

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**BOROFEN VE SİLİSEN NANOTÜPLERİN BOYUT ETKİSİ ALTINDA
MATEMATİKSEL MODELİ VE MOLEKÜLER DİNAMİK İLE TİTREŞİM VE
BURKULMA HESABI**

Kadir MERCAN

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ

ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

EKİM 2022

ANTALYA

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**BOROFEN VE SİLİSEN NANOTÜPLERİN BOYUT ETKİSİ ALTINDA
MATEMATİKSEL MODELİ VE MOLEKÜLER DİNAMİK İLE TİTREŞİM VE
BURKULMA HESABI**

Kadir MERCAN

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ

ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

EKİM 2022

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BOROFEN VE SİLİSEN NANOTÜPLERİN BOYUT ETKİSİ ALTINDA
MATEMATİKSEL MODELİ VE MOLEKÜLER DİNAMİK İLE TİTREŞİM VE
BURKULMA HESABI**

Kadir MERCAN
İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ
ANABİLİM DALI
DOKTORA TEZİ

Bu tez 07/10/2022 tarihinde jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ömer CİVALEK (Danışman)
Prof. Dr. Hakan ERSOY
Doç. Dr. Bekir AKGÖZ
Doç. Dr. Mustafa Özgür YAYLI
Doç. Dr. Mehmet AVCAR

ÖZET

BOROFEN VE SİLİSEN NANOTÜPLERİN BOYUT ETKİSİ ALTINDA MATEMATİKSEL MODELİ VE MOLEKÜLER DİNAMİK İLE TİTREŞİM VE BURKULMA HESABI

Kadir MERCAN

Doktora Tezi, İnşaat Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ömer CİVALEK

Ekim 2022; 149 sayfa

Bu tez kapsamında nanometre ölçeğinde olan nanotüplerden karbon nanotüpten sonra en geniş kullanım alanına sahip olan silisen ve borofen bazlı silisyum karbür ve bor nitrür nanotüplerinin titreşim ve burkulma davranışları incelenmiştir. Burkulma ve titreşim analizlerini yapmak için hem matematiksel model oluşturup klasik ve boyut etkisi dahil edilen yerel olmayan elastisite kullanılarak hem de moleküler dinamik simülasyon yöntemleri kullanılarak 5 nanometre uzunluktan 15 nanometre uzunluğa koltuk ve zikzak kiraliteye sahip silisyum karbür ve bor nitrür nanotüpler incelenmiştir. Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotüpler ve bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplere ait analizler yapılmıştır. Klasik sürekli mekanik modelinin kullanıldığı boyut etkisiz durumda Euler-Bernoulli kiriş teorisi, boyut etkisinin dikkate alındığı durumda ise yerel olmayan elastisite teorisi kullanılarak analizler yapılmıştır. Yerel olmayan elastisiteyle titreşim analizleri hem çubuk modeli hem kiriş modeli kullanılarak yapılmıştır. Moleküler dinamik simülasyonları için iki farklı analiz paketi olan LAMMPS ve GROMACS içlerinde ayrı ayrı Lennard-Jones ve Tersoff potansiyelleri kullanılarak gerçekleştirilmiştir. İki mesnetlenme durumu karşılaştırıldığında her iki ucu ankastre mesnetlenmiş durumlarda elde edilen burkulma yüklerinin moleküler dinamik simülasyonu kullanıldığında elde edilen sonuçlardan bir ucu ankastre diğer ucu serbest olan durumlarla karşılaştırıldığı zaman daha uzak olduğu açıkça görülmüştür. Her iki ucun ankastre mesnetlendiği durumlarda genellikle seçilen nanotüp uzunluğu aralığında tek bir nanotüp uzunluğunda elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının birbirine çok yakın elde edildiği, diğer durumlarda ortalama %1 ile %50 arasında fark olduğu görülmüştür.

ANAHTAR KELİMELEER: Bor nitrür nanotüp, Frekans, Moleküler dinamik, Silisyum karbür nanotüp, Stabilitate.

JÜRİ: Prof. Dr. Ömer CİVALEK

Prof. Dr. Hakan ERSOY

Doç. Dr. Bekir AKGÖZ

Doç. Dr. Mustafa Özgür YAYLI

Doç. Dr. Mehmet AVCAR

ABSTRACT

VIBRATION AND BUCKLING ANALYSIS OF BOROPHEN AND SILICEN NANOTUBES UNDER DIMENSIONAL IMPACT USING MATHEMATICAL MODEL AND MOLECULAR DYNAMICS

Kadir MERCAN

PhD Thesis in Civil Engineering

Supervisor: Prof. Dr. Ömer CİVALEK

October 2022; 149 pages

In this thesis, vibration and buckling behavior of silicon carbide and boron nitride nanotubes, which are based on silicene and borophene structures and have the widest use after carbon nanotubes, is investigated. Silicon carbide and boron nitride nanotubes with armchair and zigzag chirality from 5 nanometers to 15 nanometers lengths are investigated by using both mathematical model and molecular dynamics simulation methods to perform buckling and vibration analyses. Mathematical model is used for both classical and size effective analyses. Nanotubes fixed at both ends and nanotubes fixed at one end and free at the other end are analyzed. Analyses are made using the Euler-Bernoulli beam theory in the size effect neglected condition using the classical continuous mechanics model, and using the nonlocal elasticity theory in the case of the size effect is taken into consideration. Vibration analyses with non-local elasticity were performed using both the rod model and the beam model. For molecular dynamics simulations, two different analysis packages, LAMMPS and GROMACS, were performed separately using Lennard-Jones and Tersoff potentials. When the two support cases are compared, it is clearly seen that the results obtained when using the molecular dynamics simulation of the buckling loads obtained in the cases fixed at both ends are farther when compared to the cases with one end fixed and the other free. It has been observed that the mathematical model and molecular dynamics simulation results agree in a specific single nanotube length in the selected nanotube length range in cases where both ends are fixed, while in other cases there is an average difference between 1% and 50%.

KEYWORDS: Boron nitride nanotube, Frequency, Molecular dynamics, Silicon carbide nanotube, Stability.

COMMITTEE: Prof. Dr. Ömer CİVALEK

Prof. Dr. Hakan ERSOY

Assoc. Prof. Bekir AKGÖZ

Assoc. Prof. Mustafa Özgür YAYLI

Assoc. Prof. Mehmet AVCAR

ÖNSÖZ

Nanobilim ve nanoteknolojinin hızlı gelişiminin hemen ardından, bu alandaki yüksek potansiyel araştırmacıların farklı tipteki nanotüpler araştırmaya yönlendirmiştir. İlk sentezlenen ve kullanılan nanotüp olan karbon nanotübünün sınırlarının zorlanması ve sınırlarının aşıldığı yerde süper iletkenlere olan ihtiyacın artması karbonun sınırlarını bazı durumlarda aşan silisen ve borofen nanoyapılarının kullanımının önünü açmıştır. Uçak-uzay gibi yüksek sıcaklık altında çalışması gereken nano ve mikro boyutlu elektro mekanik sistemlerde karbon bazlı yapılar yaklaşık 600 °C sıcaklıklara kadar stabil çalışabilirken silisen bazlı nanoyapılarda bu durum 1600 °C'ye kadar çıkmaktadır. Bu da karbon bazlı nanoyapıların yüksek sıcaklıkta önemli bir alternatifi olarak silisen bazlı yapıları öne çıkarmaktadır. Silisen benzersiz elektronik yapılara, olağanüstü elektriksel ve mekanik özelliklere, üstün termal ve kimyasal kararlılığa ve canlı vücuduna biyo-uyumluluğa sahiptir ve mikroelettronik, nanoelettronik, fotonik, enerji depolama ve gaz-yangın sensörü uygulamaları için uygundur. Biyo-uyumlu malzemeler olarak silisen bazlı nanoyapıların biyomedikalde birçok uygulamaları vardır. SiC, biyomedikal implantlar üzerinde mükemmel aşınmaya dayanıklı ve sağlığı tehlikeye atmayan kaplamalarda kullanılır, ayrıca çok küçük gözenekli SiC filmler yarı geçirgen biyomalzemeler olarak kullanılır. Biyoaktif camla kaplanmış biyomorfik SiC seramikler, geliştirilmiş mekanik ve kimyasal özelliklere sahip diş ve ortopedik implantlar olarak büyük umut vaat etmektedir.

Silisenin karbon bazlı nanoyapılardan önemli bir eksiği ise daha düşük elastisite modülüne sahip olmasıdır. Karbon bazlı yapılara göre %40 civarında daha düşük elastisite modülü silisen bazlı nanoyapıların daha düşük dayanım sergilemesine yol açmaktadır. Bu durumdan dolayı alternatif bir nanoyapı olarak borofen bazlı nanoyapıları Bor atomunun yüksek kararlılığı dikkate alındığında umut vaat edici olmuştur. Elastisite modülleri karşılaştırıldığında borofen bazlı nanoyapıların %80'e kadar daha yüksek elastisite modülüne sahip olması borofeni dikkat çeken bir malzeme haline getirmiştir. Borofenin öne çıkan özellikleri yüksek elektrik iletkenliği, ısı iletkenliği ve hidrojen tutma kapasitesidir. Borofenin son yıllarda popüler hale gelmesindeki en büyük sebep ise yüksek reaktivitesiyle ve düşük yoğunluğuyla lityum-iyon, sodyum-iyon ve çinko-iyon bataryalarda anot olarak yüksek performans sergilemesidir. Son yıllarda yüksek kapasiteli batarya içeren elektrikli arabalar, motosikletler, skuterlerin veya cep telefonlarını, taşınabilir bataryalar gibi neredeyse toplumun tamamının günlük hayatında kullandığı eşyaların aynı zamanda hem güvenli hem de hafif olması istenilmektedir. Borofen bu ihtiyaçları karşılamaktadır ve yüksek performans göstermektedir. Nano ölçeklerdeki devrelerde, zor koşullar altında sürekli stabil halde uzun süre boyunca çalışması beklenen nanotüplerde yapılacak doğru frekans ve stabilite analizlerinin yapılması hayati öneme sahiptir. Bu tezde en zor koşullar altında çalışan borofen ve silisen bazlı nanotüplerin hem matematik model kullanılarak boyut etkisi dahil analizleri hem de farklı potansiyel teorileri kullanarak moleküler dinamik simülasyonu yöntemleriyle elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır.

