

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**GRAFEN-NİKEL KATMANLARINDAN OLUŞAN NANO-KİRİŞLERİN
TİTREŞİM ANALİZİ**

Sadrettdin YAVUZ

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

HAZİRAN 2022

ANTALYA

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**GRAFEN-NİKEL KATMANLARINDAN OLUŞAN NANO-KİRİŞLERİN
TİTREŞİM ANALİZİ**

Sadrettdin YAVUZ

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

HAZİRAN 2022

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GRAFEN-NİKEL KATMANLARINDAN OLUŞAN NANO-KİRİŞLERİN
TİTREŞİM ANALİZİ

Sadrettdin YAVUZ
MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ

Bu tez 16/06/2022 tarihinde jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Dr. Öğr. Üyesi Muhsin Gökhan GÜNAY
Prof. Dr. Afşin GÜNGÖR
Doç. Dr. Ali Özhan AKYÜZ

ÖZET

GRAFEN-NİKEL KATMANLARINDAN OLUŞAN NANO-KİRİŞLERİN TİTREŞİM ANALİZİ

Sadrettdin YAVUZ

Yüksek Lisans Tezi, Makine Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Muhsin Gökhan GÜNAY

Haziran 2022; 30 sayfa

Bu çalışmada grafen ve nikel katmanlarından oluşan nanokirişlerin titreşim analizleri hem sayısal olarak hem de moleküler dinamik simülasyonu yöntemi ile incelenmiştir. Çalışma sırasında nano ölçekli Grafen ve Ni katmanların Gr-Ni-Gr şeklinde dizilmesine tek katmanlı nanokiriş Gr-Ni-Gr-Ni-Gr şeklinde dizilmesine ise çift katmanlı nanokiriş adı verilmiştir. Grafen ve nikel katmanlarından oluşan nanokirişler yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli kullanılarak tanımlanmıştır. Bu modelin çözümü ise diferansiyel kareleme yöntemi ile gerçekleştirilmiştir. Farklı uzunluklardaki tek ve çift katmanlı nanokirişlerin kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşullarına göre titreşim analizleri yapılmıştır. Moleküler dinamik simülasyonlarında ise nanokirişler atom atom modellenmiş ve başlangıç koşullarına göre titreşime zorlanan kirişler belirli bir süre gözlemlenerek doğal frekansları ölçülmüştür. Her iki yöntem ile elde edilen sonuçların birbiri ile tutarlı olduğu görülmüştür. Bu durum ayrıca uygulanan yöntemlerin güvenilir olduğunu da göstermektedir. Sonuçlar incelendiğinde ise hem tek katmanlı hem de çift katmanlı nanokirişler için uzunluk değerinin artışı sonucunda doğal frekans değerlerinin ve yerel olmayan parametre değerlerinin lineer olmayan şekilde azaldığı görülmüştür.

ANAHTAR KELİMELELER: Diferansiyel Kareleme Yöntemi, Grafen Levha, Moleküler Dinamik, Nanokiriş, Titreşim

JÜRİ: Dr. Öğr. Üyesi Muhsin Gökhan GÜNAY

Prof. Dr. Afşin GÜNGÖR

Doç. Dr. Ali Özhan AKYÜZ

ABSTRACT

VIBRATION ANALYSIS OF NANO-BEAMS CONSISTED OF GRAPHENE-NICKEL LAYERS

Sadretdin YAVUZ

MSc Thesis in Mechanical Engineering

Supervisor: Asst. Prof. Dr. Muhsin Gökhan GÜNAY

June 2022; 30 pages

In this study, vibration analyses of nanobeams consisting of graphene and nickel layers were investigated both numerically and by molecular dynamics simulation method. During study, the arrangement of nanoscale graphene and Ni layers in the form of Gr-Ni-Gr is called a single-layer nanobeam, and the arrangement in the form of Gr-Ni-Gr-Ni-Gr is called double-layer nanobeam. Nanobeams composed of graphene and nickel layers were described using the nonlocal Euler-Bernoulli model. The solution of this model was realized by the differential quadrature method. Vibration analyses of single and double layer nanobeams of different lengths were performed according to the clamped-clamped boundary conditions. In molecular dynamics simulations, nanobeams are modelled atom by atom and the natural frequencies of the beams, which are forced to vibrate according to the initial conditions, are observed for a certain period and their natural frequencies are measured. The results obtained by both methods were found to be consistent with each other. This situation also shows that the applied methods are reliable. When the results were examined, it was seen that the natural frequency values and non-local parameter values decreased nonlinearly because of the increase in the length value for both single-layer and double-layer nanobeams.

KEYWORDS: Differential Quadrature Method, Graphene Platelet, Molecular Dynamics, Nanobeam, Vibration

COMMITTEE: Asst. Prof. Dr. Muhsin Gökhan GÜNAY

Prof. Dr. Afşin GÜNGÖR

Assoc. Prof. Dr. Ali Özhan AKYÜZ

ÖNSÖZ

Tez konusunun belirlenmesinden, tezin teslim edilmesine kadar olan süre zarfı içinde çalışmaya ayırmış olduğu zaman, verdiği destekler, bilgi ve tecrübesi ile teze katkılarından dolayı tez danışmanım sayın Dr. Öğr. Üyesi M. Gökhan GÜNAY'a teşekkürü bir borç bilirim.

Çalışmalarım boyunca maddi ve manevi desteklerini her zaman hissettiren, beni hiç yalnız bırakmayan aileme sonsuz teşekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ	iii
AKADEMİK BEYAN	v
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	3
2.1. Grafen ve Grafen Levha	3
2.2. Kiriş Titreşimleri	4
2.3. Moleküler Dinamik Simülasyonları	4
3. MATERYAL VE METOT	6
3.1. Eringen'in Yerel Olmayan Elastisite Teorisi	6
3.2. Yerel Olmayan Euler-Bernoulli Kiriş Modeli.....	8
3.3. Diferansiyel Kareleme Yöntemi.....	12
3.4. Moleküler Dinamik Simülasyon	13
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	16
5. SONUÇLAR	23
6. KAYNAKLAR	24
7. EKLER.....	27
ÖZGEÇMİŞ	

AKADEMİK BEYAN

Yüksek Lisans Tezi olarak sunduğum “Grafen-Nikel Katmanlarından Oluşan Nano-Kirışlerin Titreşim Analizi” adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak yazıldığını belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

16/06/2022

Sadrettdin YAVUZ



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

A	: Kesit alanı [m^2]
$A_{ij}^{(r)}$	: r^{th} Türevi için ağırlık katsayıları [-]
b	: Kiriş genişliği [nm]
C_n	: Sabit [-]
D_0	: Enerji birimlerinde bir sabit [eV]
E	: Elastisite modülü [N/m^2]
E_{Ni}	: Nikel için elastisite modülü [N/m^2]
E_{Gr}	: Grafen için elastisite modülü [N/m^2]
e_0	: Ölçekleme parametresi [-]
$f(z)$	: Şekil fonksiyonu [-]
G	: Kesme modülü [-]
GPa	: Gigapaskal [$10^6 \cdot kN/m^2$]
I	: Atalet momenti [$kg \cdot m^2$]
k	: Kuvvet sabitleri [-]
L	: Uzunluk [m]
n	: Örnekleme noktalarının sayısı [-]
n	: Çokluk [-]
nm	: Nanometre [$10^{-6} \cdot m$]
P	: Dış basınç kuvveti [N]
p	: Eksenel dağıtılmış kuvvet [N/m^2]
q	: Enine dağıtılmış kuvvet [N/m^2]
q_i	: Atomlar üzerindeki yükler [<i>Coulomb</i> – C]
q_j	: Atomlar üzerindeki yükler [<i>Coulomb</i> – C]

r	: Türevin sırası [-]
r	: Bağ uzunluğu [nm]
r_0	: Denge bağ mesafesi [nm]
r_c	: Kesme mesafesi [nm]
r_{eq}	: Denge konumları [-]
θ_{eq}	: Denge konumları [-]
ω_{eq}	: Denge konumları [-]
r_{ij}	: i ve j atomu arasındaki mesafe [nm]
T	: Kinetik enerji [$kg \cdot m^2/s^2$]
TPa	: Terapaskal [$10^{12} \cdot kN/m^2$]
t	: Kiriş kalınlığı [nm]
t	: Zaman [s]
t_{Ni}	: Nikel kalınlığı [nm]
t_{Gr}	: Grafen kalınlığı [nm]
t_{xx}	: Yerel olmayan normal gerilmesi [F/A]
t_{xz}	: Yerel olmayan kesme gerilmesi [F/A]
u	: Nanokirişin referans hattının eksenel yer değiştirme [nm]
U_x	: x eksenindeki yer değiştirme [nm]
U_y	: y eksenindeki yer değiştirme [nm]
U_z	: z eksenindeki yer değiştirme [nm]
V	: Alan, yer [-]
w	: Nanokirişin referans hattının enine yer değiştirme [nm]
W	: Toplam iş [$kg \cdot m^2/s^2$]
W_n	: x 'in bir fonksiyonu [-]
w_1	: 1. Doğal frekans [$Hertz - 1/s$]

w_2	: 2. Doğal frekans [<i>Hertz</i> – 1/s]
ω	: Uygun olmayan dihedral açısı [°]
$\text{\AA}$	: Angstrom [$10^{-10} \cdot m$]
a	: Atomlar arasındaki nano boşluk [nm]
a	: 1/(mesafe birimlerinde bir sabit) [1/nm]
β_n	: Açısı, sabit [°]
ε	: Gerinim [m/m]
ε_{xx}	: Sıfır olmayan gerinimler [m/m]
ξ	: Sönüm oranı sabiti [-]
ε_0	: Dielektrik sabiti [<i>Farad</i> – F/m]
ψ	: Nanokirişin referans hattının enine kesit dönüşü [-]
θ	: Atom açısı [°]
$\emptyset$	: Dihedral açısı [°]
ρ	: Kütle yoğunluğu [kg/m^3]
ρ_{Ni}	: Nikel için kütle yoğunluğu [kg/m^3]
ρ_{Gr}	: Grafen için kütle yoğunluğu [kg/m^3]
π	: Pi sayısı [-]
$\delta\pi$	: Sanal gerinim enerjisi [Nm]
τ	: Yerel olmayan parametre [-]
t_{ij}^{nl}	: Yerel olmayan gerilme bileşeni [F/A]
$\mathbf{x}$	: Nokta [-]
$\mathbf{x}'$	: Diğer nokta [-]
γ	: Faz kayması [-]
$\nabla^2 \mathbf{t}$	: Gerilme tensörü Laplasyen'i [kN/m^2]

Bu tezde kullanılan ondalık ayırıcı nokta (“.”)’dır.

Kısaltmalar

C	: Karbon
DKY	: Diferansiyel Kareleme Yöntemi
Gr	: Grafen
Ni	: Nikel
MD	: Moleküler Dinamik
KNT	: Karbon Nanotüp
LAMMPS	: Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator



ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1. $\tau = 0.25$ için yerel olmayan çekirdek işlevlerinin dört olağan türü arasındaki karşılaştırma (Ghavanloo vd. 2019).....	7
Şekil 3.2. Yerel ve yerel olmayan çekirdek işlevleri arasındaki şematik karşılaştırma.....	8
Şekil 3.3. Bir kirişin ve koordinat sisteminin şematik gösterimi.....	8
Şekil 3.4. Moleküler Dinamik simülasyonları için kullanılan klasik kuvvet alanları.....	14
Şekil 4.1. a) Tek katmanlı nanokiriş; b) Çift katmanlı nanokiriş	16
Şekil 4.2. Kiriş yapılarının üst ve yan tarafından görünüşleri; a) Tek katmanlı nanokiriş yapısı; b) Çift katmanlı nanokiriş yapısı.....	16
Şekil 4.3. Kiriş yapılarının kesit görünüşleri; a) Tek katmanlı nanokiriş yapısı; b) Çift katmanlı nanokiriş yapısı	17
Şekil 4.4. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin birinci ve ikinci mod şekilleri	18
Şekil 4.5. $L = 15$ nm değerine oranlanmış doğal frekans değerleri; a) Tek katmanlı nanokiriş; b) Çift katmanlı nanokiriş	20
Şekil 4.6. $L = 15$ nm değerine oranlanmış τ değerleri; a) Tek katmanlı nanokiriş; b) Çift katmanlı nanokiriş.....	21
Şekil 4.7. Çift katmanlı nanokiriş değerlerin tek katmanlı nanokiriş değerlerine oranları; a) Doğal frekanslar için; b) τ parametresi için.....	21

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1. C-Ni ve Ni-Ni çiftleri için Mors potansiyel parametreleri	15
Çizelge 4.1. Grafen ve Ni atomlarından oluşan nano levhalar için mekanik özellikler ve boyutsal ölçüler	17
Çizelge 4.2. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin mekanik özellikler ve boyutları.....	18
Çizelge 4.3. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin uzunlukları (nm).....	18
Çizelge 4.4. Tek katmanlı nanokirişler için doğal frekans ve τ değerleri	19
Çizelge 4.5. Çift katmanlı nanokirişler için doğal frekans ve τ değerleri	19



1. GİRİŞ

Günümüzde Grafen ve Grafen levhaların birçok alanda kullanılması için çalışmalar hız kazanmıştır. Grafen temel olarak karbon atomunun bal peteği şeklindeki bir yapıya verilen isimdir. Burada her bir karbon atomu diğer üç karbon atomu ile kovalent bağ yapar. Grafen levha temelde dünya üzerindeki en ince malzemelerden birisidir. Boyutsal olarak kalınlıkları nano metre mertebesinde.

