileřmeler g zlemlenmiřtir. Bu iyileřmeler g z  n ne alınarak farklı malzemelere Epoksi-KNT Kompozitleri takviye edilerek termal, titreřim ve y zey karakterizasyonu incelenebilir.

KAYNAKÇA

- A.G. , Nasibulin et al.,2007, Investigations of nanobud formation, Chem. Phy. Lett. 446 (2007) 109–114.
- Anonim ,Fulleren sentezi, <http://bilsenbesergil.blogspot.com/p/fulleren-fullerene.html>, 04.11.2021
- Anonim ,https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_nanobud , 04.03.2022
- Anonim,<https://www.serdarkorkut.com/2017/07/12/dogrusal-statik-sonlu-elemanlar-problemlerinin-cozumu/>, 23.02.2022
- Anonim,NanoHorn,https://www.researchgate.net/publication/232613747_Synthesis_and_characterization_of_single_wall_carbon_nanohorns_produced_by_direct_vaporization_of_graphite/figures?lo=1 , 04.11.2021
- Anonim,http://www.projeinsaat.net/4_SONLU-ELEMANLARY%C3%96NTEM%C4%B0NE-G%C4%B0R%C4%B0%C5%9E.asp , 23.02.2022
- Anonim, Sonlu Elemanlar Yönteminin Mühendislik Tasarımındaki Yeri <https://www.sanalsantiye.com/wp-content/uploads/2018/08/sonlu-elemanlar-finite-elements-yontemi.pdf> , 14.11.2021
- Anonim,Grafen nedir? Neden önemlidir, <https://bilimfili.com/mucize-malzeme-grafen-nedir-neden-onemlidir>, 22.05.2021
- Anonim, <http://www.ankatiponay.com/muhendislik-hizmetleri/analiz-cozumleri> , 02.12.2021
- Anonim, <https://dusge.com/karbon-nanotupler-ve-ozellikleri-hakkinda-her-sey/> ,24.02.2022
- Ansari, R., Mahmoudinezhad, E., 2015. Characterizing the mechanical properties of carbon nanocones using an accurate spring-mass model. Computational Materials Science 101, 260–266.. doi:10.1016/j.commatsci.2015.02.001
- Arash, B., Wang, Q., 2012. A review on the application of nonlocal elastic models in modeling of carbon nanotubes and graphenes. Computational Materials Science 51, 303–313.. doi:10.1016/j.commatsci.2011.07.040
- Aydın M.R., Azimpour F.,Acar V.,Şakar G.,Akbulut H.,Seydibeyoğlu M.Ö. Grafen Nanopartikül ve Karbon Nanotüp Katkılı Elyaf Polimer Kompozitlerin Serbest Titreşim ve Burkulma Analizi, Uluslararası Katılımlı 17. Makina Teorisi Sempozyumu, İzmir, 14-17 Haziran 2015
- Chandra, Y., Adhikari, S., Saavedra Flores, E.I., Figiel, Ł., 2020. Advances in finite element modelling of graphene and associated nanostructures. Materials Science and Engineering: R: Reports 140, 100544.. doi:10.1016/j.mser.2020.100544
- Dadoria, A.K., Khare, K., 2019. Design and Analysis of Low-Power Adiabatic Logic Circuits by Using CNTFET Technology. Circuits, Systems, and Signal Processing 38, 4338–4356.. doi:10.1007/s00034-019-01059-4
- Dalkiliç, Z. (2014). Dikey karbon nanotüp üretimi ve çeşitli uygulamalar için yüzey özelliklerinin incelenmesi (Master's thesis, Enerji Enstitüsü).
- Georgantzinos, S. K., Markolefas, S. I., Mavrommatis, S. A., & Stamoulis, K. P. (2020). Finite element modelling of carbon fiber-carbon nanostructure-polymer hybrid composite structures. In MATEC web of conferences (Vol. 314, p. 02004). EDP Sciences.