Bu tezi yazmama ve bu konuda çalışmama olanak veren ve birlikte çalışmaktan onur duyduğum danışman hocam Prof. Dr. Ömer CİVALEK'e, her zaman yanımda olan tecrübelerini ve bilgilerini benimle paylaşan Doç. Dr. Bekir AKGÖZ'e, eğitim-öğretim hayatımda bana hep destek olan ve motive eden aileme ve desteklerinden dolayı Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırmalar Kurumu'na (TÜBİTAK) ve bu çalışmaları mümkün kılan bizden önceki bütün bilim insanlarına sonsuz teşekkür ve şükranlarımı sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	1
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ	iii
AKADEMİK BEYAN	vi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiii
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK TARAMASI.....	3
2.1. Nanotüpler.....	3
2.2. Silisyum Karbür (SiC) Tanesi	6
2.2.1. Kimyasal buhar sentezi yöntemi.....	9
2.2.2. Çözelti bazlı kimyasal sentez yöntemi.....	10
2.2.3. Lazer ile uzaklaştırma yöntemi.....	11
2.3. Silisen	11
2.3.1. Silisyum karbür nanotüpler (SiCNT).....	13
2.4. Borofen.....	17
2.4.1. Bor nitrür yapısı (BN).....	21
2.4.2. Bor nitrür nanotüpler (BNNT).....	22
2.4.3. Bilyalı öğütme/tavlama yöntemi.....	25
2.4.4. Kimyasal buhar sentezi yöntemi.....	26
2.4.5. Lazer ile uzaklaştırma yöntemi.....	27
3. MATERYAL VE METOT	28
3.1. Titreşim Denklemlerinin Elde Edilmesi.....	28
3.1.1. Her iki ucu ankastre mesnetli nanotüp.....	31
3.1.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp	34
3.2. Euler-Bernoulli Teorisiyle Nanotüp Burkulması	36
3.2.1. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest olan nanotüp	37
3.2.2. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp	38
3.3. Boyut Etkili Yerel Olmayan Elastisite Teorisi.....	39
3.3.1. Boyut etkili titreşim	40
3.3.1.1. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp.....	47

3.3.1.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp	49
3.3.2. Boyut etkili burkulma	50
3.3.2.1. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp.....	52
3.2.2.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp	54
3.4. Moleküler Dinamik	56
3.4.1. Tersoff potansiyeli	60
3.4.2. Lennard-Jones potansiyeli	63
3.4.3. Lammps	64
3.4.4. Gromacs	75
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	87
5. SONUÇLAR	131
6. KAYNAKLAR	133
ÖZGEÇMİŞ	

AKADEMİK BEYAN

Doktora Tezi olarak sunduğum “borofen ve silisen nanotüplerin boyut etkisi altında matematiksel modeli ve moleküler dinamik ile titreşim ve burkulma hesabı” adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak yazıldığını belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

07/10/2022
Kadir MERCAN

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

u, v, w	: Sırasıyla x, y ve z doğrultusundaki deplasmanlar
ν	: Poisson oranı
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	: İlgili doğrultudaki normal gerilmeler
$\tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{xz}$	: İlgili doğrultudaki kayma gerilmeleri
G	: Kayma modülü
E	: Elastisite modülü
ω	: Doğal frekans
τ_{kl}	: Gerilme tansörü
ρ	: Kütle yoğunluğu
u_l	: Yer değiştirme vektörü
ε_{kl}	: Şekil değiştirme
$\tau_{kl}(x^l)$	: x^l noktasındaki lokal gerilme tansörü
$\varepsilon_{kl}(x^l)$	: Cismin x^l noktasındaki lineer şekil değiştirme tansörü
μ	: Yerel olmayan teoriye göre boyut etkisi katsayısının karesi
e_0	: Yerel olmayan teoriye göre boyut etkisi katsayısı
σ_{ij}	: ij yönündeki normal ve kayma gerilmesi bileşeni
γ_{ij}	: ij yönündeki açısal şekil değiştirme
U	: Şekil değiştirme enerjisi

Bu tezde ondalık ayıraç olarak nokta işareti (.) kullanılmıştır.

Kısaltmalar

Si	: Silisyum
C	: Karbon
SiC	: Silisyum karbür
BN	: Bor nitrür
B	: Bor
Zn	: Çinko
Li	: Lityum
Ge	: Germanyum
Ni	: Nikel
O	: Oksijen
H	: Hidrojen
HCOH	: Formaldehit
Li-ion	: Lityum-iyon
Zn-ion	: Çinko-iyon
CNT	: Karbon nanotüp
SiCNT	: Silisyum karbür nanotüp
MWCNT	: Çok duvarlı karbon nanotüp
MWSiCNT	: Çok duvarlı silisyum karbür nanotüp
BNNT	: Bor Nitrür Nanotüp
CC	: Ankastre-Ankastre mesnet

CF	: Ankastre-Serbest mesnet
NET	: Yerel olmayan elastisite teorisi
NET R	: Yerel olmayan elastisite teorisi (çubuk)
EB	: Euler-Bernoulli
CT	: Klasik teori
LJ	: Lennard Jones
LAMMPS	: Large Scale Atomic/Molecular Massive Parallel Simulator
GROMACS	: Groningen machine for chemical simulations
AKM	: Atomik Kuvvet Mikroskobu
KPa	: Kilopaskal
MPa	: Megapaskal
TPa	: Terapaskal
nN	: Nanonewton
μm	: Mikrometre
mm	: Milimetre
nm	: Nanometre
eV	: Elektrovolt
Å	: Angstrom
cm	: Santimetre
m	: Metre
N	: Newton
Hz	: Hertz
GHz	: Gigahertz
THz	: Terahertz

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Tipik bir CNT yapısı.....	3
Şekil 2.2. Karbon, bor nitrür ve silisyum karbür nanotüplerin atomik yapıları.....	4
Şekil 2.3. Nanotüplerin gerçek, moleküler dinamik ve sürekli modeli	5
Şekil 2.4. Silisyum karbür tanesindeki atomların dizilişi ve bağları	7
Şekil 2.5. Grafen, silisen ve silisyum karbür yapısı.....	13
Şekil 2.6. SiCNT elde edilişi.....	15
Şekil 2.7. SiCNT kiraliteleri ve yapıları	16
Şekil 2.8. İki boyutlu nanoyapıların karşılaştırmalı bağ uzunluklarının gösterimi.....	20
Şekil 2.9. Borofen ve silisen nanotüplerin gösterimi	20
Şekil 2.10. Bor nitrür yapısı.....	21
Şekil 2.11. Bor nitrür nanotüp yapısı	24
Şekil 3.1. İki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp çizimi.....	31
Şekil 3.2. Her iki ucu ankastre mesnetli nanotübün ilk üç mod şekli.....	33
Şekil 3.3. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotüp	34
Şekil 3.4. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotübün ilk mod şekli ...	36
Şekil 3.5. MD simülasyonun çalışma adımları	58
Şekil 3.6. Silisyum karbür yapısındaki atomlar arası kuvvetler	58
Şekil 4.1. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CC)	87
Şekil 4.2. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=2).....	87
Şekil 4.3. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=3).....	88
Şekil 4.4. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CC)	89
Şekil 4.5. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=2) ..	90
Şekil 4.6. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=3) ..	90

Şekil 4.7. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CC) ..	92
Şekil 4.8. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=2)....	92
Şekil 4.9. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=3)....	93
Şekil 4.10. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CC) ..	94
Şekil 4.11. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=2) ..	95
Şekil 4.12. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=3) ..	95
Şekil 4.13. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CC) ..	96
Şekil 4.14. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=2) ...	97
Şekil 4.15. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=3) ...	97
Şekil 4.16. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CC).....	99
Şekil 4.17. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=2)....	99
Şekil 4.18. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=3)	100
Şekil 4.19. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CC).....	101
Şekil 4.20. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=2).....	102
Şekil 4.21. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=3).....	102
Şekil 4.22. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CC).....	104
Şekil 4.23. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=2).....	104
Şekil 4.24. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=3).....	105
Şekil 4.25. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CF) ..	108
Şekil 4.26. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=2) ..	109
Şekil 4.27. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=3) ..	109

Şekil 4.28. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CF)	111
Şekil 4.29. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=2)	111
Şekil 4.30. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=3)	112
Şekil 4.31. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CF)	113
Şekil 4.32. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)	114
Şekil 4.33. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)	114
Şekil 4.34. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CF)	116
Şekil 4.35. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)	116
Şekil 4.36. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)	117
Şekil 4.37. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CF)	118
Şekil 4.38. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=2)	119
Şekil 4.39. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=3)	119
Şekil 4.40. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CF)	121
Şekil 4.41. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=2)	121
Şekil 4.42. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=3)	122
Şekil 4.43. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CF)	123
Şekil 4.44. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)	124
Şekil 4.45. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)	124
Şekil 4.46. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CF)	126

Şekil 4.47. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=2) 126

Şekil 4.48. Farklı teoriler ve yöntemlerle zikzak SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)..... 127



ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. Farklı kiraliteye sahip SiCNT'lerin geometrik parametreleri.....	16
Çizelge 2.2. Farklı kiraliteye sahip BNNT'lerin geometrik parametreleri	24
Çizelge 3.1. BNNT ve SiCNT'deki atom bağlarına ait moleküler dinamik parametreleri..	63
Çizelge 3.2. BNNT (10, 10)'a ait koordinatların yazıldığı lammps dosyası (L= 6 nm).64	
Çizelge 3.3. BNNT (10, 10)'a ait koordinatların yazıldığı gromacs dosyası (L=6 nm).76	
Çizelge 4.1. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=5 nm)	106
Çizelge 4.2. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=5 nm).....	106
Çizelge 4.3. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=6 nm)	107
Çizelge 4.4. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=6 nm).....	107
Çizelge 4.5. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=10 nm)	107
Çizelge 4.6. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=10 nm).....	108
Çizelge 4.7. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=5 nm).....	128
Çizelge 4.8. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=5 nm)	129
Çizelge 4.9. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=6 nm).....	129
Çizelge 4.10. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=6 nm)	129
Çizelge 4.11. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=10 nm).....	130
Çizelge 4.12. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=10 nm)	130

1. GİRİŞ

Temel olarak bakıldığında dünya üzerinde bildiğimiz her şeyin bileşenleri basittir, çünkü etrafımızdaki tüm malzemeleri oluşturan sadece 118 element vardır. Bu basitliğin yanında aynı zamanda dünya çok karmaşıktır çünkü bu elementlerin farklı yapısal düzenlemelerde birleştirilmesiyle neredeyse sınırsız türde madde (özellikle kristaller ve moleküller) oluşturulabilmektedir.

Günümüzün vazgeçilmezlerinden olan elektronik cihazlarının icadından bu yana, 4. grup yarı iletkenler, modern yaşam interneti, kişisel bilgisayarlar, cep telefonları gibi elektronik aygıtları tanıtan mikro elektronik endüstrisinin temelini oluşturan baskın bir rol oynamıştır. Bununla birlikte, aydınlatma ve ekranları içeren önemli uygulama alanında, 4. grup yarı iletkenlerin rolü, dolaylı elektron bant aralıkları nedeniyle oldukça sınırlıdır.

Silisyum karbür, iki yüzden fazla kristal formuna sahip olduğu ve bazı politiplerinde meteoritlerdeki güneş öncesi tanelerden (güneş öncesi taneler, güneş oluşmadan önce ortaya çıkan küçük katı tanecikler biçimindeki yıldızlararası katı maddelerdir) rastlandığı için benzersizdir. Silisen altyapıya sahip nanoyapılar, yüksek sıcaklık, yüksek frekans ve yüksek güçlü elektronik cihazlara uygulama için üstün elektronik özelliklere sahip bir yarı iletkenidir. Silisen, Silisyum (Si) ve Karbon (C) atomların altıgen biçimde birleşerek oluşturduğu iki boyutlu yapıdır. İki boyutlu olan silisen tabakaların basitçe belirli bir açıyla yuvarlanmasıyla silisen nanotüpler veya silisyum karbür nanotüpler (SiCNT) elde edilir. Ayrıca silisyum karbür, üstün termal ve mekanik özelliklerin yanı sıra düşük yoğunluğa sahip süper sert bir seramiktir. Çevre dostu ve biyo-uyumlu olduğundan enerji alanında, biyomedikal mühendisliğinde ve tıpta birçok potansiyel uygulamaya sahiptir. Hem silisyum hem de karbon yeryüzünde bol miktarda bulunur bu yüzden kütle halindeki silisyum karbür (SiC) ekonomik olarak üretilmektedir. Bu önemli özellik soy metallerden ve nadir toprak elementlerinden oluşan malzemelere kıyasla büyük bir avantajdır.

Nanobilim ve nanoteknolojinin hızlı gelişiminin hemen ardından, araştırmacıların farklı tipteki SiC nanoyapıları ve bunların çeşitli zor koşullar barındıran uygulamaları ilgilerini çekmiştir. Yarı sıfır boyutlu kuantum noktalarından tek boyutlu nanotellere ve nanotüplere kadar birçok SiC nanoyapının yanı sıra yarı iki boyutlu nanoyapıya sahip filmler sentezlenmiş ve incelenmiştir. SiC nanoyapıları, kuantum hapsedme etkisi, geniş yüzey alanı etkisi gibi nanomalzemelere özgü özelliklere sahiptir. Ayrıca nanoyapılı SiC, benzersiz elektronik yapılara, olağanüstü elektriksel ve mekanik özelliklere, üstün termal ve kimyasal kararlılığa ve canlı vücuduna biyo-uyumluluğa sahiptir ve mikroelektronik, nanoelektronik, fotonik, enerji depolama ve gaz-yangın sensörü uygulamaları için uygundur.

Biyo-uyumlu malzemeler olarak SiC nanoyapılarının biyomedikalde birçok uygulamaları vardır. SiC, biyomedikal implantlar üzerinde mükemmel aşınmaya dayanıklı ve sağlığı tehlikeye atmayan kaplamalarda kullanılır, ayrıca çok küçük gözenekli SiC filmler yarı geçirgen biyomalzemeler olarak kullanılır. Biyoaktif camla kaplanmış biyomorfik SiC seramikler, geliştirilmiş mekanik ve kimyasal özelliklere sahip diş ve ortopedik implantlar olarak büyük umut vaat etmektedir.

SiC yapısının birçok politipi vardır ve her politipin kendi kristal yapısı ve kendine has yüzey yapısı vardır. SiC'deki yüzey atomları, Si-Si bağları, C-C bağları, çift veya üçlü bağlar oluşturarak veya yabancı atomlarla bağ kurarak kısmi oluşan bağları sonlandırmak için bağlanma yapılarını değiştirmektedir. Öte yandan, SiC, iki elementten oluşan bir yarı iletken ve yüzeydeki hem silikon hem de karbon atomları, farklı yüzey kimyasal yapıları üretmek için hidrojen ve oksijen gibi çeşitli elementlerle reaksiyona girebilir. Bu nedenle incelenecek olan her SiC örneği, elektriksel ve optik özelliklerini etkileyen oldukça karmaşık ve farklı yüzey yapılarına sahip olabilir. Bazı yüzey kusurları, SiC tabanlı elektronik cihazların performansını önemli ölçüde değiştirebilir ve bu nedenle SiC yapısının yüzey yapıları üzerinde kapsamlı araştırmalar yapılmıştır. Bu nedenden dolayı moleküler dinamik yöntemiyle yapılacak olan analizler her örnek için farklı atom sıralamaları ile yapılacağından gerçeğe daha yakın sonuçlar elde edilecektir.

SiC, yüksek sertlik, düşük yoğunluk, yüksek termal kararlılık, iyi radyasyon direnci ve biyolojik uyumluluk gibi üstün özelliklere sahip benzersiz bir geniş bant aralıklı yarı iletkenidir. Ayrıca, SiC nanokristaller, görünür ve UV'ye yakın bölgeleri kapsayan ayarlanabilir ve güçlü lüminesans gösteren ayarlanabilir enerji boşluklarına sahiptir. Bu nedenlerden dolayı SiC nanoparçacıkları çok büyük uygulama potansiyeline sahiptir.

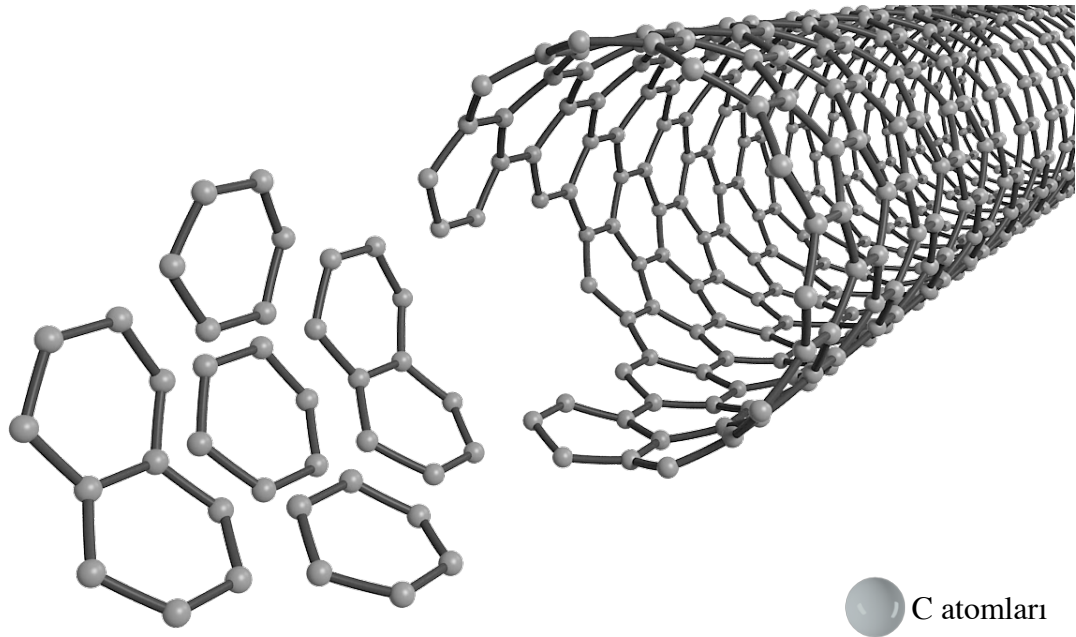
Borofen, lityum-iyon bataryalarda bir anot malzemesi için tüm gereksinimler olan metal iyon depolama, hızlı atomik difüzyon ve elektrik iletimi için potansiyel uygulamalarını gösteren bir morfoloji ve metalik özellikler göstermektedir. İki boyutlu (2D) malzemeler, yüksek yüzey-hacim oranı ve hacimli muadillerine kıyasla benzersiz elektronik özellikleri nedeniyle dikkat çekmiştir. Borofen hakkında yapılan çalışmalar yaklaşık 30 yıl öncesine dayansa da borofenin gerçek potansiyelinin anlaşılmasıyla birlikte borofenle ilgili son yıllarda hızla artan çalışmalar mevcuttur. Borofenin öne çıkan özellikleri yüksek elektrik iletkenliği, ısı iletkenliği ve hidrojen tutma kapasitesidir. Borofenin son yıllarda popüler hale gelmesindeki en büyük sebep ise yüksek reaktivitesiyle ve düşük yoğunluğuyla lityum-iyon, sodyum-iyon ve çinko-iyon bataryalarda anot olarak yüksek performans sergilemesidir. Son yıllarda yüksek kapasiteli batarya içeren elektrikli arabalar, motosikletler, skuterlerin veya cep telefonlarını, taşınabilir bataryalar gibi neredeyse toplumun tamamının günlük hayatında kullandığı eşyaların aynı zamanda hem güvenli hem de hafif olması istenilmektedir. Borofen bu ihtiyaçları karşılamaktadır ve yüksek performans göstermektedir.