Malzeme üretim yöntemleri alanındaki gelişmeler ile de önemli bir atom olan karbon atomun bilgisayar destekli programlar ile modellenmesi ve pratikte de sentezlenmesine olanak sağlamıştır. İlerleyen teknoloji sayesinde nano boyuttaki yapıların tasarımları ve analizleri pratikte üretilmeden önce bilgisayar ortamında rahatlıkla yapılabilmektedir. Bu sayede birçok araştırma ve iyileştirme işlemleri Grafen levha ve onunla birlikte kullanılacak diğer yapılar için nihai tasarımın ve ölçülerin elde edilmesi konusunda büyük kolaylık sağlamaktadır.

Bu çalışmada Ni kaplı Grafen levhalardan oluşan, tek ve çift katmanlı nanokirişlerin farklı uzunlukları için kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşuluna göre titreşim analizleri yapılmıştır. Grafen ve Ni atomlarından oluşan nano levhaların sırasıyla Gr-Ni-Gr şeklinde sandviç formu oluşturacak yapıda dizilmesi ile tek katmanlı sandviç yapı elde edilmiştir. Aynı şekilde Grafen ve Ni atomlarından oluşan nano levhaların sırasıyla Gr-Ni-Gr-Ni-Gr şeklinde dizilmesi ile çift katmanlı sandviç yapı elde edilmiştir. Her iki tip sandviç yapı için de atomların düzlem dizilişleri aynı olur iken değişen kalınlığa göre nanokirişlerin ortalama kalınlık değeri, ortalama Elastisite Modülü ve ortalama ρ değerleri hesaplanarak çalışılmıştır. Titreşim analizi için hem Moleküler Dinamik (MD) simülasyonları hem de yerel olmayan Euler-Bernoulli kiriş modelinin Diferansiyel Kareleme Yöntemi (DKY) ile çözümü olmak üzere iki yöntem kullanılmıştır. Seçilen çeşitli uzunluktaki nanokirişler için 1. ve 2. doğal frekans değerleri ve τ yerel olmayan parametre değerleri elde edilmiştir.

Birinci yöntem olarak uygulanan MD simülasyonları ile titreşim esnasında nanokirişlerin her bir atomunun hareketi tek tek hesaplanmıştır. Moleküler Dinamik simülasyonlarında yapılar tek tek atomların hareketi ve atomlara etki eden kuvvetler üzerinden hesaplanır. Bu yöntem nano yapılar hakkında gerçekçi ve detaylı sonuçlar verse de çok fazla kaynak kullandığı için çözümleri analitik yöntemlere kıyasla uzun sürer. Çalışmada MD simülasyonları açık kaynak kodlu Büyük Ölçekli Atomistik/Moleküler Kütlesel Paralel Simülatör (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator - LAMMPS) yazılımı kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

İkinci yöntem olarak yerel olmayan Euler-Bernoulli kiriş modeli ve DKY kullanılmıştır. Diferansiyel Kareleme Yöntemi ile hesaplama alanında bulunan belirli noktadaki tüm fonksiyonel değerlerin ağırlıklı toplamını kullanarak, herhangi bir noktadaki bilinmeyen fonksiyonun uzamsal türevleri yaklaşık olarak hesaplanabilmektedir (Jiwari vd. 2014). Bu çalışmada da Grafen ve Ni atomlarından oluşan tek ve çift katmanlı yapıdaki nanokirişler yerel olmayan Euler-Bernoulli kirişi olarak modellenmiştir. Tek ve çift katmanlı yapıdaki bu modeller DKY kullanılarak çözülmüştür.

Her iki yöntem için de öncelikle tek ve çift katmanlı sandviç modelindeki Grafen ve Ni atomlarının dizilişleri için bilgisayar programı yardımıyla nano boyuttaki atomlar arası mesafeler ve nanokirişin diğer boyutsal ölçüleri düzenlenmiştir. Buradan elde edilen konum listesi sayesinde LAMMPS programı kullanılarak MD simülasyonları uygulanmıştır. Moleküler Dinamik simülasyonları sonucunda tek ve çift katmanlı farklı uzunluklardaki nanokirişler için salınım değerlerinin çıktıları elde edilmiştir. Bu çıktılarından elde edilen değerler tek ve çift katmanlı Grafen ve Ni atomlarının oluşturduğu nanokirişlerin titreşim grafiklerini içermektedir. Diferansiyel Kareleme Yöntemi ile de geliştirilen denklemler sayesinde nanokirişler için bilgisayar yazılım programı kullanılarak sonuç grafikleri elde edilmiştir.

Grafen ve Ni atomlarının oluşturduğu tek ve çift katmanlı sandviç modelleri için farklı uzunluklardaki nanokirişlerden titreşim sonuçları ve buna bağlı olarak da doğal frekans değerleri elde edilmiştir. Her iki yöntemden elde edilen frekans değerleri tablolar ve grafikler halinde karşılaştırılmıştır. Bu grafikler 1. ve 2. doğal frekans değerlerini içerir iken DKY ile bu sonuçlara ulaşmak için τ yerel olmayan parametre değerleri de aynı yöntemde kalibre edilmiştir.

Elde edilen sonuçların daha anlaşılır olması için seçilen farklı uzunluklardaki 1. ve 2. doğal frekans değerleri en uzun nanokirişin doğal frekans değerlerine oranlanmıştır. Bu oranların değerleri tek ve çift katmanlı nanokirişler için grafik olarak verilmiştir. Benzer şekilde farklı uzunluklarda elde edilen 1. ve 2. doğal frekanslardaki τ yerel olmayan parametre değerleri en uzun nanokirişin eş değerine oranlanmıştır. Bu oranların grafikleri de tek ve çift katmanlı nanokirişler için verilmiştir.

Çalışmada ayrıca katman sayısının tek ve çift katmanlı nanokirişler için yapılan analizlere etkileri incelenmiştir. Katman sayısının doğal frekans değerlerine etkisini görebilmek için çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekans ve yerel olmayan τ parametre değerleri tek katmanlı nanokirişlerin değerlerine oranlanmıştır. Sonuçlar 1. ve 2. doğal frekanslar için grafikler halinde verilmiştir.

Bu çalışmanın amacı Ni kaplı Grafen levhalarından oluşan nanokirişleri hem analitik olarak hem de MD simülasyonlarını kullanarak modellemek, çeşitli boyutlardaki ve katman sayısındaki nanokirişlerin titreşim davranışları incelemektir. Çalışmanın amacı doğrultusunda yerel olmayan Euler-Bernoulli kiriş modeli ve DKY yaklaşımı ile elde edilen sonuçlar MD simülasyonları yöntemiyle elde edilen sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

Çalışmanın sonunda ise Ni kaplı Grafen levhalardan oluşan, tek ve çift katmanlı nanokirişlerin titreşim sonuçlarının artan ve azalan değerleri hakkında detaylı bilgiler verilmiştir. Ayrıca, Ni ve Grafen levhalarından oluşan nanokirişlerinin çeşitli uzunluklarda verdiği sonuçlar ile katman sayısındaki değişiklik sonrasında elde edilen bulgular da irdelenmiştir. Bu bilgiler ışığında, Ni ve Grafen levhalarından oluşan nanokirişlerin titreşim analizleri hakkında sonuçlar esas alınarak yerel olmayan Euler-Bernoulli kiriş modeli ile DKY yaklaşım yöntemi ve MD simülasyonları çözüm yöntemi tartışılmıştır.

2. KAYNAK TARAMASI

2.1. Grafen ve Grafen Levha

Son zamanlarda gelişen teknoloji, üretim yöntemleri, nano boyutlarda yapılan araştırmalar, yazılım ve programlama alanındaki ilerlemeler sayesinde Grafen elde etme ve kullanma çalışmaları artmıştır. Grafen, olağanüstü mekanik, elektriksel, optik ve termal özelliklerinden dolayı büyük ilgi görmüştür (Nazemnezhad 2015). Yapılan çok sayıda deneysel sonuç, yapıların boyutu nano ölçeğe küçüldükçe, atomik kuvvetlerin ve küçük ölçeğin etkilerinin bu nano yapıların mekanik özelliklerinde önemli bir rol oynadığını göstermiştir (Nazemnezhad ve Hosseini-Hashemi 2014).

Nanokompozitler, özellikle Grafen takviyeli kompozit malzemeler ve yapılar, son yıllarda hem araştırma hem de mühendislik alanlarında yoğun ilgi görmektedir. Olağanüstü malzeme özellikleri nedeniyle, Grafen ve türevi, gelişmiş nanokompozitler için en umut verici takviye fazlarından biri olarak kabul edilmiştir (Liu vd. 2021). Tek katmanlı grafen levha ve çok katmanlı grafen levha dahil olmak üzere Grafen, altıgen bir kristal yapı içinde sıkıca paketlenmiş şekildeki C atomlarından oluşturulur (Wang vd. 2019). Grafen'in, kırılma tokluğu, kırılma enerjisi, nihai gerilme mukavemeti, Young modülü, yorulma çatlağı yayılma hızı gibi mekanik özelliklerde Karbon Nanotüp'lere (KNT'lere) benzer bir iyileşme sağladığını göstermiştir. Bunun önemli nedenleri muazzam yüzey alanı, gelişmiş arayüz yapışması ve Grafen'in düzlemsel yapısından kaynaklanmaktadır (Wang vd. 2019). Bir Grafen nano levha, yüksek sertlik ve mukavemet dahil olmak üzere üstün malzeme özellikleri sergilediği için ideal bir takviye olarak kabul edilir. Düşük Grafen levha konsantrasyonuna sahip bir polimer, mekanik özelliklerde belirgin bir gelişme sergiler ve ayrıca polimerlerin elastisite, iyi kimyasal ve biyolojik uyumluluk gibi avantajlarını korur. Bu nedenle, yukarıda bahsedilen kompozit türü, mühendislik alanlarında potansiyel olarak umut verici değerler sergilemektedir (Wang vd. 2019). Örneğin; Grafen ve türevlerinin Young Modülü ve maksimum mukavemeti sırasıyla 1 TPa ve 130 GPa'ya kadar ulaşabilir (Zaman vd. 2011). Aynı takviye edici dolgu maddesi yüklemesi ile, yani %0.1 ağırlık oranı (ağırlık) ile, Grafen bazlı epoksi nanokompozitlerin etkin Young modülünün, saf epoksininkinden %31 daha yüksek olduğu ve bu artışın sadece %3'lük bir KNT takviyeleri kullanılarak mümkün olduğu deneysel olarak gözlemlenmiştir (Rafiee vd. 2009). Bu, esas olarak Grafen'in ve türevlerinin, takviyeler ve matris arasında mükemmel yük aktarımı sağlayan son derece yüksek spesifik yüzey alanı sayesinde (Feng vd. 2017).

Tek katmanlı grafen levhalar üzerine yapılan çoğu çalışma malzeme özelliklerine (Reddy vd. 2006; Lee vd. 2008; Sakhaee-Pour 2009) odaklanmıştır. Liu vd. (2021), eksenel olarak fonksiyonel derecelendirilmiş Grafen takviyeli nanokompozit kırılganlığı Euler-Bernoulli kırılganlık teorisi kullanarak modellenmiş ve bu kırılganlığın burkulmasını ve serbest titreşimini durum-uzay yöntemine dayalı olarak incelemiştir. Ansari vd. (2010), Tek katmanlı grafen levhaların titreşim analizini, yerel olmayan sürekli levha modeli kullanarak incelemiştir. Klasik modelin aksine, bu çalışmada geliştirilen yerel olmayan model, Grafen levhaların doğal frekanslarını, boyut-etkilerini göz önünde bulundurarak, titreşim özelliklerine göre değerlendirme yeteneğine sahip olduğunu söylemiştir. Basit destekli ve kenetlenmiş tek katmanlı grafen levhaların serbest titreşim frekansları için çözümleri, genelleştirilmiş diferansiyel kareleme

yöntemi kullanarak hesaplamıştır. Daha sonra, farklı kenar uzunluğu ve kiralite (chirality) değerlerine sahip çeşitli tek katmanlı grafen levhaların serbest titreşimi için MD simülasyonları kullanmış ve sonuçları, her bir sınırla ilgili yerel olmayan parametrenin uygun değerlerini türetmek için yerel olmayan model olanlarla karşılaştırmıştır. Yerel olmayan parametrenin değerinin sistemin geometrik değişkenlerinin büyüklüğünden bağımsız olduğunu bulmuştur. Nazemnezhad ve Hosseini-Hashemi (2014), yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli kullanarak, basit destekli-basit destekli ve basit destekli-kenetlenmiş sınır koşulları için, fonksiyonel olarak derecelendirilmiş nanokirişlerin doğrusal olmayan serbest titreşimi incelemiştir.