- Güler, M. & Şen, S. (2016). Sonlu elemanlar yöntemi hakkında genel bilgiler, Ordu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi, 5(1) , 56-66 . Retrieved from <https://dergipark.org.tr/tr/pub/ordubtd/issue/11069/132196>
- Günay, D. (1993). Mühendisler için sonlu elemanlar metodunun temelleri.
- Harris J.F., Carbon nanotube composites, ISSN: 0950-6608 (Print) 1743-2804 (Online) Journal homepage: <https://www.tandfonline.com/loi/yimr20,2013>
- Jafarzadyeganeh, M, 2017, Sonlu Elemanlar Analizi (FEA) Yöntemi İle Yeni Nesil Lastik Zinciri Modelleme ve Geliştirilmesi, Y. Lisans tezi, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Isparta.
- Kara Y., Akbulut H., Karbon Elyaf Takviyeli Karbon Nanotüp Katkılı Epoksi Kompozit Helisel Yayların Mekanik Davranışları, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University 32:2 (2017) 417-427
- Karimi, M. (2021). Investigation of Behavior and Analysis of Mechanical Properties of Carbon Nanotubes under Different Loads. Journal of Chemical Reviews, 3(2), 134-146.
- Kıbar, H., Öztürk, T. (2012). Ansys sonlu eleman yazılımının tarımdaki uygulamaları, Journal of the Institute of Science and Technology, 2(2), 65-74.
- Kirtania, S., & Chakraborty, D. (2007). Finite element based characterization of carbon nanotubes. Journal of reinforced plastics and composites, 26(15), 1557-1570.
- Korkmaz N., Çakmak E., Dayık M., Dokuma Karbon Elyaf Takviyeli Karbon Nano Tüp-Epoksi Kompozit Malzemelerin Mekanik ve Termal Karakterizasyonu, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi Cilt 20, Sayı 2 , 338-353, 2016
- Korucu, Yağmur. Nanotüp çeşitleri ve uygulamaları. MS thesis. Eskişehir Osmangazi Üniversitesi/Fen Bilimleri Enstitüsü, 2010.
- Kutucu, B. (2010). Nanoteknoloji ve çift duvarlı karbon nanotüplerin incelenmesi (Doctoral dissertation, Fen Bilimleri Enstitüsü).
- Küçükylıdırım, B. O., & Eker, A. A. (2012). Karbon nanotüpler, sentezleme yöntemleri ve kullanım alanları. Engineer & the Machinery Magazine, (630).
- Liu, Y, 2003, Lecture Notes : Introduction to the Finite Element Method, Universty of Cincinnati Universty , Cincinnati, 188, Ohio, USA
- Liu, Y. J., & Chen, X. (2003). Continuum models of carbon nanotube-based composites using the boundary element method. Electronic Journal of Boundary Elements, 1(2).
- Lu, X., Hu, Z., 2012. Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling. Composites Part B: Engineering 43,1902–1913.. doi:10.1016/j.compositesb.2012.02.002
- Ma, D., Ding, H., Wang, X., Yang, N., Zhang, X., 2017. The unexpected thermal conductivity from graphene disk, carbon nanocone to carbon nanotube. International Journal of Heat and Mass Transfer 108, 940–944.. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.12.092
- Manikandan, N., Suresh Kumar V.P., Siva Murugan, S., Rathis, G., Vishnu Saran, K., Shabariganesh ,T.K., 2021. Carbon nanotubes and their properties-The review. Materials Today: Proceedings.. doi:10.1016/j.matpr.2021.05.543
- Manolis, G.D., Dineva, P.S., Rangelov, T., Sfyris, D., 2021. Mechanical models and numerical simulations in nanomechanics: A review across the scales. Engineering Analysis with Boundary Elements 128, 149–170.. doi:10.1016/j.enganabound.2021.04.004

- Moaveni, S. (2011). Finite element analysis theory and application with ANSYS, 3/e. Pearson Education India.
- Muhammad, I.D., Awang, M., Mamat, O., Shaari, K.Z.K., 2015. Estimating Young's Modulus of Single-Walled Zirconia Nanotubes Using Nonlinear Finite Element Modeling. *Journal of Nanomaterials* 2015, 1–8.. doi:10.1155/2015/157423
- Nahas, M.N, Abdrabou, M., 2010, Finite Element Modeling Of Carbon Nanotubes.
- Özel C.K., Finite element modelling of defective carbon nanotube reinforced polymer composites , A thesis submitted to the board of campus graduate programs of middle east technical university northern cyprus campus ,2019
- Rafiee, R., Moghadam, R.M., 2014. On the modeling of carbon nanotubes: A critical review. *Composites Part B: Engineering* 56, 435–449.. doi:10.1016/j.compositesb.2013.08.037
- Sanudin, R. (2005). Characterisation Of Ballistic Carbon Nanotube Field-Effect Transistor (Doctoral dissertation, Universiti Teknologi Malaysia).
- Seyman, M. C., 2010. Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin İncelenmesi, Yüksek Lisans tezi. <http://hdl.handle.net/11527/6531>
- Sk. Siraz Rafi, P. Anusha, M N. Swapna Sri, 2014, Estmation of Young`S Modulus for Single Walled Carbon Nanotube with Finite Element Method, *International journal of engineering research & technology (IJERT)* Volume 03, Issue 05 (May 2014),
- T. Yoshitakea, Y. Shimakawaa, S. Kuroshimaa, H. Kimuraa, K. Takahashic, F. Kokaic, M. Yudasakab, S. Iijima, Preparation of fine platinum catalyst supported on single-wall carbon nanohorns for fuel cell application, *Physica B.* 323 (2002) 124–126.
- Thakur, A., Bharti, R., Sharma, R., 2021. Carbon nanotubes: Types, synthesis, cytotoxicity and applications in biomedical. *Materials Today: Proceedings*.. doi:10.1016/j.matpr.2021.10.002
- Thompson, M. K., & Thompson, J. M. (2017). ANSYS mechanical APDL for finite element analysis. Butterworth-Heinemann.
- Topçu İ., Karbon Nanotüp Takviyeli Aluminyum Matriksli Almg/Knt Kompozitlerinin Mekanik Davranışlarının İncelenmesi , Çanakkale Onsekiz Mart University, Journal of Graduate School of Natural and Applied Sciences, 2018:4,1, 99-109
- Tserpes, K.I., Papanikos, P., 2005. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes. *Composites Part B: Engineering* 36, 468–477.. doi:10.1016/j.compositesb.2004.10.003
- Wackerfuß, J., 2009. Molecular mechanics in the context of the finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 77, 969–997.. doi:10.1002/nme.2442

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler	
Adı Soyadı:	SÜMEYYA HİLAL YILDIZ
Eğitim	
Lise:	Erzurum Lisesi (Anadolu Lisesi)
Lisans:	Atatürk Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği
Yüksek lisans:	Atatürk Üniversitesi, Fen Bilimleri Ens., Makine Mühendisliği Anabilim Dalı (2022)
Üye Olunan Mesleki Kuruluşlar	
Makine Mühendisleri Odası-Kocaeli Şubesi	