Bu tez kapsamında karbon nanotüplerin keşfinden sonra endüstrinin ihtiyacı yönünde geliştirilmiş olan borofen ve silisen tabanlı nanotüplerin boyut etkisi altında titreşim ve burkulma hesaplarının yanı sıra iki farklı potansiyel hesaplama yöntemi kullanılarak bu iki farklı potansiyelin de iki farklı moleküler dinamik simülasyonu paketinde kullanılmasıyla elde edilen sonuçlar ile karşılaştırılmıştır.

2. KAYNAK TARAMASI

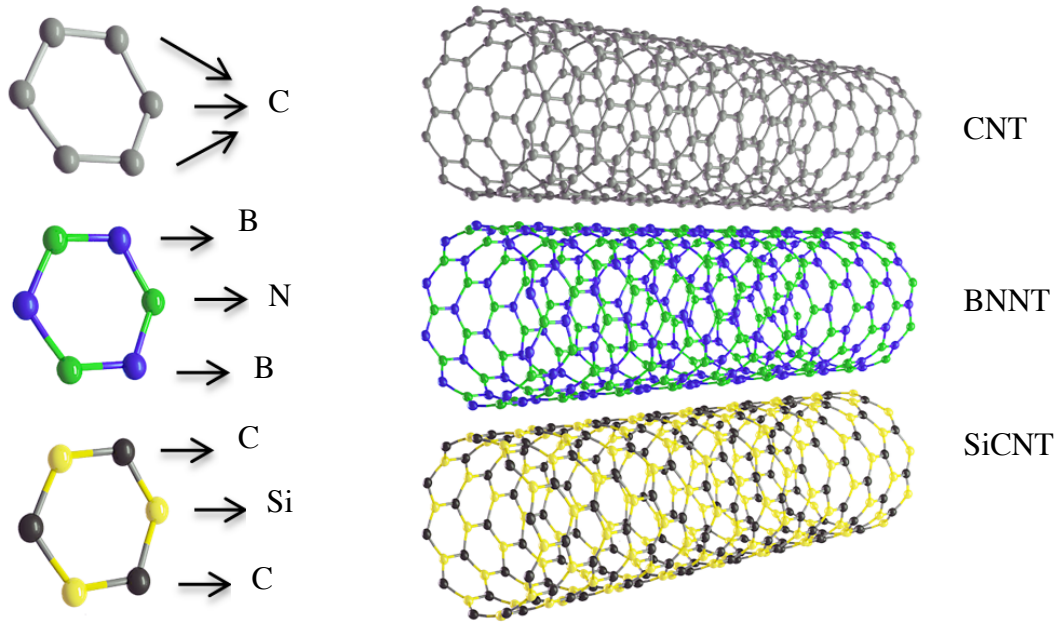
2.1. Nanotüpler

1985 yılında 60 köşesi, 12'si beşgen ve 20'si altıgen olmak üzere 32 yüzü olan çokgen C_{60} allotropu olan Buckminster fullerinin keşfiyle yeni karbon formları araştırılmaya başlanmıştır (Kroto vd. 1985). Bir sonraki büyük keşif, kenarları birbirine bağlı olarak sarılmış grafen tabakasından oluşan bir yapı olan karbon nanotüpler (CNT) olmuştur (Iijima 1991). Bu silindirik yapılar öncesinde bilinen malzemelerden çok üstün hem elektronik hem de mekanik özellikleri için geniş çapta araştırılmıştır. Mekanik olarak, geleneksel karbon fiberlerden daha güçlü oldukları ve aynı zamanda oldukça esnek oldukları gösterilmiştir (Ajayan ve Iijima 1992; Chernozatonskii 1992a, 1992b; Gibson 1992; Iijima vd. 1992). Başlangıçta nanotüpler ark boşaltma yöntemi kullanılarak üretilmiştir. Ark boşaltma yöntemi uygun bir soy gaz içinde iki grafit elektrot arasındaki bir boşluktan doğru akım geçirmeye prensibine dayanmaktadır. Bu yöntem yardımıyla CNT kabuğunun içinde eşmerkezli olarak toplanmış, azalan yarıçaplı bir dizi nanotüpten oluşan çok duvarlı karbon nanotüpler (MWCNT) üretilmiştir (Ebbesen ve Ajayan 1992). Üretim sürecine metal katalizör parçacıklarının eklenmesiyle birlikte, MWCNT karbon katot üzerinde oluşturulurken, tek duvarlı yaklaşık 1 nm çapında CNT'yi gaz fazında elde etmek mümkün olmuştur (Iijima ve Ichihashi 1993). Yüksek en boy oranları ve yüzey alanları CNT'yi nanokompozitlerde kullanım için son derece çekici kılmıştır (Coleman vd. 1998; Curran vd. 1998; Schadler vd. 1998). Bu yüksek ilginin sebebi karbon nanotübün çok üstün fiziksel özellikleri ve mikro-nano elektronik endüstrisindeki potansiyel uygulama alanlarının öngörüsüdür. Bu yapılardaki fiziği keşfetmek, modern nanobilim ve nanoteknoloji alanlarının temel yapı taşlarını oluşturmaktadır. Şekil 2.1'de tipik bir CNT yapısı gösterilmiştir. Açıkça görüldüğü gibi mavi kürelerle gösterilen karbon atomlarının altıgen biçimde bir araya gelmesiyle oluşan yapının (grafen) silindirik haline karbon nanotüp denir.



Şekil 2.1. Tipik bir CNT yapısı

Karbon nanotüplerin üretimi ve uygulanma alanlarında gösterdiği üstün performans, karbon dışında diğer elementlerin de deneysel ve teorik çalışmalarının daha da artarak nanotüp yapıları hakkında çalışmalar yaygınlaşmasına sebep olmuştur. Yeni nanotüp arayışında en çok umut vaat eden yapı bor nitrür (BN) olmuştur. Karbon ve BN esaslı malzemeler arasındaki özelliklerdeki benzerliklere dayanarak, BN esaslı nanotüplerin kararlı olabileceğini ve elektronik yapılarını incelenmeye değer olduğu 1994 yılında öne sürülmüştür (Rubio vd. 1994a). Bu çalışmada basit bir Slater-Koster sıkı bağlama şeması uygulanarak tüm BN nanotüplerin yarı iletken malzemeler olduğu bulunmuştur. BN'nin yüksek iyonikliği, bu tüpler ve benzer karbon nanotüpler arasındaki elektronik farklılıkları açıklamada önemli olduğu gösterilmiştir. Bor nitrürün karbon polimorflarıyla benzer yapıları, yani altıgen-düzlemsel (grafit) ve kübik formları (elmas) paylaşır. Bu öngörünün yapılmasından kısa bir süre sonra çok duvarlı 1-3 nm iç çaplara ve 200 nm uzunluğa sahip çok duvarlı bor nitrür nanotüpler (MWBNT) BN dolgu bir tungsten çubuk ve soğutulmuş bir bakır elektrot arasında karbonsuz bir plazma deşarjında sentezlenmiştir (Chopra vd. 1995a). BNNT sentezlendikten sonra üstün mekanik özellikleriyle dikkatleri üzerine çekmeyi başarmıştır. CNT'nin elastisite modülü 1 TPa civarındayken BNNT'nin elastisite modülünün 1.8 TPa değerlerine kadar çıktığı görülmüştür (Cong ve Lee 2018; Wang vd. 2018). Sadece elastisite modülü değil yüksek sıcaklıklara dayanımıyla da BNNT'nin CNT'den daha üstün olduğu gösterilmiştir (Liu vd. 2014).