2.2. Kiriş Titreşimleri

Kiriş yapılarının hayattaki önemi her geçen gün daha da artmaktadır. Kirişlerin önemi artarken kirişlerin çalışma koşulları ve sonuçlarında meydana gelen etkileri de ön plana çıkmaktadır. Bu etkilerden birisi olan titreşim konusuna dikkat edilmesi gerekmektedir. Yapılar oluşturulurken kullanılan kirişlerin titreşimleri, sonuçlarının incelenmesi ve analizleri pek çok araştırmanın konusu olmuştur.

Khaniki (2018)'ye göre Eringen'in yerel olmayan elastisite teorisinin diferansiyel formu, farklı sınır koşullarına sahip küçük ölçekli yapıların analizinde bazı yanlışlıklar içerdiğini bulmuştur. Eringen'in iki fazlı yerel/yerel olmayan integral modeli çerçevesinde çift katmanlı nanokiriş sistemlerinin titreşim davranışı üzerine kapsamlı bir çalışma sunmuştur.

Behera ve Chakraverty (2015), titreşim özelliklerinin doğru bir şekilde tahmin edilmesi için nanokirişlerin mekanik davranışları hakkında kararlı bir anlayışa sahip olması gerektiğini belirtmişlerdir. Van Vinh ve Tounsi (2022), değişken yerel olmayan parametrelerle yerel olmayan birinci dereceden kesme deformasyon teorisini kullanarak fonksiyonel olarak derecelendirilmiş çift kavisli nano kabukların serbest titreşimini incelemişlerdir.

Phadikar ve Pradhan (2010), yerel olmayan elastisite teorisi ile Euler-Bernoulli kirişi ve Kirchoff plakası için bir sonlu eleman formülasyonları geliştirmiş ve dört klasik sınır koşulu ile yerel olmayan kiriş için eğilme, titreşim ve burkulmayı incelemişlerdir. Fakher vd. (2020), boyuta bağlı ortama ve termal yüke gömülü iki fazlı nanokirişlerin titreşimini ve burkulmasını analiz etmişlerdir.

Tuna ve Kirca (2017), Eringen'in yerel olmayan modelinin integral formu kullanılarak nanokiriş yapılarının statik eğilme, lineer burkulma ve serbest titreşim analizi için sonlu eleman formülasyonları türetmişlerdir. Kiriş sapmalarına karşılık gelen analitik ifadeler için düzgün olmayan bir dağılım önermişlerdir.

2.3. Moleküler Dinamik Simülasyonları

Moleküllerin hareketi genellikle klasik teoride Newton'un hareket denklemleri tarafından yönetilir. Moleküler Dinamik simülasyonlarında, parçacık hareketi bilgisayarda hareket denklemlerine göre simüle edilir. Bir molekül yalnızca klasik mekanik düzeyde hareket ederse, bilgisayar gereksizdir çünkü kalem ve kağıtla matematiksel hesaplama molekülün hareketini çözmek için yeterlidir. Bununla birlikte,

gerçek bir sistemdeki moleküller çok sayıda olduğundan ve birbirleriyle etkileşime girdiğinden, bu tür matematiksel analizler uygulanamaz. Bu durumda, bilgisayar simülasyonları, mikroskobik bir analiz için güçlü bir araç haline gelir (Sharma 2019). Moleküler Dinamik simülasyonları için geliştirilen programlardan birisi de LAMMPS programıdır. LAMMPS, Sandia Ulusal Laboratuvarlarında geliştirilmiş açık kaynak kodlu bir MD simülatörüdür.

Mehralian vd. (2017), nanotüplerin serbest titreşimini araştırmak için yerel olmayan gerinim gradyan teorisi kullanmışlardır. Birinci dereceden kayma deformasyon teorisi kullanılarak boyuta bağlı yeni bir kabuk modeli formülasyonu geliştirmişlerdir. Hareket denklemler ve sınır koşullarını Hamilton ilkesi kullanarak elde etmişler ve basit destekli sınır koşulu için çözmüşlerdir. Yerel olmayan parametre, ölçek faktörü, uzunluk ve kalınlık gibi farklı parametrelerin nanotüplerin titreşim özellikleri üzerindeki etkilerini incelemişlerdir. Kalınlıktaki artış ve uzunluk parametrelerindeki azalmanın yerel olmayan parametre ve ölçek faktörünün etkisini yoğunlaştırdığını göstermişlerdir.

Seifoori ve Khoshgoftar (2019), çok katmanlı grafen levha üzerine darbe uygulayarak bu davranışı yay-kütle modeline ve MD simülasyonlarına göre incelemişlerdir. Çift katmanlı grafen levhanın iki katman arasındaki van der Waals etkileşimini analitik modele dahil etmişlerdir. Analitik yöntemi MD simülasyonu ile doğrulamış ve elde edilen sonuçlarda iyi bir uyum gösterdiğini sonucuna ulaşmışlardır.

Nazemnezhad vd. (2017), yaptıkları çalışmada titreşim analizinde çok katmanlı grafen levhaların Grafen katmanları arasında kesme kuvveti olarak hareket eden Van der Waals bağlarını ele almışlardır. Grafen katmanlarını lamine ederek sandviç yapısına ulaşmışlar ve elde edilen sonuçları doğrulamak için MD simülasyonu uygulamışlardır. Sandviç yapısının, farklı en boy oranındaki değerler için çok katmanlı grafen levhaların titreşim davranışını iyi tahmin edebildiğini gözlemlemişlerdir.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Eringen'in Yerel Olmayan Elastisite Teorisi

Yerel olmayan elastisite teorisinde, klasik durumda olduğu gibi noktalar öteleme hareketine maruz kalır ve bir noktadaki gerilme, o noktaya yakın bir bölgedeki gerinime bağlıdır (Ebrahimi vd. 2019). Yerel olmayan elastisite teorisi, nano ölçekli yapılar tarafından sergilenen küçük ölçekli etkileri dikkate almak için uygun bir yöntemdir. Bu teoriye göre, bir malzemede belirli bir noktadaki gerilimin durumu, yalnızca o noktadaki değil, aynı zamanda diğer noktalardaki gerilim durumları tarafından da belirlenir. Bu, bir malzemedeki belirli bir atoma etki eden ve yalnızca bu atom ile yakın komşuları arasındaki yerel etkileşime değil, aynı zamanda yerel olmayan şekilde komşuda yer almayan tüm diğer atomlar arasındaki etkileşime de bağlı olan birçok cisim atomlar arası kuvvet kavramıyla uyum olmalıdır (Ghavanloo vd. 2019).

Malzeme noktaları arasındaki uzun menzilli atomlar arası etkileşimler doğal olarak hesaba katılır ve bu nedenle elde edilen sonuçlar malzeme gövdesinin boyutuna bağlıdır. Yerel olmayan elastisite teorisi, çok sayıda oldukça karmaşık denklemi çözmeden hem küçük hem de nispeten daha büyük nano ölçekli yapıların mekanik davranışını tahmin etme konusunda büyük bir potansiyele sahiptir. Bu teori, yerel klasik elastisite teorisinden yalnızca malzeme ortamını tanımlayan kurucu denklemlerde farklıdır (Ghavanloo vd. 2019).

Klasik süreklilik teorilerinin uygulanabilirliği, aslında incelenen problemin uzunluk ve zaman ölçekleriyle yakından bağlantılıdır. Eğer dış karakteristik uzunluk içtekinden çok daha büyükse, klasik süreklilik teorileri yeterince doğru sonuçlar öngörebilir. Fakat aksi durumda Eringen'in yerel olmayan elastisite teorisi kullanılarak bir yapının gerilmeleri ve gerinimleri arasındaki ilişki aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$t_{ij}^{nl}(x_1, x_2, x_3, t) = \int_V \alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) E_{ijkl} \varepsilon_{kl}(x_1, x_2, x_3, t) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (3.1)$$

burada;

$$\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = \alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau) \quad \tau = \frac{e_0 a}{L}$$

Yukarıdaki denklemde t_{ij}^{nl} yerel olmayan gerilme bileşeni, E elastisite modülü, ε gerinim, a yerel olmayan çekirdek iç karakteristik uzunluğu, e_0 her malzeme için uygun bir sabit olduğu varsayılan, boyutsuz, yerel olmayan bir ölçekleme parametresi ve L dış karakteristik uzunluğudur. Yerel olmayan çekirdeklerin sıkça kullanılan dört tipi Şekil 3.1'de gösterilmiştir (Ghavanloo vd. 2019). Yerel olmayan çekirdek aşağıdaki temel özelliklere sahiptir (Eringen 1983):

- i) Malzeme noktaları arasındaki uzun menzilli atomlar arası etkileşimleri doğru bir şekilde yansıtır. Çekirdek fonksiyonunun maksimum değeri $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ 'te ortaya çıkmalı ve fonksiyonun büyük mesafelerde hızlı ve monoton bir şekilde sıfıra düşmesi gerekir. Bu, yerel olmayan etkileşimlerin yalnızca noktanın sonlu küçük komşuluğunda etkili olduğu anlamına gelir.

- ii) Yerel olmayan çekirdek $\mathbf{x}'$ e göre simetriktir, yani; $\alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau) = \alpha(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|, \tau)$.
- iii) $\tau \rightarrow 0$ sınırlayıcı durumunda, çekirdek fonksiyonu Dirac delta fonksiyonuna, δ yakınsamalı ve yerel olmayan elastisite durumu Şekil 3.2'de gösterildiği gibi klasik elastisiteye indirgenmelidir Bu, sınır dürtüsellik koşulu olarak bilinir ve matematiksel olarak şu şekilde ifade edilir:

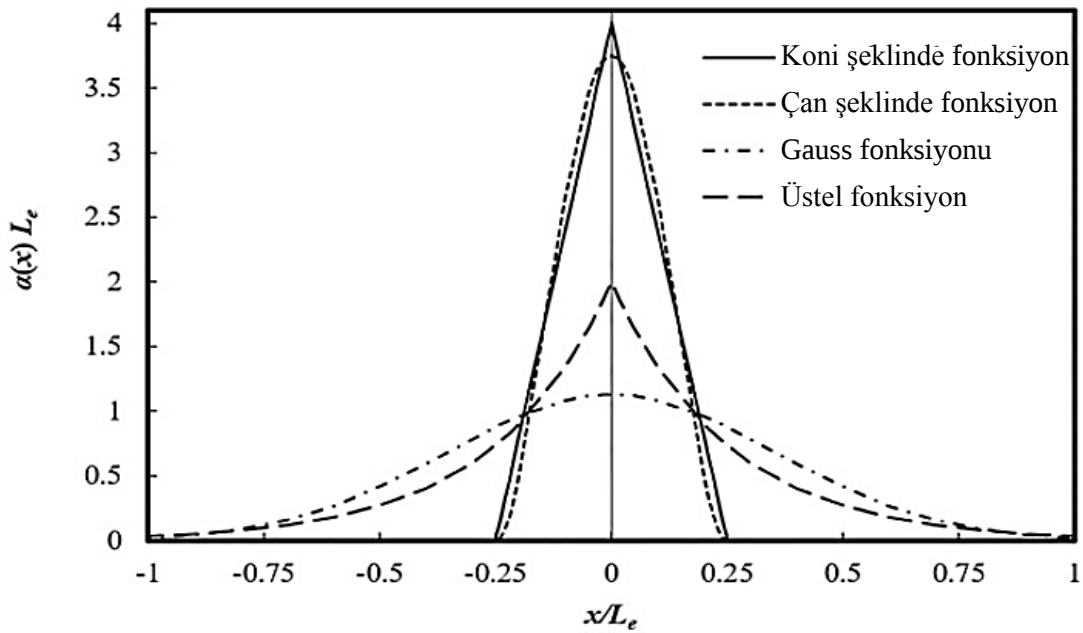
$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau) = \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \quad (3.2)$$

- iv) Tek tip bir yerel etkinin tek tip yerel olmayan bir etki ile sonuçlanması

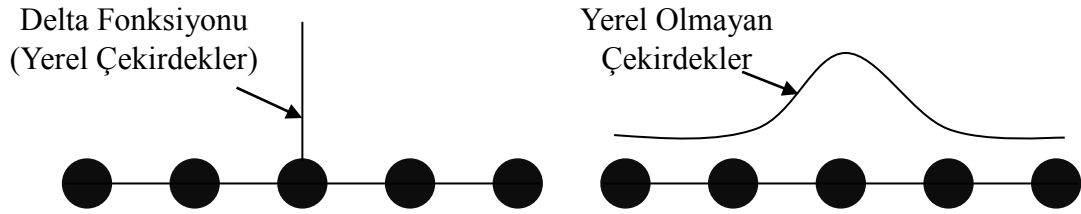
$$\int_V \alpha(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau) dV = 1 \quad (3.3)$$

beklendiğinden, aşağıdaki normalleştirme koşulu sağlanmalıdır:

Yerel olmayan etkileri doğru bir şekilde yerleştirmek için yukarıdaki koşulların sağlanması gerekir.