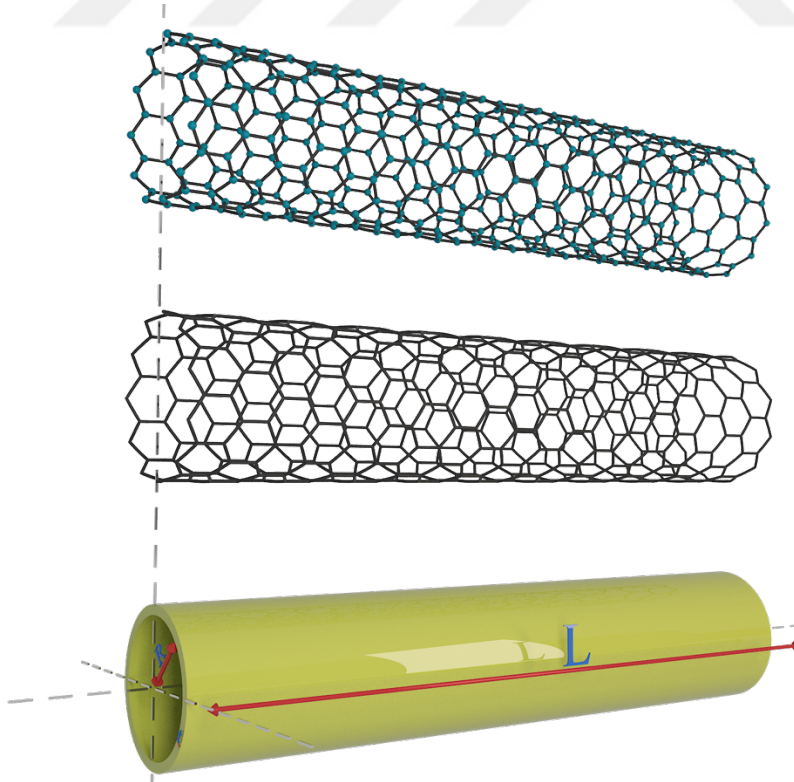


Şekil 2.2. Karbon, bor nitrür ve silisyum karbür nanotüplerin atomik yapıları

Nanotüpler, adından da anlaşılacağı gibi, nanometre boyutunda çaplara ve genel olarak nanometreden mikrometre ölçeklerine kadar değişen uzunluklara sahip olabilen içi boş boru şeklindeki nanoyapılardır. Bir nanotüp, bir tüp oluşturmak üzere sarılmış iki boyutlu tek bir grafen-borofen-silisen tabakasından (tek duvarlı nanotüp) veya üst üste sarılmış çok sayıda tabakadan (çok duvarlı bir nanotüp) oluşabilir. Şekil 2.2’de CNT, BNNT ve SiCNT atom detaylarıyla çizilmiştir.

Mikro ve nano boyutlu sistemler, biyomedikal cihazlar, nano elektromekanik uygulamalar, biyokimyasal amaçlar, mekanik aktüatörler ve nano sensörler gibi modern endüstrilerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Nano ve mikro ölçekli yapılar genellikle kirişler, çubuklar, borular ve plakalar gibi sürekli olarak modellenebilen mekanik sistemler olmuştur. Bu sistemler, ultra-mekanik, termal ve elektriksel özelliklerinden dolayı mikro-elektro mekanik sistemlerde (MEMS) yüksek frekanslı ve yüksek hassasiyetli amaçlarla kullanılmıştır. Nanoteller, nanoköprüler, nanotüpler, mikro ve nanosensörler, atomik kuvvet mikroskobu ve mikro/nano-elektromekanik cihazlar, farklı mühendislik ve endüstriyel uygulamalarda yaygın olarak kullanılmaktadır (Borzi vd. 2022; Li vd. 2022; Verma ve Gupta 2022). Örneğin, atomik kuvvet mikroskobu ve mikro köprüler genellikle nano düzeydeki uygulamalarda frekansı, stresi ve kuvvetleri tespit etmek için kullanılmaktadır. Bu nedenle, bu cihazların titreşim ve stabilite gibi mekanik davranışlarını anlamak tasarım için önem arz etmektedir.

Genel olarak, hesaplama verimliliği ve atom modelleme veya simülasyondan daha basit olması nedeniyle araştırmacılar ve tasarımcılar tarafından bu tür sistemlerin modellenmesi için sürekli ortam mekaniği ve basit modeller kullanılmaktadır. Geçmişten günümüze modelleme için farklı tipte boyuta bağlı süreklilik teorileri geliştirilmiş ve kullanılmıştır. Mikropolar elastisite, Cosserat elastisitesi, çift stres teorisi, gerinim gradyan elastisitesi, yüzey enerjisi teorisi, stres gradyan teorileri gibi nano ve mikrosistem modellemeleri kullanılmış ve halen kullanılmakta olan boyut etkili teorilerdir. Ayrıca, en çok kullanılan boyut etkisini dikkate alan teori Eringen tarafından geliştirilen yerel olmayan elastisite teorisi olmuştur (Eringen 1983). En çok kullanılan boyut etkili teorinin yerel olmayan elastisite teorisi olmasının arkasındaki ana sebep tek parametreyle diğer teorilere göre daha basit bir şekilde boyut etkisini katmasıdır (Eringen 2002).



Şekil 2.3. Nanotüplerin gerçek, moleküler dinamik ve sürekli modeli

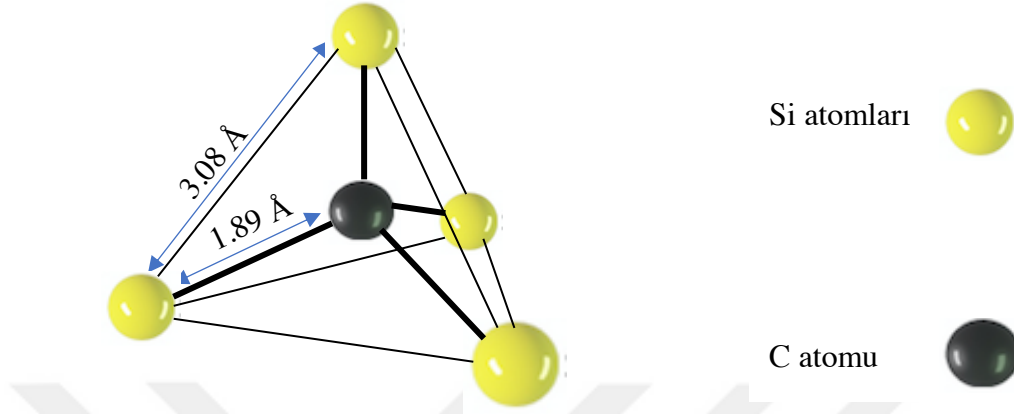
Şekil 2.3'te nanotüplerin yukarıdan aşağıya sırasıyla gerçek görüntüsü, moleküler dinamik simülasyonundaki görüntüsü ve sürekli ortam mekaniğine göre modellenmiş görüntüsü çizilmiştir. Açıkça görüldüğü üzere boyut etkili veya boyut etkisiz sürekli ortam mekaniğine göre modelin gerçek görüntüsünden moleküler dinamik simülasyonundaki görüntüsüyle karşılaştırıldığında uzak bir görüntüye sahiptir. Bu uzak görüntünün sonucu olarak analizlerden elde edilecek sonuçlar da gerçek sonuçlara çok yakın olmayacağı görülmektedir. Bunun sebebi sürekli ortam mekaniğinde atomların tek tek modellenmesi yerine modelin bir bütün olarak ele alınmasıdır.

2.2. Silisyum Karbür (SiC) Tanesi

Si veya Ge gibi diğer 4. grup nanoparçacıkları ile karşılaştırıldığında, SiC nanoparçacıkları üretmek için daha az kimyasal sentez yöntemi geliştirilmiştir (Fan ve Chu 2014). Bunun bir nedeni, SiC kristallerindeki güçlü Si-C bağlarından kaynaklanan çok yüksek erime noktalarına sahip olmaları ve sonuç olarak SiC kristallerinin kimyasal sentezinin tipik olarak ortam basıncında çok yüksek bir sıcaklığa ihtiyaç duymasındır. Şekil 2.4'te SiC tanesindeki atomlar ve bağlanma yapıları gösterilmiştir. Si-Si bağlarının uzunlukları 3.08 Å iken daha kısa ve güçlü olan Si-C bağlarının uzunlukları 1.89 Å'dur (Rao vd. 1998).

SiC, üretilerek elde edilebilirken ayrıca uzayda da bulunabilir. Morfolojileri, elektron mikroskobu ve kütle spektrometrisi ile elemental ve izotopik bileşim analizi ile kapsamlı bir şekilde incelenen bazı meteoritlerde SiC politiplerine ve güneş öncesi SiC tanelerine rastlanmıştır (Jiyang ve Paul 2014). Çeşitli güneş öncesi tane türleri arasında, SiC tanecikleri, minör ve eser elementler de dahil olmak üzere birçok elementi içerdiğinden en çok çalışılan tane olmuştur. Murchison göktaşından rezonant iyonizasyon kütle spektrometrisi ile ekstrakte edilen tekil çevresel SiC tanelerinden belirlenen stronsiyum izotopik bileşimi, orta nötron yoğunluklarında s-prosesi nükleosentezinin tane kökenini doğrulamıştır. Murchison göktaşında sadece 3C-SiC ve 2H-SiC ile birlikte bunların iç içe büyümeleri gözlemlenmiştir. Buradaki yapısal basitliğin, çevresel düşük basınçtan ve buna karşılık gelen düşük SiC yoğunlaşma sıcaklığından kaynaklandığı tahmin edilmektedir (Nicolussi vd. 1998). SiC tanelerinin kökenini araştırmak için çok sayıda çalışmalar yürütülmüştür. SiC göktaşı tanelerinden gözlemlenen baryum izotopik anomalisinin helyum kabuğu kararsızlığına maruz kalan karbon yıldızlarındaki s-süreci nükleosentezinden kaynaklandığı düşünülmektedir (Gallino vd. 1993). Ayrıca, aynı SiC tanelerindeki ksenon, neodimyum ve samaryum anomalileri açıkça s işaretini barındırmaktadır. Bu durum yıldızlararası kökenini desteklemektedir. Başka bir çalışmada ise, Murchison karbonlu kondritinden ekstrakte edilen yıldızlararası SiC taneciklerinde (1-10 µm boyutlarında) karbon, nitrojen, magnezyum, silikon ve titanyumun izotopik bileşimleri gözlemlenmiştir (Hoppe vd. 1994). Birçok çalışma karbon yıldızlarının SiC tanelerinin kaynağı olduğunu öne sürmüş olsa da, diğer araştırmalar meteorlardaki SiC tanelerinin süpernovalardan kaynaklanabileceğini göstermiştir. Murchison karbonlu göktaşından çıkarılan (2-9 µm boyutlarında) beş SiC tane örneklerinde C, N, Si, Mg-Al, Ca ve Ti izotopik bileşimleri iyon mikroprobu ile gözlemlenmiştir (Amari vd. 1992). Ayrıca, Si, C, N, Al, O ve Ti izotopik bileşimleri, bir tip II süpernova kaynağı gerektirir ve nikel çekirdeği de dahil olmak üzere farklı süpernova bölgelerinin heterojen karışımı gerekliliğini savunur. İkincil iyon kütle spektrometrisi kullanılarak, Murchison göktaşından çıkarılan 849 küçük (yaklaşık 1 µm

boyutlarında) tekil SiC tanelerindeki C, N, O ve Si'nin izotopik bileşimleri de gözlemlenmiştir (Hoppe vd. 1996).



Şekil 2.4. Silisyum Karbür tanesindeki atomların dizilişi ve bağları

Nano boyutta olan SiC taneleri, üstün mekanik özelliklerinden dolayı metallerin ve seramiklerin mekanik özelliklerini iyileştirmek için yaygın olarak kullanılmaktadır. 15-20 nm tane boyutuna sahip bir nanokristal Ni zeminli nanokompozitler, ağırlıkça %3'e kadar SiC taneleri ile güçlendirilir (Zimmerman vd. 2002a). Mikrosertlik değerleri, polikristalin Ni-SiC kompozitlerinkinden yaklaşık iki kat fazladır. Hacimce %10.5'e kadar ortalama 400 nm boyutunda SiC taneleri içeren nanokompozitler üzerinde de araştırmalar yapılmıştır. Bu nanokompozitler, mikrometre tane boyutuna sahip geleneksel Ni-SiC kompozitlere göre daha yüksek sertlik, verim ve çekme dayanımı gibi gelişmiş mekanik özelliklere sahiptir. Güçlendirilen malzemeler, SiC içeriğine sahip geleneksel polikristalin Ni'nin dört katına ve geleneksel polikristalin Ni-SiC'nin iki katına kadar çekme mukavemetine sahiptir (Zimmerman vd. 2002b). Ayrıca, aşırı yüksek SiC tanesi katkısı, olası parçacık kümelenmesi nedeniyle malzemenin mukavemeti ve sünekliğini azaltır. Elektrodpozisyon ile hazırlanan Ni-Co/SiC nanokompozit kaplamaları da nano boyuttaki SiC taneleri güçlendirilebilmektedir Ortalama çapı 50 nm olan SiC taneleri yardımıyla nanokompozit kaplamaların mikrosertliği ve aşınma ve korozyon direnci artırılmıştır (Vaezi vd. 2008). SiC nanoparçacıkları, Ni-Co zeminine eşit olarak dağıtılır ve gelişmiş mikrosertlik ve aşınma direncine katkıda bulunur. Ortalama boyutu 50 nm olan SiC nanopartiküller içeren Ni/SiC nanokompozit kaplamalar için, mikrosertlik ve aşınma ve korozyon direnci de SiC nanopartikül konsantrasyonu ile artar. Tane boyutu 15 nm olan, hacimce %5 SiC içeren alüminyum oksit mekanik davranışı araştırılmıştır. Alüminyum oksit için bilinen çekme dayanımı 560 MPa'dan SiC ile güçlendirilmiş alüminyum oksit için 760 MPa'a yükseldiği gösterilmiştir (Zhao vd. 1993). Güçlendirilmiş malzemenin ortalama mukavemeti, 1300 °C'de 2 saat tavlama sona yaklaşık 1000 MPa'a yükselir. Gözlenen güçlenme ve toklaşmanın, işleme kaynaklı sıkıştırma yüzey stresinden kaynaklandığı düşünülmektedir. Hacimce %17 SiC içeren alümina incelenen başka bir çalışmada, nanokompozitin minimum akma hızının saf alüminadan üç kat daha az olduğu ve akma ömrünün ise 10 kat daha uzun olduğu gösterilmiştir (Ohji vd. 1994). Hacimce %10'dan az SiC taneleri ile güçlendirilen

silisyum nitrür zemini, saf silisyum nitrür ile karşılaştırıldığında aynı direnç ve dielektrik özelliklerin gösterirken mekanik olarak güçlenmiş olduğu gösterilmiştir (Sawaguchi ve Toda 1991). SiC gibi bir yarı iletkende bulunan safsızlık, malzemenin elektronik yapısını ve özelliklerini güçlü bir şekilde etkilemektedir. Fazladan bulunan nitrojen ve bor atomları, SiC'deki yaygın görülen ama istenmeyen kontamasyonun sebebidir (Gali 2006). Başka bir çalışmada SiC taneleriyle güçlendirilmiş magnezyum kompozitlerin mikrosertliğinin, artan SiC tanelerinin fraksiyonu ile iyileştirildiğini ve AZ91D'ye kıyasla %75 arttığını göstermiştir (Lan vd. 2004). Epoksi güçlendirilmesi hakkında yapılan başka bir çalışmada ise SiC taneleri, SiC/epoksi kompozitin termal ve mekanik özelliklerini geliştirmede mikrometre boyutundaki partiküllerden üstün olduğu gösterilmiştir. Nanopartikül infüzyonu, polimerdeki çapraz bağlanmayı artırarak kompozitin termal stabilitesini iyileştirdiği görülmüştür. SiC nanoparçacıkları, mekanik özellikleri artırmak için kompozitlerin boşluklarında dolgu maddesi görevi görmüştür (Chisholm vd. 2005). SiC, üretilerek elde edilebilirken ayrıca uzayda da bulunabilir. Morfolojileri, elektron mikroskobu ve kütle spektrometrisi ile elemental ve izotopik bileşim analizi ile kapsamlı bir şekilde incelenen bazı meteoritlerde SiC politiplerine ve güneş öncesi SiC tanelerine rastlanmıştır (Jiyang ve Paul 2014). Çeşitli güneş öncesi tane türleri arasında, SiC tanecikleri, minör ve eser elementler de dahil olmak üzere birçok elementi içerdiğinden en çok çalışılan tane olmuştur. Murchison göktaşından rezonant iyonizasyon kütle spektrometrisi ile ekstrakte edilen tekil çevresel SiC tanelerinden belirlenen stronsiyum izotopik bileşimi, orta nötron yoğunluklarında s-prosesi nükleosentezinin tane kökenini doğrulamıştır. Murchison göktaşında sadece 3C-SiC ve 2H-SiC ile birlikte bunların iç içe büyümeleri gözlemlenmiştir. Buradaki yapısal basitliğin, çevresel düşük basınçtan ve buna karşılık gelen düşük SiC yoğunlaşma sıcaklığından kaynaklandığı tahmin edilmektedir (Nicolussi vd. 1998). SiC tanelerinin kökenini araştırmak için çok sayıda çalışmalar yürütülmüştür. SiC göktaşı tanelerinden gözlemlenen baryum izotopik anomalisinin helyum kabuğu kararsızlığına maruz kalan karbon yıldızlarındaki s-süreci nükleosentezinden kaynaklandığı düşünülmektedir (Gallino vd. 1993). Ayrıca, aynı SiC tanelerindeki ksenon, neodimyum ve samaryum anomalileri açıkça s işaretini barındırmaktadır. Bu durum yıldızlararası kökenini desteklemektedir. Başka bir çalışmada ise, Murchison karbonlu kondritinden ekstrakte edilen yıldızlararası SiC taneciklerinde (1-10 μm boyutlarında) karbon, nitrojen, magnezyum, silikon ve titanyumun izotopik bileşimleri gözlemlenmiştir (Hoppe vd. 1994). Birçok çalışma karbon yıldızlarının SiC tanelerinin kaynağı olduğunu öne sürmüş olsa da, diğer araştırmalar meteorlardaki SiC tanelerinin süpernovalardan kaynaklanabileceğini göstermiştir. Murchison karbonlu göktaşından çıkarılan (2-9 μm boyutlarında) beş SiC tane örneklerinde C, N, Si, Mg-Al, Ca ve Ti izotopik bileşimleri iyon mikroprobu ile gözlemlenmiştir (Amari vd. 1992). Ayrıca, Si, C, N, Al, O ve Ti izotopik bileşimleri, bir tip II süpernova kaynağı gerektirir ve nikel çekirdeği de dahil olmak üzere farklı süpernova bölgelerinin heterojen karışımı gerekliliğini savunur. İkincil iyon kütle spektrometrisi kullanılarak, Murchison göktaşından çıkarılan 849 küçük (yaklaşık 1 μm boyutlarında) tekil SiC tanelerindeki C, N, O ve Si'nin izotopik bileşimleri de gözlemlenmiştir (Hoppe vd. 1996). Mekanik güçlendirmenin yanında SiC taneleri süper iletkenliği arttırmakta ve sıvı süspansiyonların ısı iletkenliğini iyileştirmekte de kullanılmıştır (Xie vd. 2002).