Şekil 3.1. $\tau = 0.25$ için yerel olmayan çekirdek işlevlerinin dört olağan türü arasındaki karşılaştırma (Ghavanloo vd. 2019)



Şekil 3.2. Yerel ve yerel olmayan çekirdek işlevleri arasındaki şematik karşılaştırma

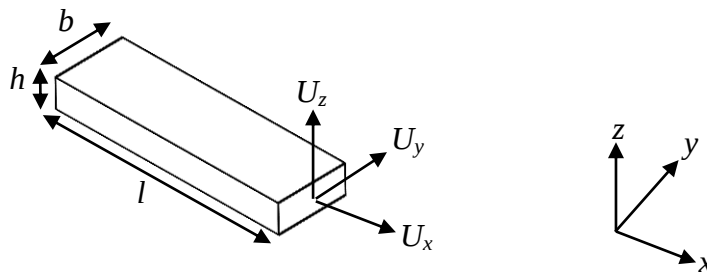
Denklem 3.2'deki integral formun diferansiyel operatörler ile değiştirilmesi sonucu yapının gerilmeleri ve gerinimleri arasındaki ilişki aşağıdaki gibi tanımlanabilir (Eringen ve Wegner 2003).

$$\mathbf{t} - (\tau L_e)^2 \nabla^2 \mathbf{t} = \mathbf{E} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.4)$$

Buradaki “:” simgesi çift noktalı ürünü belirtir. $\nabla^2 \mathbf{t}$ gerilme tensörü Laplasyen'ini gösterir. Kartezyen koordinatlarda, gerilme tensörünün Laplasyen'i, tensörün her bir bileşenine doğrudan Laplace operatörü uygulanarak elde edilebilir (Benvenuti ve Simone 2013).

3.2. Yerel Olmayan Euler-Bernoulli Kiriş Modeli

Uzunluğu L , Young modülü E , kesit alanı A , atalet momenti I ve kütle yoğunluğu ρ olan düz bir homojen izotropik nanokiriş görünüşü Şekil 3.3'te verilmiştir. Kiriş teorilerini tanımlamak için, x ekseninin nanokiriş uzunluğu boyunca seçilmesi y ve z koordinatlarının düzlem dışı ve enine koordinatlar olması için sağ-el kuralı ile bir



koordinat sistemi (x, y, z) tanıtılır (Ghavanloo vd. 2019) .

Şekil 3.3. Bir kirişin ve koordinat sisteminin şematik gösterimi

Nanokirişin deformasyonları xz düzleminde gerçekleştiğinden, yer değiştirme alanı şu şekilde verilir:

$$U_x(x, z, t) = u(x, t) - z \frac{\partial w(x, t)}{\partial x} + f(z) \left[\frac{\partial w(x, t)}{\partial x} + \psi(x, t) \right] \quad (3.5)$$

$$U_y(x, z, t) = 0$$

$$U_z(x, z, t) = w(x, t)$$

Burada U_x , U_y ve U_z sırasıyla x -, y - ve z - eksenleri boyunca yer değiştirme bileşenleridir. u, w ve ψ sırasıyla nanokirişin referans hattının aksenal ve enine yer değiştirmelerini (yani, $z = 0$) ve enine kesitin dönüşünü gösterir. $f(z)$ şekil fonksiyonudur ve farklı kiriş teorileri için tanımlanmalıdır. Sıfır olmayan gerinimler aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + f(z) \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \quad (3.6)$$

$$2\varepsilon_{xz} = \frac{\partial f(z)}{\partial z} \left[\frac{\partial w}{\partial x} + \psi \right] \quad (3.7)$$

Ayrıca, gerilim bileşenleri, yerel olmayan gerilmelerin kesit integrali ile tanımlanabilir, yani;

$$N = \int_A t_{xx} dA, \quad M = \int_A z t_{xx} dA, \quad Q = \int_A t_{xz} dA \quad (3.8)$$

Burada t_{xx} ve t_{xz} sırasıyla yerel olmayan normal ve kesme gerilmeleridir. Yerel olmayan integral kurucu bağıntıları denklem 3.1, denklem 3.6, denklem 3.7 ve denklem 3.8 kullanılarak, gerilme bileşenleri yer değiştirmeler ve dönüş cinsinden ifade edilebilir, yani;

$$N(x, t) = \int_A E \left(\int_0^l \alpha(x - \xi) \left(\frac{\partial u(\xi, t)}{\partial \xi} - z \frac{\partial^2 w(\xi, t)}{\partial \xi^2} \right) d\xi \right) dA + \int_A E \left(\int_0^l \alpha(x - \xi) f(z) \left(\frac{\partial^2 w(\xi, t)}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \psi(\xi, t)}{\partial \xi} \right) d\xi \right) dA \quad (3.9)$$

$$M(x, t) = \int_A Ez \left(\int_0^l \alpha(x - \xi) \left(\frac{\partial u(\xi, t)}{\partial \xi} - z \frac{\partial^2 w(\xi, t)}{\partial \xi^2} \right) d\xi \right) dA + \int_A Ez \left(\int_0^l \alpha(x - \xi) f(z) \left(\frac{\partial^2 w(\xi, t)}{\partial \xi^2} + \frac{\partial \psi(\xi, t)}{\partial \xi} \right) d\xi \right) dA \quad (3.10)$$

$$Q(x, t) = \int_A G \left(\int_0^l \alpha(x - \xi) \left(\frac{\partial f(z)}{\partial z} \left[\frac{\partial w(\xi, t)}{\partial \xi} + \psi(\xi, t) \right] \right) d\xi \right) dA \quad (3.11)$$

Burada G kesme modülüdür. Benzer şekilde gerilme sonuçları, yerel olmayan diferansiyel kurucu ilişkileri denklem 3.4 referans alınarak aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\begin{aligned} N(x, t) - L^2 \tau^2 \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} \\ = EA \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + E \left(\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) \int_A f(z) dA \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} M(x, t) - L^2 \tau^2 \frac{\partial^2 M(x, t)}{\partial x^2} \\ = -EI \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + E \left[\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \int_A z f(z) dA \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$Q(x, t) - L^2 \tau^2 \frac{\partial^2 Q(x, t)}{\partial x^2} = G \left[\frac{\partial w(x, t)}{\partial x} + \psi(x, t) \right] \int_A \frac{\partial f(z)}{\partial z} dA \quad (3.14)$$

Farklı kiriş teorileri arasında en basit ve aynı zamanda en yaygın olarak kullanılan teori Euler-Bernoulli kiriş teorisidir. Bu kiriş teorisinde hem döner atalet hem de kayma deformasyonunun etkilerinin ihmal edilebilir olduğu varsayılır, bu da Euler-Bernoulli kirişinin uzun kirişlere uygulanabilir olduğunu gösterir. Euler-Bernoulli kirişinin hareket denklemleri ve karşılık gelen sınır koşulları, şekil fonksiyonu $f(z) = 0$ olarak seçilerek, genişletilmiş Hamilton ilkesi ile aşağıdaki gibi elde edilir (Rao 2019).

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - \pi + W) dt = 0 \quad (3.15)$$

Euler-Bernoulli kirişinin kinetik enerjisi T şu şekilde ifade edilebilir:

$$T = \frac{1}{2} \rho A \int_0^l \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)^2 \right] dx \quad (3.16)$$

Buna ek olarak, sanal gerinim enerjisi $\delta\pi$ aşağıdaki gibidir:

$$\delta\pi = \int_0^l \left[-M \frac{\partial^2 \delta w}{\partial x^2} + N \frac{\partial \delta u}{\partial x} \right] dx \quad (3.17)$$

Ayrıca, eksenel dış basınç kuvvetine, P , eksenel dağıtılmış kuvvete, $p(x, t)$ ve enine dağıtılmış kuvvete, $q(x, t)$, bağlı toplam iş, W , şu şekilde ifade edilebilir:

$$W = \int_0^l \left[\frac{1}{2} P \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + pu + qw \right] dx \quad (3.18)$$

Denklem 3.16, denklem 3.17 ve denklem 3.18, denklem 3.15'te yerine yazılarak ve varyasyon teknikleri uygulanarak Euler-Lagrange denklemleri aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\frac{\partial N}{\partial x} + p = \rho A \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} + q - P \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \quad (3.20)$$

Ek olarak, $x = 0$ ve $x = L$ 'deki sınır koşulları aşağıdaki gibidir:

$$u = 0 \text{ or } N = 0 \quad (3.21)$$

$$w = 0 \text{ or } \frac{\partial M}{\partial x} - P \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial w}{\partial x} = 0 \text{ or } M = 0 \quad (3.23)$$

Denklem 3.9, denklem 3.10 ve denklem 3.11, denklem 3.19 ve denklem 3.20'de yerine konulursa, yerel olmayan integral model için eksenel ve enine yer değiştirmeler açısından temel denklemler şu şekilde verilir:

$$EA \frac{\partial}{\partial x} \left[\int_0^l \alpha(x - \xi) \frac{\partial u(\xi, t)}{\partial \xi} d\xi \right] + p(x, t) = \rho A \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \quad (3.24)$$

$$-EI \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\int_0^l \alpha(x - \xi) \frac{\partial u(\xi, t)}{\partial \xi} d\xi \right] + q(x, t) - P \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} = \rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} \quad (3.25)$$

Benzer şekilde, denklem 3.12, denklem 3.13 ve denklem 3.14 kullanılarak hareket denklemler diferansiyel formda aşağıdaki gibi elde edilir:

$$EA \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + p - L^2 \tau^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \rho A \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - L^2 \tau^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} \right) \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} -EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^2} + q - (L^2 \tau^2) \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - P \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - L^2 \tau^2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} \right) \\ = \rho A \left(\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - L^2 \tau^2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Bu çalışmada kiriş üzerinde eksenel dış basınç kuvveti ve eksenel dağılmış kuvvet değerleri ihmal edildiği için $P = 0$ ve $q = 0$ alınmıştır. Tek boyutlu nano ölçekli yapıların eksenel deformasyon problemleri denklem 3.24 veya denklem 3.26 ile tanımlanır. Denklem 3.25 veya denklem 3.27 bu çalışmada ele alındığı gibi nanokirişlerin enine salınımlarını modellemek için kullanılır. Yerel olmayan bir Euler-

Bernoulli kirişinin titreşimi w yer değiştirmesi bir sinüs fonksiyonu şeklinde seçilerek ve denklem 3.27 zamana göre türevlenerek aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$-EI \frac{d^4 w}{dx^4} = -\omega^2 \rho A w + \omega^2 \rho I \frac{d^2 w}{dx^2} - L^2 \tau^2 \left(-\omega^2 \rho A \frac{d^2 w}{dx^2} + \omega^2 \rho I \frac{d^4 w}{dx^4} \right) \quad (3.28)$$

3.3. Diferansiyel Kareleme Yöntemi

Diferansiyel Kareleme Yöntemi başlangıç veya sınır problemlerinin çözümü için kullanılan sayısal bir yöntemdir. Diferansiyel Kareleme Yöntemi'nde bir fonksiyonun türevi $f(x)$, fonksiyonun o noktadaki değerinin aşağıda verildiği gibi ağırlıklı toplamı olarak ifade edilir (Shu 2012).

$$\left. \frac{\partial^r f(x)}{\partial x^2} \right|_{x=x_i} = \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(r)} f(x_j) \quad (i, j = 1, 2, \dots, n) \quad (3.29)$$

Bu denklemde r türevin sırasını gösterir, $A_{ij}^{(r)}$ terimi r^{th} türevi için ağırlık katsayılarıdır, x_i terimi i^{th} örnekleme noktasının koordinatıdır ve n örnekleme noktalarının sayısıdır (Shu 2012). Birinci türevin ağırlık katsayıları aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$A_{ij}^{(1)} = \frac{\prod_{j=1}^n (x_i - x_j)}{(x_i - x_j) \prod_{i=1}^n (x_j - x_i)} \quad (3.30)$$

$$A_{ii}^{(1)} = - \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(r)} \quad (3.31)$$

Ve daha yüksek türevlerin ağırlık katsayıları, aşağıda verilen tekrarlayan denklemler kullanılarak bulunabilir (Shu 2012).

$$A_{ij}^{(1)} = r \left(A_{ij}^{(r-1)} A_{ij}^{(1)} - \frac{A_{ii}^{(r-1)}}{(x_i - x_j)} \right) \quad (i \neq j) \quad (3.32)$$

$$A_{ii}^{(r)} = - \sum_j^n A_{ij}^{(r)} \quad (3.33)$$

Denklem 3.28'den elde edilen yerel olmayan Euler-Bernoulli kirişinin hareket denklemi DKY uygulanarak aşağıdaki gibi ifade edilir (Günay 2021).

$$\begin{aligned}
& -EI \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(4)} W_j \\
& = -\omega^2 \rho A W_i + \omega^2 \rho I \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(2)} W_j \\
& + L^2 \tau^2 \left(-\omega^2 \rho A \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(2)} W_j + \omega^2 \rho I \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(4)} W_j \right)
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Bu denklemde $W_i = w(x_i)$, örnekleme noktasındaki (x_i) sapma değeridir. Kirişin sınır koşulları kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşulu için DKY ile aşağıda verildiği gibi tanımlanır.

$$W_i = 0, \quad \sum_{j=1}^n A_{ij}^{(1)} W_j = 0 \quad x = 0, L \text{ iken} \tag{3.35}$$

Diferansiyel Kareleme Yöntemi'nde hem örnekleme noktalarının seçilmesi hem de sınır koşullarının uygun şekilde kullanılması sonuçları oldukça etkiler. Bu çalışmada Gauss-Lobatto örnekleme noktaları kullanılmıştır.

$$X_i = \frac{\cos(\pi (i - 1)/(n - 1))}{2} \tag{3.36}$$

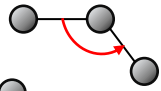
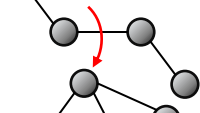
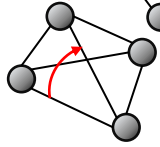
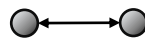
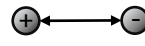
Sınır koşulları uygulandıktan sonra, Denklem 3.34'te verilen hareket denklemi bir öz değer problemi olarak çözülebilir ve nanokirişlerin doğal frekansları ve doğal modları hesaplanabilir.