2.2.1. Kimyasal buhar sentezi yöntemi

Kimyasal buhar sentezi yöntemi normal olarak ısıtılan bir zemin yüzeyinde veya yakınında meydana gelen bazı kimyasal reaksiyonlarla katı bir malzemenin bir buhardan biriktirildiği tekniktir. Geleneksel plazma sistemlerindeki aşırı ısınma sorununun üstesinden gelmek için 1983 yılında bir radyofrekans plazma tüpü tasarlanmıştır (Hollabaugh vd. 1983). Bu sistemi kullanarak, çok ince ve daha saf SiC tozları, plazmanın kuyruk alevine radyal silan, metan ve hidrojen enjeksiyonu ile sentezlenebilmektedir. Silisyum karbür tozunun bileşimi, ekstra silikon ve ekstra karbon içerebilmektedir ama üründe her zaman baskın bileşen β -SiC olduğu X-ray kırınımı ile teyit edilmiştir. İletim elektron mikroskobu sentezlenen SiC tanelerinin 10-20 nm boyutları arasında olduğunu göstermiştir. Ayrıca X-ray kristalografisi yardımıyla da 7.5 nm'lik bir alan içerisinde β -SiC kristal yapıda bulunabildiğini göstermiştir. Molibden yüzeyler üzerinde SiC kaplamaları sentezlemek için hipersonik plazma partikül birikimi kullanılmıştır. SiCl₄ (silisyum tetraklorür) ve CH₄ (metan) buharı, biriktirmede öncüler olarak Ar-H₂ (argon-hidrojen) plazmasına enjekte edilir. X-ray kristalografisi yardımıyla SiC kaplamaların tüm katmanlarda yaklaşık 30 nm'lik SiC taneleri içeren katmanlı bir morfolojiye sahip olarak kısmen konsolide edildiğini göstermiştir. Aerosol probu ölçümleri küçük partikül kalma süresinin (yaklaşık 50 μ s) partikül aglomerasyonunu en aza indirdiğini de göstermiştir. X-ray kristalografisi yardımıyla ve Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi yardımıyla SiC kaplamaların amorf ve hidrojenlenmiş olduğunu gösterir ayrıca X-Ray fotoelektron Spektroskopisi yardımıyla da tortunun oksidasyonunun yüzeyle sınırlı olduğunu gösterilmiştir (Rao vd. 1998). 10 nm'den küçük nanokristaller içeren β -SiC tozları, silikon organik öncüllerin düşük basınçta termal bozunmasıyla sentezlenir. Küçük tane ve parçacık boyutu, düşük aglomerasyon ve yüksek kristallik için en uygun koşullar şöyle sıralanabilir: Si(CH₃)₄ (tetrametilsilan) öncüsü, 1000 kPa altında basınç, 660 Pa altında öncü kısmi basıncı ve 1400 K üzerinde reaksiyon sıcaklığıdır (Klein vd. 1998). Tetrametilsilanın daha düşük sıcaklık ve daha düşük basınçta ayrışmasıyla da SiC nanoparçacıkları üretebilir. Sentezde bir mikrodalga plazma reaktörü kullanılarak, SiC taneleri 4 ile 6 nm arasında boyuta sahip ama şekilsiz olarak elde edilebilir. Elde edilen tanelerdeki karbon ve silisyum oranı hidrojen ilavesiyle ayarlanabilir (Lin vd. 2008).

Lazer piroliz, SiC nanoparçacıkları hazırlamak için popüler bir yöntemdir. Bu yöntemde yine kimyasal buhar sentezleme kullanılır. Atımlı karbondioksit lazer kaynaklı ayrıştırmasıyla SiH₄ (silan) ve C₂H₂ (asetilen) değişen konsantrasyonlardaki hidrokarbon ile gaz halindeki bir karışım kullanılarak silikon ve silisyum karbür taneleri üretmek için kullanılır. Çapları 3 ile 3.5 nm arasında olan silisyum karbür nanokümler çeşitli yüzeyler üzerinde biriktirilir, ancak önemli ölçüde daha büyük nanopartiküller reaktörün egzoz hattından toplanır. X-Ray fotoelektron Spektroskopisi ve X-ray kristalografisi yardımıyla, asetilen akış hızının artması ile nanoparçacıklardaki SiC konsantrasyonunun arttığı gözlemlenmiştir. SiC nanoparçacıklarının yanı sıra, sentezde stokiometrik bir SiH₄-C₂H₂ karışımı kullanıldığı zaman yüzeyde önemli miktarda serbest kristal silikon bulunduğu görülmüştür. Saf SiC nanoparçacıkları yalnızca aşırı hidrokarbon ile sentezlenebilir. X-ray kristalografisi, SiC nanoparçacıklarının kristalin β -SiC içerdiğini göstermiştir (Huisken vd. 1999).

Fotopolimer oligoeterakriyalt'e gömülü halde bulunan SiC nano-taneleri içeren kompozit malzemelerin doğrusal olmayan optik özellikleri 2000 yılında yayınlanmıştır. Bu çalışmadaki verilere göre maksimum foto indüklenmiş ikinci harmonik nesil 0.95 SiC altıgenliği için 10.1 pm/V'dir (Kityk vd. 2000). Altıgen SiC bileşenleri, fotoindüklenmiş doğrusal olmayan optik etkide önemli bir rol oynar. SiC nano-tanelerinin elektriksel özellikleri 1500 °C sıcaklıktaki işlemde büyük ölçüde kullanım ihtiyaca göre değiştirilir. SiC nano-taneleri, bu sıcaklığın altında yarı yalıtkan bir karakteristik ve büyük etkili dielektrik sabitiyle olarak elde edilir. Diğer yandan, daha yüksek bir sıcaklıkta hazırlanan SiC nano-taneleri önemli iletkenlik ve daha düşük bir dielektrik sabiti elde edilir (Kassiba vd. 2000).

SiC tanelerinin fotoluminesans özellikleri 2002 yılında Raman saçılması ile araştırılmıştır. Bu çalışmada, nano boyuttaki SiC taneleri, karbon-dioksit lazer pirolizi yardımıyla gaz halindeki bir silan ve asetilen karışımından sentezlenmiştir. Geçirimli elektron mikroskopisi kullanılarak SiC tanelerinin yaklaşık 10 nm boyut aralığına sahip homojen bir bileşime sahip olduğunu ortaya koymuştur. Yüksek çözünürlüklü geçirimli elektron mikroskopisi görüntüleri, her parçacığın, ortalama çapı 2.5 nm olan birkaç kristalitten oluştuğunu ve bu kristalitlerin amorf bir SiC yüzeye gömüldüğünü göstermiştir. Nükleer manyetik rezonans SiC tanelerinde amorf, altıgen ve kübik SiC yapılarının bir arada bulunduğunu göstermiştir. Ayrıca bu çalışmada, en yüksek sıcaklıkta oksitlenen numunenin en yoğun fotoluminesans sergilediği sonucuna varılmıştır. Kızılötesi iletim spektrumu ise parçacık yüzeylerinde Si-Si ve Si-O bağlarının varlığını kanıtlamıştır. Ortalama parçacık boyutunu korumak için düşük, ancak kristal yapıyı iyileştirmek için yeterince yüksek bir sıcaklıkta argonda tavlama sonrasında, büyük ölçüde azalmış fotoluminesans gözlenmiştir. Bu gözlemler, görünür fotoluminesansın SiC tanelerinin amorf kısmından ve oksijenle ilgili yüzey bölgesinden kaynaklandığını sonucunu ortaya çıkarmıştır (Kassiba vd. 2002). Lazerle sentezlenmiş farklı boyut ve yapıya sahip SiC tanelerinden Raman saçılma spektrumları elde edilir. Sayısal olarak simüle edilen spektrum şekli, amorf kümeler için ölçülen spektrumlarla uyum gösterir (Makowska-Janusik vd. 2005). Foton korelasyon spektroskopisiyle suda asılı duran SiC nanoparçacıklarının dağılım davranışı tespit edilir. Stokiyometrik veya silikon bakımından zengin nano tozlardan oluşan SiC süspansiyonu, suda kolayca dağılır ve zamanla stabildir. SiC tanelerinin %95'i izole edilmiş halde elde edilir, bu da silikon bakımından zengin numunelerin tanelerini kaplayan oksitlenmiş tabakanın önemini gösterir. Karbon bakımından zengin toz, tane yüzeyindeki etkisiz grafit karbon tabakası nedeniyle suda kolayca dağılmaz (Boucle vd. 2005).

2.2.2. Çözelti bazlı kimyasal sentez yöntemi

Katalitik yardımı olmayan tek bir öncü içeren tek aşamalı bir reaksiyon, yüksek sıcaklıkta otojenik basınç altında geniş bir yüzey alanına sahip SiC üretebilir. Bu sentezde, trietilsilanın 800 °C'de ayrışması silisyum karbür-karbon nanokompozitini verir ve 1000 °C SiC elde edilir (Pol vd. 2005). Transmisyon elektron mikroskobu, sentezlenen parçacıkların 6-12 nm çaplarına sahip olduğunu ve yüksek çözünürlüklü transmisyon elektron mikroskobu yardımıyla elektron kırınımının kristalin 3C-SiC olduklarını gösterir. Nano döküm ve karbotermal indirgeme yöntemleriyle ayrıca geniş yüzey alanlarına sahip 8-12 nm boyutlu 3C-SiC nanokristaller üretilebilir (Lu vd. 2005). Fenilsiloksan polimerlerinin termal indirgenmesi, boyut kontrollü, oksit gömülü ve

bağımsız SiC nanokristalleri verir. Polimerlerin kompozisyon ayarı, hidroliz ve yoğunlaştırma sırasında fenil triklorosilan ve silikon tetraklorürün nispi miktarları değiştirilerek ayarlanabilir. Yoğunlaştırılmış kopolimerlerin termal indirgenmesi, oksit gömülü SiC nanokristallerini üretir. X-ray kırınımı analizleri ortalama parçacık boyutunun, ilk öncü karışımındaki nispi triklorosilan konsantrasyonuna bağlı olduğunu göstermiştir (Henderson ve Veinot 2009). Fenilsiloksan polimer bileşimi partikül boyutunu kontrol ederek istenilen boyutta ürün alınmasını sağlar. Bağımsız SiC nanokristalleri, karbonun oksidasyonu ve SiO₂ zeminin kimyasal aşındırılmasıyla hazırlanır.