3.4. Moleküler Dinamik Simülasyon

Moleküler Dinamik simülasyonları nano yapıların mekanik davranışlarını araştırmak için etkili yöntemlerden biridir. Literatürdeki birçok çalışma bu yöntemin güvenilirliğini doğrulamaktadır. Moleküler Dinamik'te birden fazla atom veya molekülün hareketleri ve etkileşimleri Newton'un hareket yasalarına dayalı olarak tanımlanır ve sistemin denklemleri hız-Verlet entegrasyonu (Verlet 1967), tersinir referans sistem yayıcı algoritması (Tuckerman vd. 1992) veya benzer yöntemlerle çözülür.

Atomlar veya moleküller arasındaki etkileşimler, bağ gerilmesi, bağ açısı bükülmesi, düzlem dışı burulma, dihedral açı burulması ve Van der Waals etkileşimleri gibi genel atomlar arası davranışları tanımlamak için geliştirilen potansiyel/kuvvet alanlarına bağlı olarak hesaplanır.

Hesaplama teknolojisinin ve algoritmalarının hızlı gelişimi ile atomistik MD simülasyonlarının performansı büyük ölçüde gelişmiştir. Moleküler Dinamik simülasyonları için kullanılan klasik kuvvet alanları Şekil 3.4'te ilk sütunda moleküler hareket için atomik kuvvetleri türetmede kullanılan enerji fonksiyonu, ikinci sütunda bir kuvvet alanındaki potansiyel enerji terimleri ve üçüncü sütunda da örnek bağ gösterimleri olarak verilmiştir.

$U(R) = \sum_{bağlar} k_r (r - r_{eq})^2$	<i>bağ</i>	
$+ \sum_{açılar} k_\theta (\theta - \theta_{eq})^2$	<i>açı</i>	
$+ \sum_{dihedral} k_\phi (1 + \cos[n\phi - \gamma])$	<i>dihedral</i>	
$+ \sum_{improper} k_\omega (\omega - \omega_{eq})^2$	<i>improper</i>	
$+ \sum_{i < j}^{atomlar} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{r_m}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r_{ij}} \right)^6 \right]$	<i>Van der Walls</i>	
$+ \sum_{i < j}^{atomlar} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$	<i>elektrostatik</i>	

Şekil 3.4. Moleküler Dinamik simülasyonları için kullanılan klasik kuvvet alanları

Şekil 3.4'teki moleküler hareket için atomik kuvvetleri türetmede kullanılan enerji fonksiyonunda r bağ uzunluğudur; θ atom açısıdır; ϕ dihedral açısıdır; ω uygun olmayan dihedral açısıdır; r_{ij} , i ve j atomu arasındaki mesafedir; k_r , k_θ , k_ϕ ve k_ω kuvvet sabitleridir; r_{eq} , θ_{eq} ve ω_{eq} denge konumlarıdır; dihedral terim, bir kuvvet sabiti (k_ω), çokluk (n) ve faz kayması (γ) ile karakterize edilen periyodik bir terimdir; ϵ_{ij} , Lennard-Jones kuyusu derinliği ile ilişkilidir; r_m , potansiyelin minimuma ulaştığı mesafedir; q_i ve q_j ilgili atomlar üzerindeki yüklerdir; ve ϵ_0 dielektrik sabitidir (Chang vd. 2016).

Karbon atomları arasındaki etkileşimler, hidrokarbonlar için geliştirilen Airebo bağ düzeni potansiyeli kullanılarak tanımlanmıştır. Airebo potansiyelinin temel formülasyonu Denklem 3.37'de sunulmuştur (Stuart vd. 2000).

$$\sum^{Airebo} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} \left[\sum_{ij}^{Rebo} + \sum_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} \sum_{kijl}^{Torsion} \right] \quad (3.37)$$

Burada $\sum_{ij}^{Rebo}$ terimi, iki atom çifti arasındaki bağları tanımlayan ve bağların oluşmasını ve kırılmasını sağlayan Rebo potansiyeli terimidir (Brenner vd. 2002), $\sum_{ij}^{LJ}$ terimi, bağlanmamış iki atom arasındaki uzun menzilli etkileşimleri hesaplayan Leonard-Jones potansiyelidir (Jones 1924; Jones 1924). Örneğin çok duvarlı KNT'lerin duvarları arasındaki etkileşimler ve $\sum_{kijl}^{Torsion}$ terimi, dört atom arasındaki dihedral burulma potansiyelidir (Stuart vd. 2000). Hesaplara burulma potansiyelinin dahil edilmesi daha gerçekçi bir mekanik davranış sağlar. Ni-C çiftleri ile Ni-Ni çiftleri arasındaki etkileşimler, denklem 3.38'de verilen Morse potansiyeli kullanılarak tanımlanmıştır (Morse 1929).

$$\sum^{Morse} = D_0 [e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}] \quad r < r_c \quad (3.38)$$

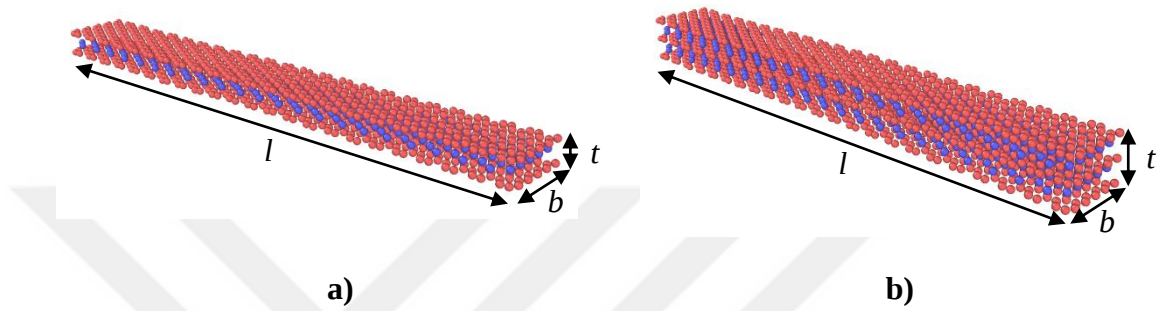
Burada D_0 enerji birimlerinde bir sabit, α 1/(mesafe birimlerinde bir sabit), r_0 denge bağ mesafesi ve r_c kesme mesafesidir. Atomlar arasındaki mesafe kesme mesafesini aşarsa, tekrar sınıra girene kadar bu atomlar için potansiyeller hesaplanmaz. Airebo potansiyeli için gerekli parametreler LAMMPS içindeki ch.airebo dosyasından alınmış ve Morse potansiyeli için gerekli olan parametreler C-Ni ve Ni-Ni çiftleri için Çizelge 3.1'de verilmiştir.

Çizelge 3.1. C-Ni ve Ni-Ni çiftleri için Mors potansiyel parametreleri

Çift	D_0 [eV]	α [1/Å]	r_0 [Å]	r_c [Å]
C-Ni	0.4330	3.2440	2.316	2.50
Ni-Ni	0.4205	1.4199	2.780	3.75

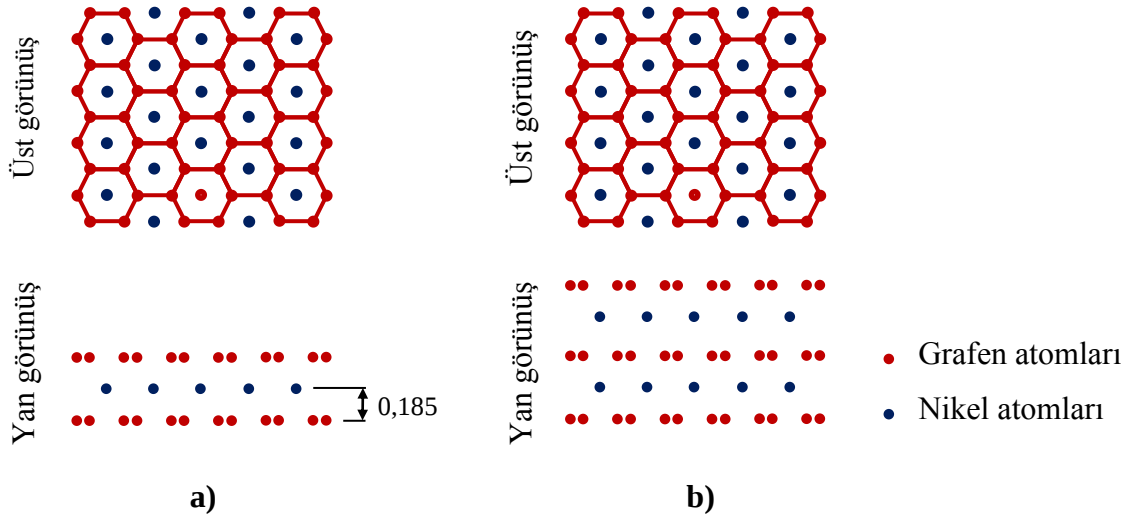
4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada tek katmanlı olarak adlandırılan Gr-Ni-Gr dizilimine ve çift katmanlı olarak adlandırılan Gr-Ni-Gr-Ni-Gr dizilimine sahip nanokirişler incelenmiştir. Nanokirişler Ni atomlarından oluşan levhaların altından ve üstünden Grafen levhalar ile birleştirilmesi sonucu Şekil 4.1’de resmedildiği gibi elde edilmiştir. Kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşulu için çeşitli uzunluklardaki nanokirişlerin doğal frekansları MD simülasyonları ve DKY ile çözülmüş yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli kullanılarak hesaplanmıştır.



Şekil 4.1. a) Tek katmanlı nanokiriş; b) Çift katmanlı nanokiriş

Gr-Ni-Gr tek katmanlı nanokirişlerin ve Gr-Ni-Gr-Ni-Gr çift katmanlı nanokirişlerin üst ve yan görünüşleri Şekil 4.2’de gösterilmiştir. Burada Grafen ve Ni katmanları arasındaki mesafe 0.185 nm olarak alınmıştır.



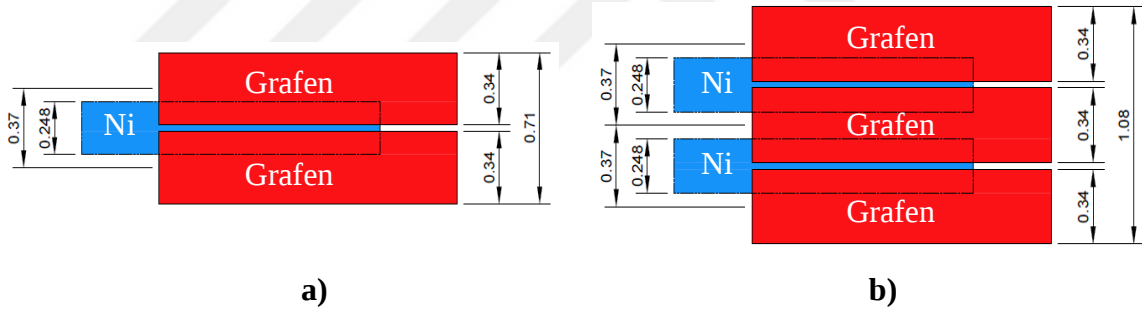
Şekil 4.2. Kiriş yapılarının üst ve yan tarafından görünüşleri; a) Tek katmanlı nanokiriş yapısı; b) Çift katmanlı nanokiriş yapısı

Yukarıda incelenen Gr-Ni-Gr tek katmanlı ve Gr-Ni-Gr-Ni-Gr çift katmanlı nanokirişlerin oluşumunda rol oynayan Grafen ve Ni atomlarının malzeme özellikleri ve boyutları Çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1. Grafen ve Ni atomlarından oluşan nano levhalar için mekanik özellikler ve boyutsal ölçüler

Tip	E [GPa]	ρ [kg/m ³]	b [nm]	t [nm]
Grafen	1000	2267	1.11	0.34
Ni	110	8908	1.11	0.248

Grafen ve Ni atomlarından oluşan levhaların kalınlıkları atom yarıçaplarına göre alındığında katmanların Şekil 4.3'te verildiği gibi iç içe geçtiği görülmektedir. Grafen ve Ni atomlarının çapları ve katmanlar arasındaki mesafe dikkate alınarak tek ve çift katmanlı nanokirişler için toplam kalınlık değerleri hesaplanmıştır. Hesaplamalar sonucunda t_{toplam} değeri tek katmanlı nanokirişler için $t_{toplam,tek} = 0.71$ nm ve çift katmanlı nanokirişler için $t_{toplam,çift} = 1.08$ nm olarak elde edilmiştir. Nanokirişlerin toplam kalınlıklarına göre ortalama Elastisite Modülü değeri bağıntısı denklem 4.1'de, ortalama ρ değeri bağıntısı ise denklem 4.1'de verilmiştir.



Şekil 4.3. Kiriş yapılarının kesit görünüşleri; **a)** Tek katmanlı nanokiriş yapısı; **b)** Çift katmanlı nanokiriş yapısı

$$E_{ort} = (2E_{Gr}t_{Gr} + E_{Ni}t_{Ni})/t_{toplam} \quad (4.1)$$

$$\rho_{ort} = (2\rho_{Gr}t_{Gr} + \rho_{Ni}t_{Ni})/t_{toplam} \quad (4.2)$$

Çizelge 4.1'den alınan Grafen ve Ni için mekanik özellik değerleri ve Şekil 4.3'ten elde edilen toplam kalınlık değerleri denklem 4.1 ve denklem 4.2'de çözülünce tek ve çift katmanlı nanokiriş yapılarındaki E_{ort} ve ρ_{ort} değerleri elde edilir. Elde edilen bu değerler ve t_{toplam} değerleri Çizelge 4.2'de verilmiştir. Hesaplamalarda kullanılan nanokiriş uzunlukları ise nanometre cinsinden Çizelge 4.3'te sunulmuştur.

Çizelge 4.2. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin mekanik özellikler ve boyutları

Tip	t_{toplam} [nm]	E_{ort} [GPa]	ρ_{ort} [kg/m ³]
Gr-Ni-Gr	0.71	9961.7	5282
Gr-Ni-Gr-Ni-Gr	1.08	9949.6	6232

Çizelge 4.3. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin uzunlukları (nm)

Tip	L_1	L_2	L_3	L_4	L_5	L_6	L_7	L_8	L_9
Gr-Ni-Gr	3.0	4.5	6.0	7.5	9.0	10.5	12.0	13.5	15.0
Gr-Ni-Gr-Ni-Gr	3.0	4.5	6.0	7.5	9.0	10.5	12.0	13.5	15.0

Kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşulundaki kirişler için frekans denklemi denklem 4.3'te, mod şekli (normal fonksiyon için) denklem 4.4'te, $\beta_n l$ değerleri ise denklem 4.5'te verilmiştir (Rao 2017).

$$\cos \beta_n l \cdot \cosh \beta_n l = 1 \quad (4.3)$$

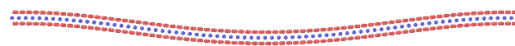
$$W_n(x) = C_n [\sinh \beta_n x - \sin \beta_n x + a_n (\cosh \beta_n x - \cos \beta_n x)]$$

burada;

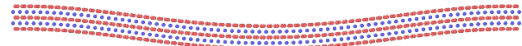
$$a_n = \left(\frac{\sinh \beta_n l - \sin \beta_n l}{\cos \beta_n l - \cosh \beta_n l} \right) \quad (4.4)$$

$$\beta_1 l = 4.730041, \beta_2 l = 7.853205, \beta_3 l = 10.995608, \beta_4 l = 14.137165 \quad (4.5)$$

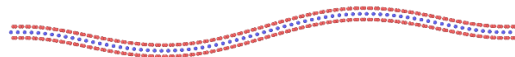
Moleküler Dinamik simülasyonlarında kirişlerin başlangıç koşulları denklem 3.28 ile hesaplanan mod şekline göre atomların pozisyonları modifiye edilerek ayarlanmıştır. Her uzunluk için atom pozisyonları Şekil 4.4'te gösterildiği gibi modifiye edildikten sonra tek ve çift katmanlı nanokirişlerin 1. ve 2. doğal frekansları elde edilmiştir. Moleküler Dinamik simülasyonlarını yürütmek için kullanılan LAMMPS kodu EK-1'de atom pozisyonlarını modifiye etmek için kullanılan Python kodu ise EK-2'de verilmiştir.



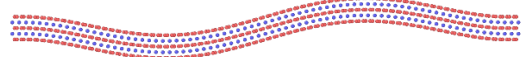
Tek Katmanlı Nanokiriş – 1. Mod



Çift Katmanlı Nanokiriş – 1. Mod



Tek Katmanlı Nanokiriş – 2. Mod



Çift Katmanlı Nanokiriş – 2. Mod

Şekil 4.4. Tek ve çift katmanlı nanokirişlerin birinci ve ikinci mod şekilleri

Moleküler Dinamik simülasyonlarının yanında tek ve çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekansları denklem 3.28’de belirtilen yerel olmayan Euler-Bernoulli kiriş modeli DKY ile çözülerek de hesaplanmıştır. Burada kullanılan lokal olmayan τ parametresi MD simülasyonlarında hesaplanan doğal frekans değerleri DKY sonuçları ile eşitlenerek kalibre edilmiştir. Her bir uzunluk için MD simülasyonları ve DKY yaklaşımlarına göre elde edilen 1. ve 2. doğal frekans değerleri ve kalibre edilmiş τ yerel olmayan parametre değerleri tek katmanlı nanokirişler için Çizelge 4.4’te benzer şekilde çift katmanlı nanokirişler için Çizelge 4.5’te sunulmuştur.

Çizelge 4.4. Tek katmanlı nanokirişler için doğal frekans ve τ değerleri

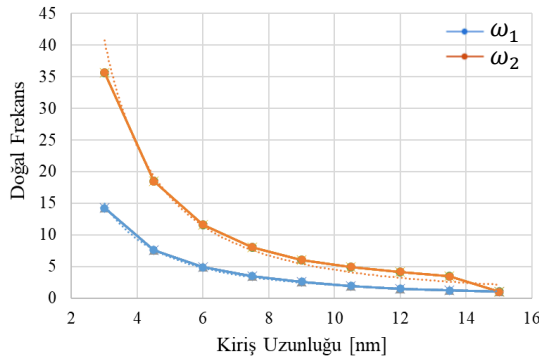
L (nm)	w_1			w_2		
	MD (Hz)	DKY (Hz)	τ	MD (Hz)	DKY (Hz)	τ
3.0	0.625	0.625	3.09087	1.568	1.568	1.76317
4.5	0.335	0.355	2.55601	0.812	0.81	1.51467
6.0	0.214	0.214	2.24833	0.512	0.512	1.34663
7.5	0.154	0.154	2.02587	0.355	0.355	1.24013
9.0	0.114	0.114	1.87756	0.267	0.267	1.14389
10.5	0.085	0.085	1.82571	0.218	0.218	1.02781
12.0	0.066	0.066	1.81642	0.182	0.182	0.93838
13.5	0.053	0.053	1.78815	0.152	0.152	0.88881
15.0	0.044	0.044	1.73240	0.132	0.132	0.82833

Çizelge 4.5. Çift katmanlı nanokirişler için doğal frekans ve τ değerleri

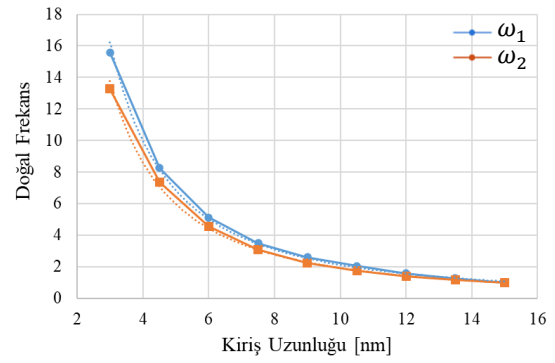
L (nm)	w_1			w_2		
	MD (Hz)	DKY (Hz)	τ	MD (Hz)	DKY (Hz)	τ
3.0	0.842	0.842	3.25653	1.951	1.951	2.0093
4.5	0.446	0.448	2.71378	1.081	1.081	1.61249
6.0	0.276	0.276	2.48027	0.672	0.672	1.45787
7.5	0.188	0.189	2.30987	0.455	0.455	1.37456
9.0	0.141	0.141	2.14578	0.33	0.33	1.29378
10.5	0.11	0.109	2.0421	0.256	0.256	1.24419
12.0	0.085	0.085	1.99983	0.207	0.207	1.1786
13.5	0.068	0.068	1.97748	0.172	0.172	1.12022
15.0	0.054	0.054	2.00693	0.147	0.147	1.06027

Doğal frekansların kiriş uzunluğuna bağlı değişimini görebilmek için elde edilen 1. ve 2. doğal frekans değerleri, $L = 15$ nm uzunluğundaki nanokirişin frekans

değerlerine oranlanmıştır. Bu oranların grafikleri tek katmanlı ve çift katmanlı nanokirişler için Şekil 4.5'te verilmiştir.



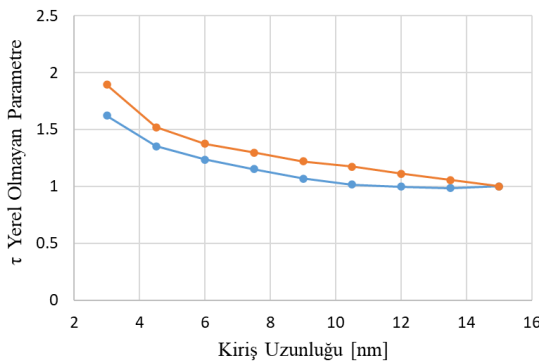
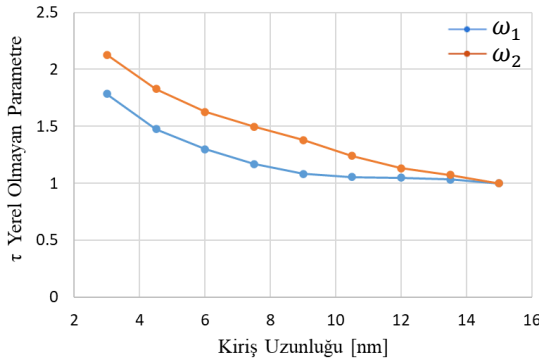
a)



b)

Şekil 4.5. $L = 15$ nm değerine oranlanmış doğal frekans değerleri; **a)** Tek katmanlı nanokiriş; **b)** Çift katmanlı nanokiriş

Farklı kiriş uzunluklarına göre elde edilen 1. ve 2. doğal frekanslardaki τ yerel olmayan parametre değerlerinin $L = 15$ nm uzunluğundaki nanokirişin eş değerine oranlarının grafikleri tek ve çift katmanlı nanokirişler için Şekil 4.6'da verilmiştir.

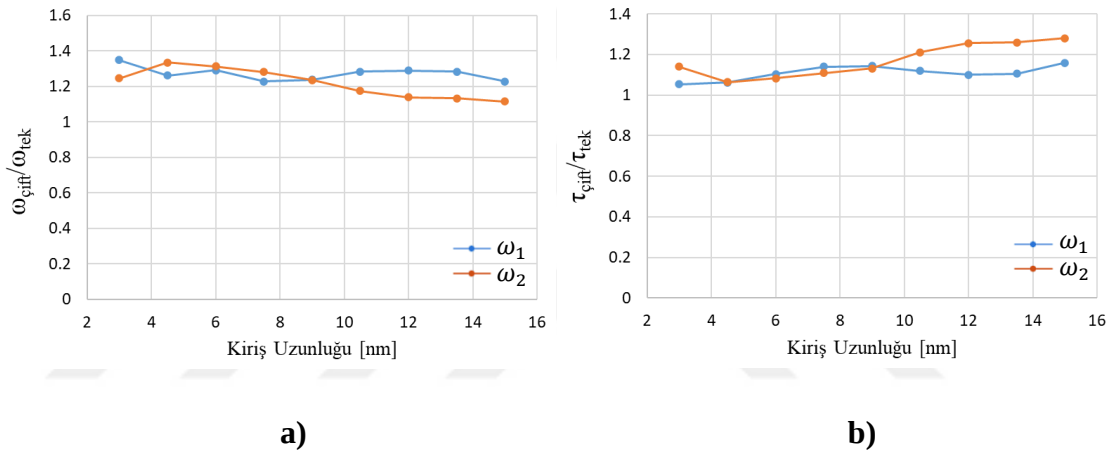


a)

b)

Şekil 4.6. $L = 15$ nm değerine oranlanmış τ değerleri; **a)** Tek katmanlı nanokiriş; **b)** Çift katmanlı nanokiriş

Katman sayısının doğal frekanslara etkisini görebilmek için çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekans ve yerel olmayan τ parametre değerleri tek katmanlı nanokirişlerin değerlerine oranlanmış ve sonuçlar 1. ve 2. doğal frekanslar için Şekil 4.7’de verilmiştir. Burada çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekansının, tek katmanlı nanokirişlerin yaklaşık 1.2 katı olduğu ve bu oranın nanokiriş uzadıkça hafifçe düştüğü görülmüştür. Yerel olmayan τ parametresi için ise oranın yaklaşık 1.1 olduğu ve bu oranın nanokiriş uzadıkça hafifçe arttığı görülmüştür.



Şekil 4.7. Çift katmanlı nanokiriş değerlerin tek katmanlı nanokiriş değerlerine oranları; **a)** Doğal frekanslar için; **b)** τ parametresi için

Nanokirişlerin titreşim etkilerini incelemek için Grafen ve Ni atomlarından oluşan levhalardan iki tür nanokiriş yapısı geliştirilmiştir. Levhaların Gr-Ni-Gr şeklinde dizilmesine tek katmanlı ve Gr-Ni-Gr-Ni-Gr şeklinde dizilmesine çift katmanlı nanokiriş adı verilmiştir. Tek katmanlı ve çift katmanlı nanokirişlerin kenetlenmiş-kenetlenmiş sınır koşulu altındaki 1. ve 2. doğal frekansları hem yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ve DKY ile hem de MD simülasyonları ile hesaplanmıştır.

Moleküler Dinamik simülasyonu sonuçları incelendiğinde Grafen ve Ni katmanlarından oluşan nanokirişlerin stabil olduğu ve titreşim gibi mekanik davranışları tutarlı olarak gösterdiği görülmüştür. Moleküler Dinamik simülasyonlarında yapılar tek tek atomların hareketi ve atomlara etki eden kuvvetler üzerinden hesaplanır. Bu yöntem nano yapılar ve özellikleri hakkında çok detaylı bilgiler verse de; gerekli hesapları yapmak sürekli ortam teorileri kullanılarak geliştirilmiş bir çok diğer metoda kıyasla daha fazla işlem gücü gerektirir. Bu nedenle çalışmada ilgili nanokirişlerin doğal frekanslarını hesaplayabilen yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli kullanılmış ve bu modelin çözümü DKY ile gerçekleştirilmiştir.

Bölüm-4’de sunulan sonuçlar incelendiğinde her iki yöntemin de sonuçlarının birbiri ile tutarlı olduğu görülmektedir. Moleküler Dinamik simülasyonlarında her bir kirişi atom atom modelleyip uzun işlemlere tabi tutmak gerekirken, yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ile aynı sonuca çok daha hızlı ulaşılabildiği görülmüştür. Burada yerel olmayan Euler-Bernoulli modelinin dezavantajı tek bir yerel olmayan τ parametresinin tüm nanokiriş boyları için geçerli olmamasıdır. Yine de; MD simülasyonlarının veya varsa deneysel çalışmaların sonuçlarına göre yerel olmayan τ parametresi kalibre edilerek, kalibre edilen uzunluk aralığındaki nanokirişler için Euler-Bernoulli modeli etkili bir şekilde kullanılabilir.

Bölüm-4’de verilen tablo ve grafikler detaylı olarak incelendiğinde hem tek katmanlı hem de çift katmanlı kısa nanokirişlerin uzun nanokirişlere nispeten daha yüksek doğal frekans değerine sahip olduğu görülmüştür. Nanokirişlerin doğal frekansı ile uzunluğu arasında nonlineer olarak azalan bir ilişki olduğu görülmüştür. Benzer şekilde yerel olmayan τ parametresi kısa nanokirişler için yüksek, uzun nanokirişler için daha küçük değere sahiptir.

Katman sayısının sonuçlar üzerindeki etkisini araştırmak için çift katmanlı nanokirişlerin sonuçları tek katmanlı nanokirişlerin sonuçlarına bölünmüştür. Çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekansının, tek katmanlı nanokirişlerin yaklaşık 1.2 katı olduğu ve bu oranın nanokiriş uzadıkça hafif bir düşüş gösterdiği belirlenmiştir. Yerel olmayan τ parametresi için ise çift ve tek katmanlı nanokirişler arasındaki oranın yaklaşık 1.1 olduğu ve bu oranın nanokiriş uzadıkça hafifçe arttığı görülmüştür.

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada nanokirişlerin titreşim etkisini incelemek için farklı uzunluklardaki Ni ve Grafen levhalarından oluşan tek ve çift katmanlı nanokirişler modellenmiştir. Çalışmada hedeflendiği gibi Ni ve Grafen levhalarından oluşan tek ve çift katmanlı nanokirişlerin doğal frekansları hem MD simülasyonları hem de yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ve DKY yöntemi ile çözülerek hesaplanmıştır.

Moleküler Dinamik simülasyonları ve yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli yöntemleri ile yapılan hesaplamalardan elde edilen doğal frekans değerleri için sunulan tablolar ve grafikler sonuçların karşılaştırılmasına olanak sağlamıştır. Her iki yöntemden elde edilen doğal frekans değerlerinin grafikleri incelendiğinde elde edilen değerlerin birbiri ile eşdeğer oranlarda ve uyum içinde olduğu görülmektedir.

Çalışmada tek ve çift katmanlı nanokirişlerin titreşim analizlerini hesaplamak için kullanılan her iki yöntemin sonuçları irdelendiğinde; MD simülasyonları ile nanokirişlerin çok detaylı bir şekilde incelenebildiği görülmektedir. Ancak, MD simülasyonları yöntemi için gerekli ön hazırlık ve işlemler uzun zaman almaktadır. Yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ise çok daha hızlı bir şekilde sonuç vermekte olsa da bu yöntemin dezavantajı ise; doğru sonuçlara ulaşabilmek için yerel olmayan τ parametresinin kalibre edilmesi gerekliliğidir.

Moleküler Dinamik simülasyonlarının veya varsa deneysel çalışmaların sonuçlarına göre yerel olmayan τ parametresi kalibre edilebilir. Kalibre edilen uzunluk aralığındaki nanokirişler için Euler-Bernoulli modeli etkili bir şekilde kullanılabilir.

Hem tek katmanlı hem de çift katmanlı kısa nanokirişlerin uzun nanokirişlere göre nispeten daha yüksek doğal frekans değerine sahip olduğu görülmüştür. Nanokirişlerin doğal frekansı ile uzunluğu arasında nonlineer olarak azalan bir ilişki olduğu görülmüştür. Benzer şekilde yerel olmayan τ parametresi kısa nanokirişler için yüksek, uzun nanokirişler için daha küçük değere sahiptir.

Moleküler Dinamik simülasyonlarıyla birlikte yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ile yapılan hesaplamalar sonucunda doğal frekans değerlerinin kısa nanokirişler için uzun nanokirişlere kıyasla daha yüksek çıktığı görülmektedir. Nanokirişlerin uzunluklarına bağlı olarak değişse de genel olarak çift katmanlı nanokirişlerin tek katmanlı nanokirişlerden 1.2 kat daha büyük doğal frekans değerine sahip olduğu görülmektedir.

Moleküler Dinamik simülasyonlarıyla birlikte yerel olmayan Euler-Bernoulli modeli ile yapılan hesaplamalar sonucunda aynı doğal frekansı veren yerel olmayan τ parametresinin uzun nanokirişlere kıyasla kısa nanokirişler için daha yüksek değerde olduğu elde edilmiştir. Nanokirişlerin uzunluklarına bağlı olarak değişse de genel olarak çift katmanlı nanokirişlerin tek katmanlı nanokirişlerden 1.1 kat daha büyük yerel olmayan τ parametre değerine sahip olduğu görülmüştür.

Doğal frekans ve yerel olmayan τ parametre değerleri incelendiğinde küçük değişiklikler olduğu görülmektedir. Ne kadar bu küçük değişiklikler olsa da bulgular hem birinci hem de ikinci titreşim modu için geçerlidir.

6. KAYNAKLAR

- Ansari, R., Sahmani, S. ve Arash, B. 2010. Nonlocal plate model for free vibrations of single-layered graphene sheets. *Physics Letters A* 375(1): 53-62.
- Behera, L. ve Chakraverty, S. 2015. Application of Differential Quadrature method in free vibration analysis of nanobeams based on various nonlocal theories. *Computers & Mathematics with Applications* 69(12): 1444-1462.
- Benvenuti, E. ve Simone, A. 2013. One-dimensional nonlocal and gradient elasticity: closed-form solution and size effect. *Mechanics Research Communications* 48: 46-51.
- Brenner, D. W., Shenderova, O. A., Harrison, J. A., Stuart, S. J., Ni, B. ve Sinnott, S. B. 2002. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *Journal of Physics: Condensed Matter* 14(4): 783.
- Chang, C.-E. A., Huang, Y.-M. M., Mueller, L. J. ve You, W. 2016. Investigation of structural dynamics of enzymes and protonation states of substrates using computational tools. *Catalysts* 6(6): 82.
- Ebrahimi, F., Dehghan, M. ve Seyfi, A. 2019. Eringen's nonlocal elasticity theory for wave propagation analysis of magneto-electro-elastic nanotubes. *Advances in nano research* 7(1): 1.
- Eringen, A. C. 1983. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves. *Journal of applied physics* 54(9): 4703-4710.
- Eringen, A. C. ve Wegner, J. 2003. Nonlocal continuum field theories. *Appl. Mech. Rev.* 56(2): B20-B22.
- Fakher, M., Behdad, S., Naderi, A. ve Hosseini-Hashemi, S. 2020. Thermal vibration and buckling analysis of two-phase nanobeams embedded in size dependent elastic medium. *International Journal of Mechanical Sciences* 171: 105381.
- Feng, C., Kitipornchai, S. ve Yang, J. 2017. Nonlinear free vibration of functionally graded polymer composite beams reinforced with graphene nanoplatelets (GPLs). *Engineering Structures* 140: 110-119.
- Ghavanloo, E., Rafii-Tabar, H. ve Fazelzadeh, S. A. 2019. Computational Continuum Mechanics of Nanoscopic Structures, Springer.
- Ghavanloo, E., Rafii-Tabar, H. ve Fazelzadeh, S. A. 2019. Essential concepts from nonlocal elasticity theory. *Computational continuum mechanics of nanoscopic structures*, Springer: 61-86 s.
- Günay, M. G. 2021. Free transverse vibration of nickel coated carbon nanotubes. *International Journal of Structural Stability and Dynamics* 21(06): 2150085.
- Jiwari, R., Gupta, R. ve Kumar, V. 2014. Polynomial differential quadrature method for numerical solutions of the generalized Fitzhugh–Nagumo equation with time-dependent coefficients. *Ain Shams Engineering Journal* 5(4): 1343-1350.

- Jones, J. E. 1924. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106(738): 441-462.
- Jones, J. E. 1924. On the determination of molecular fields.—II. From the equation of state of a gas. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106(738): 463-477.
- Khaniki, H. B. 2018. On vibrations of nanobeam systems. *International journal of engineering science* 124: 85-103.
- Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W. ve Hone, J. 2008. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *science* 321(5887): 385-388.
- Liu, D., Chen, D., Yang, J. ve Kitipornchai, S. 2021. Buckling and free vibration of axially functionally graded graphene reinforced nanocomposite beams. *Engineering Structures* 249: 113327.
- Mehralian, F., Beni, Y. T. ve Zeverdejani, M. K. 2017. Nonlocal strain gradient theory calibration using molecular dynamics simulation based on small scale vibration of nanotubes. *Physica B: Condensed Matter* 514: 61-69.
- Morse, P. M. 1929. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. *Physical review* 34(1): 57.
- Muir, A. I., Chamberlain, L., Elshourbagy, N. A., Michalovich, D., Moore, D. J., Calamari, A., Szekeres, P. G., Sarau, H. M., Chambers, J. K., Murdock, P., Steplewski, K., Shabon, U., Miller, J. E., Middleton, S. E., Darker, J. G., Larminie, C. G., Wilson, S., Bergsma, D. J., Emson, P., Faull, R., Philpott, K. L. ve Harrison, D. C. 2001. AXOR12, a novel human G protein-coupled receptor, activated by the peptide KiSS-1. *J Biol Chem* 276(31): 28969-28975.
- Nazemnezhad, R. 2015. Nonlocal Timoshenko beam model for considering shear effect of van der Waals interactions on free vibration of multilayer graphene nanoribbons. *Composite Structures* 133: 522-528.
- Nazemnezhad, R. ve Hosseini-Hashemi, S. 2014. Nonlocal nonlinear free vibration of functionally graded nanobeams. *Composite Structures* 110: 192-199.
- Nazemnezhad, R., Zare, M. ve Hosseini-Hashemi, S. 2017. Sandwich plate model of multilayer graphene sheets for considering interlayer shear effect in vibration analysis via molecular dynamics simulations. *Applied Mathematical Modelling* 47: 459-472.
- Phadikar, J. ve Pradhan, S. 2010. Variational formulation and finite element analysis for nonlocal elastic nanobeams and nanoplates. *Computational materials science* 49(3): 492-499.
- Rafiee, M. A., Rafiee, J., Wang, Z., Song, H., Yu, Z.-Z. ve Koratkar, N. 2009. Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content. *ACS nano* 3(12): 3884-3890.
- Rao, S. S. 2017. Mechanical Vibrations, in SI Units, Global Edition, Pearson, London.
- Rao, S. S. 2019. Vibration of continuous systems, John Wiley & Sonss.

- Reddy, C. D., Rajendran, S. ve Liew, K. 2006. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene. *Nanotechnology* 17(3): 864.
- Sakhaee-Pour, A. 2009. Elastic properties of single-layered graphene sheet. *Solid State Communications* 149(1-2): 91-95.
- Seifoori, S. ve Khoshgoftar, M. 2019. Impact and vibration response of multi-layered graphene sheets under different striker based on the analytical model and molecular dynamics. *Superlattices and Microstructures* 135: 106249.
- Sharma, S. 2019. Molecular dynamics simulation of nanocomposites using BIOVIA materials studio, lammps and gromacs, Elseviers.
- Shu, C. 2012. Differential quadrature and its application in engineering, Springer Science & Business Medias.
- Stuart, S. J., Tutein, A. B. ve Harrison, J. A. 2000. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *The Journal of chemical physics* 112(14): 6472-6486.
- Tuckerman, M., Berne, B. J. ve Martyna, G. J. 1992. Reversible multiple time scale molecular dynamics. *The Journal of chemical physics* 97(3): 1990-2001.
- Tuna, M. ve Kirca, M. 2017. Bending, buckling and free vibration analysis of Euler-Bernoulli nanobeams using Eringen's nonlocal integral model via finite element method. *Composite Structures* 179: 269-284.
- Van Vinh, P. ve Tounsi, A. 2022. Free vibration analysis of functionally graded doubly curved nanoshells using nonlocal first-order shear deformation theory with variable nonlocal parameters. *Thin-Walled Structures* 174: 109084.
- Verlet, L. 1967. Computer" experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical review* 159(1): 98.
- Wang, M., Xu, Y.-G., Qiao, P. ve Li, Z.-M. 2019. A two-dimensional elasticity model for bending and free vibration analysis of laminated graphene-reinforced composite beams. *Composite Structures* 211: 364-375.
- Wang, Y., Xie, K., Fu, T. ve Shi, C. 2019. Vibration response of a functionally graded graphene nanoplatelet reinforced composite beam under two successive moving masses. *Composite structures* 209: 928-939.
- Zaman, I., Phan, T. T., Kuan, H.-C., Meng, Q., La, L. T. B., Luong, L., Youssf, O. ve Ma, J. 2011. Epoxy/graphene platelets nanocomposites with two levels of interface strength. *Polymer* 52(7): 1603-1611.

7. EKLER

EK-1

-*- coding: utf-8 -*-

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import os

# %% Functions

def Get_Data(path_name, file_name):
    """Get data from Rhino Points file."""
    with open(f"{path_name}/{file_name}.txt", "r") as file:
        lines = file.readlines()

    data = []
    for line in lines:
        temp = [e[1:-1] for e in line.split(",")]

        # Seperate points by color.
        color = [float(temp[3]), float(temp[4]), float(temp[5][:-1])]
        if color == [0,0,0]: # if black
            data.append([1,float(temp[0]),float(temp[1]),float(temp[2])])
        else:
            data.append([2,float(temp[0]),float(temp[1]),float(temp[2])])

    data = np.array(data)

    return data

def Write_Lammps_Data(path_name,file_name,Atoms):

    n_atoms = np.size(Atoms,0)

    x_min = np.min(Atoms[:,1])-10
    x_max = np.max(Atoms[:,1])+10
    y_min = np.min(Atoms[:,2])-10
    y_max = np.max(Atoms[:,2])+10
    z_min = np.min(Atoms[:,3])-30
    z_max = np.max(Atoms[:,3])+30

    with open(f"{path_name}/{file_name}.data", "w") as file:
        file.writelines(f""""#Lammps Data File by GMG

{n_atoms} atoms
2 atom types

{x_min-30:0.3f} {x_max+30:0.3f} xlo xhi
{y_min:0.3f} {y_max:0.3f} ylo yhi
{z_min:0.3f} {z_max:0.3f} zlo zhi

Masses

1 12.0107
2 58.6934

Atoms

""")

    for i,d in enumerate(Atoms):
```

```

file.write(f"{i+1:0.0f}\t{d[0]:0.0f}\t{d[1]:0.5f}\t{d[2]:0.5f}\t{d[3]:0.5f}\n"
)
    print(f"Lammps Data File Written as:\n\t'{file_name}.data'")

    return

def Plot_Data(L,h,data):
    BBox = np.array([[-L/2,0,-2*h],[L/2,0,-2*h],[L/2,0,2*h],[-L/2,0,2*h],[-L/2,0,-2*h],])

    plt.figure()
    ax = plt.axes(projection = '3d')
    ax.set_box_aspect((np.ptp(data[:,1]), np.ptp(data[:,2]),
np.ptp(data[:,3]))) # aspect ratio is 1:1:1 in data space

    ax.plot(BBox[:,0],BBox[:,1],BBox[:,2])
    ax.scatter(data[:,1], data[:,2], data[:,3], s=50*data[:,0], c=data[:,0])

    return

def Trim_Data(data, L, c):
    if c > 0:
        x_min = -L/2 - c
        x_max = L/2 + c
    else:
        x_min = -L/2
        x_max = L/2

    data_trm = []
    for p in data:
        if p[1] >= x_min and p[1] <= x_max:
            data_trm.append(p)

    data_trm = np.array(data_trm)

    return data_trm

def Deform(data,L,h,mode,typ="CC"):

    x_min = -L/2
    x_max = L/2

    data_dfm = []
    if typ == "CC":
        c = 4
        data = Trim_Data(data, L, c )

        BtL = [4.730041, 7.853205, 10,995608]
        bt = BtL[mode-1]
        an = (np.sinh(bt)-np.sin(bt)) / (np.cos(bt)-np.cosh(bt))
        for p in data:
            if p[1] >= x_min and p[1] <= x_max:
                X = (p[1] + x_max)/L
                Wn = np.sinh(bt*X) - np.sin(bt*X) + an*(np.cosh(bt*X) -
np.cos(bt*X))
                p[3] = p[3] + Wn*h
                data_dfm.append(p)
            else:
                data_dfm.append(p)

    if typ == "SS":
        c = 2
        data = Trim_Data(data, L, c )

```

```

        BtL = [np.pi, 2*np.pi, 3*np.pi]
        bt = BtL[mode-1]
        an = 1
        for p in data:
            if p[1] >= x_min and p[1] <= x_max:
                X = (p[1] + x_max)/L
                Wn = np.sin(bt*X)
                p[3] = p[3] + Wn*h
                data_dfm.append(p)
            else:
                data_dfm.append(p)

        data_dfm = np.array(data_dfm)

        return data_dfm

# %% Main
if __name__ == "__main__":
    #to get the current working directory
    path_name = os.getcwd()
    file_name = "Ni_Gr_Ni_Single"
    data = Get_Data(path_name, file_name)

    #mode = 1 2
    typ="CC"
    for mode in range(1,3):
        LL = [30, 60, 90, 120, 150]
        Lh = [1.25, 2, 3, 3.5, 4]

        for i in range(5):
            L = LL[i]
            h = Lh[i]

            file_name_r = file_name + f"_Wn{mode}" + f"_L{L}" + typ

            Atoms = Deform(data, L, h, mode, typ)
            Write_Lammps_Data(path_name,file_name_r,Atoms)

            # Plot_Data(L, h, Atoms)

input("Quit")

```

EK-2

```

#----- Start Up -----
variable      layer_type  string  Double
variable      beam_len   equal   150
variable      mode        equal   2
variable      barcode     string   Run_1

variable      file_name   string
Ni_Gr_Ni_${layer_type}_Wn${mode}_L${beam_len}_CC
variable      out_dir     string   Output

variable      x_lim       equal   v_beam_len/2
variable      y_lim       equal   v_x_lim
variable      x_mid       equal   v_x_lim/2

variable      sim_temp1   equal   50
variable      sim_temp2   equal   300

variable      ts          equal   0.0005

log            ${out_dir}\Log_Last.log

units          metal
atom_style     atomic
atom_modify    map yes

boundary p p p

read_data      Data\${file_name}.data

neighbor       2.5 bin
neigh_modify   delay 5 every 1

pair_style     hybrid    airebo/morse 3.5 1 1  morse 3.75  morse
3.75
pair_coeff     * * airebo/morse CH.airebo-m C C

mass 2  58.6934
pair_coeff     2 2 morse 1 0.4205 1.4199 2.780 # Ni-Ni
pair_coeff     1 2 morse 2 0.4330 3.2440 2.316 # Ni-C

#----- Define Groups -----
group g_all type 1

region        1 block ${x_lim} INF INF INF INF INF
group         g_right region 1

region        2 block INF -${x_lim} INF INF INF INF
group         g_left region 2

if "${mode} == 1" then "region 5 block $(-3) $(3) INF INF INF INF"
if "${mode} == 2" then "region 5 block ${v_x_mid-2} ${v_x_mid+2} INF INF INF"
group         g_mid region 5

group         g_vib subtract g_all g_right g_left
group         g_brdr union g_right g_left

#----- CALCULATIONS -----
timestep      ${ts}

compute       1 all stress/atom NULL
compute       2 all reduce ave c_1[*]

```

```

compute      3 g_mid property/atom x y z
compute      4 g_mid reduce ave c_3[*]

compute      5 g_left property/atom x y z
compute      6 g_left reduce ave c_5[*]

compute      7 g_right property/atom x y z
compute      8 g_right reduce ave c_7[*]

variable     time equal step*dt
variable     Step equal step
variable     Temp equal temp

variable     Etot equal etotal
variable     Ekin equal ke
variable     Epot equal pe

variable     S_xx equal c_2[1]
variable     S_yy equal c_2[2]
variable     S_zz equal c_2[3]

variable     Lm_xx equal c_4[1]
variable     Lm_yy equal c_4[2]
variable     Lm_zz equal c_4[3]

variable     LL_xx equal c_6[1]
variable     LL_yy equal c_6[2]
variable     LL_zz equal c_6[3]

variable     LR_xx equal c_8[1]
variable     LR_yy equal c_8[2]
variable     LR_zz equal c_8[3]

variable     Title string "'(Muir vd.) {time} {Lm_zz} {LL_xx} {LR_xx} {Temp}
{Etot} {Epot} {Ekin} {S_xx} {S_yy} {S_zz}'"

#-----Define DUMPS -----
print -----
print ${file_name}_${barcode}_Start
print -----

thermo       500

dump         2 all xyz    200 ${out_dir}/${file_name}_${barcode}.xyz

fix          6 all print 100 "$(Muir vd.) ${time} ${Lm_zz} ${LL_xx} ${LR_xx}
${Temp} ${Etot} ${Epot} ${Ekin} ${S_xx} ${S_yy} ${S_zz}" file
${out_dir}/Out_${file_name}_${barcode}.txt title ${Title} screen no

#----- Run -----
minimize 1e-1 1e-1 25000 50000

fix          2 g_brdr    move    linear 0 0 0
fix          3 g_brdr    setforce 0 0 0
fix          1 all nvt temp ${sim_temp1} ${sim_temp2} $(100.0*dt)
run 1000

#----- Run -----
unfix 1
fix          1 all nvt temp ${sim_temp2} ${sim_temp2} $(100.0*dt)
run $(800*v_x_lim)

print -----
print ${file_name}_${barcode}_Finish
print -----

```

ÖZGEÇMİŞ

SADRETDİN YAVUZ

ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Yüksek Lisans	Akdeniz Üniversitesi
2020-2022	Fen Bilimleri Enstitüsü, Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı, Antalya
Lisans	Dokuz Eylül Üniversitesi
2012-2017	Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü, İzmir

MESLEKİ VE İDARİ GÖREVLER

AR&GE Mühendisi	DESİRD Tasarım
2021-Devam Ediyor	Antalya
AR&GE Mühendisi	AKE Asansör
2020-2021	Antalya