2.2.3. Lazer ile uzaklaştırma yöntemi

Etanol içine batırılmış silikon plakaların lazerle uzaklaştırılması (ablasyonu) β -SiC kuantum taneleri üretmek için kullanılır. Lazer ışıması altında, etanolden ayrılan aktif karbon atomları, Si plakada SiC ve Si nanoparçacıkları üreten aktif silikon atomları ile reaksiyona girer. Sulu bir HF-H₂O₂ çözeltisi içinde durulama yöntemiyle Si partiküllerini çözülür ve yalnızca SiC nanopartikülleri kalır. Hacimce 7 birim Etanol ile 1 birim toluen karışımının kullanılmasıyla daha yüksek oranda β -SiC nanoparçacıkların üretilir. Geçirimli elektron mikroskopisi kullanılarak numunenin birkaç nanometre boyutunda β -SiC nanokristalleri içerdiği gözlemlenmiştir (Yang vd. 2009). Halka benzeri 3C-SiC nanoyapıları benzer bir yöntem kullanılarak hazırlanan numunelerde de gözlemlenmiştir. Saf SiC numunesindeki nanoparçacıkların yaklaşık %15'i halka yapısında olduğu görülmüştür (Yang vd. 2011). Sudaki polikristal 3C-SiC'nin doğrudan lazerle uzaklaştırılması yöntemiyle fotoluminesans SiC nanokristalleri üretilir. Bu yöntem sonucunda geçirimli elektron mikroskopisi kullanılarak nanokristallerin çoğunun 5 nm'den küçük olduğu gözlemlenmiştir (Zakharko vd. 2011).

2.3. Silisen

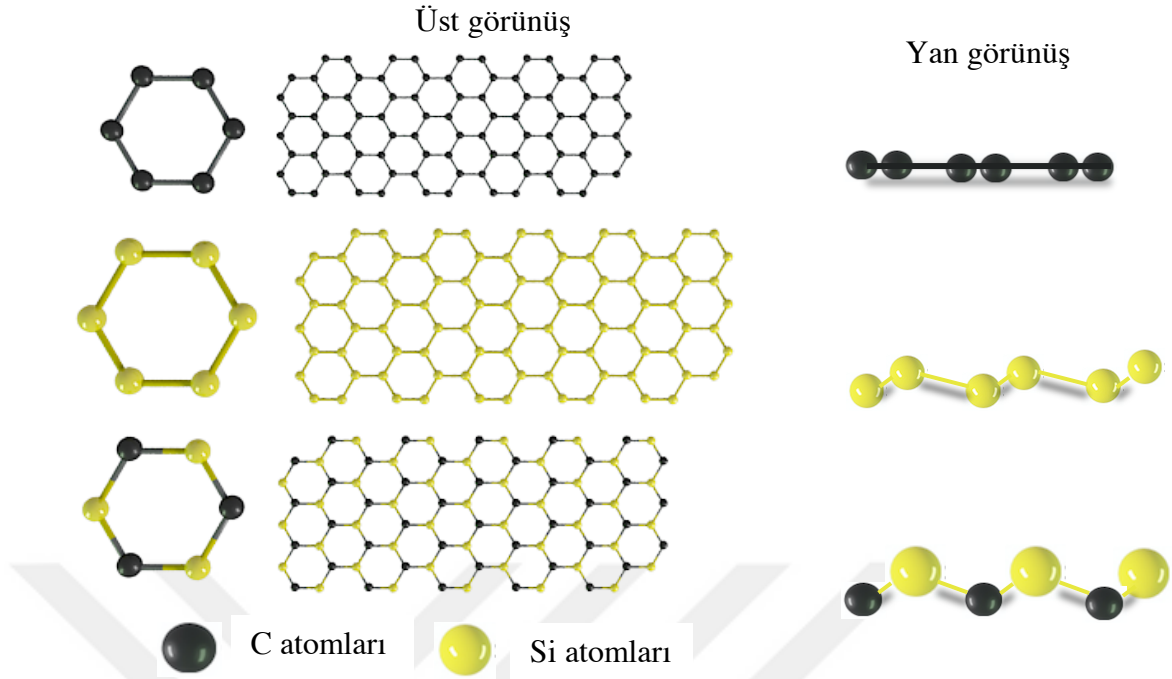
Silisen Si atomlarının birbirlerine bağlanarak oluşturduğu iki boyutlu yapıdır. Silisenin sentezlenmesi 2007 yılına dayansa da teorik olarak 1994'te tahmin edilmiştir (Takeda ve Shiraishi 1994). Bu tahminden ancak 13 yıl sonra Si atomlarından oluşan grafen benzeri levhalar metaller veya boşluksuz yarı iletkenler keşfedilmiş ve silisen olarak adlandırılmıştır (Guzmán-Verri ve Lew Yan Voon 2007). İki boyutlu karbon muadili grafen ile karşılaştırıldığında, silisenin benzer ancak bükülmüş bir petek yapısına (Şekil 2.4) sahip olduğu ve atomların sp² hibritleştirilmiş durumda olmadığı anlamına geldiği belirtilmiştir (Zhang vd. 2015). Silisen, teorik araştırmalara göre grafene benzer özellikler sergiler (Cahangirov vd. 2009). Ayrıca, oldukça simetrik konfigürasyonlarda uygulanan bükülmüş yapı, bazı elektronik uygulamalarda silisen kullanılmasına imkan sağlamaktadır. Silisenin kullanışlı elektro-mekanik özellikleri, nano elektro-mekanik sistemlerde silisli esnek elektroniklerin potansiyel uygulamalarının araştırılmasını sağlamıştır. 2022 yılında yayınlanan bir çalışmada esnek yapıya sahip (bükülebilir) elektronik cihazlarda ara bağlantı olarak ve gerinim sensörlerinde referans piezodirenç olarak silisenin kullanılmasını önerilmiştir (Sahoo vd. 2022). Grafene benzer şekilde, silisenin de fotoelektrik ve fotoelektronik alanında performansı üzerine araştırmalar yapılmıştır. 2020 yılında yayınlanan bir çalışmada hidrojen-silisen/halojen-silisen süperörgüleri olarak adlandırılan, hidrojen ve halojen atomları tarafından dönüşümlü olarak doyurulmuş silisene dayalı yeni bir iki boyutlu yanal üst örgü önerilmiştir. Bu üst örgünün bant hizalaması hesaplanarak, tüm üst örgülerin tip I hizalamasını sergilediği

bulunmuştur. Spesifik olarak, $S_HSCl_{1.5}BrSLs$ (silisen ile güçlendirilmiş süperörgü) bu sistemlerdeki elektronları ve delikleri ayırabilen çok küçük değerlik bant kaymasına ve büyük iletim bant kaymasına sahip olduğu gösterilmiştir (Chen vd. 2020). Ayrıca silisen güneş pili ve paneli üretiminde de umut vaat eden bir malzeme olmuştur. Teorik olarak yapılan bir çalışmada araştırmacılar, küme genişletme yaklaşımıyla birleştirilmiş ilk prensip hesaplamalarını kullanarak kimyasal olarak işlevselleştirilmiş silisenin yapısal ve elektronik özelliklerini sistematik olarak incelemiştir. Bu çalışma sonucunda kimyasal olarak işlevselleştirilmiş epitaksiyel silisene genellikle silikonun sp^3 hibridizasyonu tercihinden kaynaklanan kendiliğinden bir yapısal geçişin eşlik ettiğini, keşfedilen sıralı Si_8P_4 'ün toplu Si'nin ötesinde ince film güneş pili soğurucuları için güçlü bir aday olduğunu göstermiştir (Huang vd. 2013). 2021 yılında yayınlanan başka bir çalışmada ise silisenin hidrojen adsorpsiyon performansı incelenmiştir. Bu çalışmada titanyum atom katkılı tek boşluklu silisen üzerindeki hidrojen adsorpsiyonu, birinci prensip yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemiyle incelenmiştir. Ti atomunun d-orbitallerinin Si atomlarının p-orbitallerine güçlü hibridizasyonu, -6.48 eV enerji ile metal kümelenmesi olmadan silis tabakasına sıkı bir bağ ile sonuçlandığı gösterilmiştir. Ti atom katkılı silisen levhasının içi boş bölgelerindeki çift taraflı hidrojen adsorpsiyonları, yapısal ve elektronik özelliklerle doğrulanmıştır. Sonuç olarak, bu çalışmada Ti atom katkılı silisenin hidrojen depolama uygulamaları için umut verici bir aday olabileceğini ortaya konmuştur (Kalwar vd. 2021). Silisenin diğer iki boyutlu nanomalzemelere göre bir avantajı, silikon bazlı nanomalzemelerle kolayca karışmasıdır. Son zamanlarda yazarlar tarafından polikristal silikon deneyleri de yapılmıştır, bu da silisenin kullanımı için büyük bir potansiyel olduğunu düşündürmektedir (Gao vd. 2018; Khalkhali vd. 2019; Liu vd. 2016).

Kütle halindeki silisyum karbür (SiC) bilinen dayanımı en yüksek, zor koşullarda çalışan elektronik cihazlarda kullanımı uygun olan malzemelerdendir. Teorik olarak silisen yapıya sahip nanotüplerin kuantum boyut etkisiyle silisyum karbürün gösterdiği dayanımla birebir aynı olmasa da benzer özellikte olduğu tahmin edilmiştir. Geniş bant aralığı, yüksek termal iletkenliği ve radyasyon direnci ile SiC , yüksek sıcaklık ve radyasyon ortamlarında kullanım için öne çıkmaktadır (Herzallah vd. 2020). Bu yüzden, yüksek sıcaklıkta, yüksek frekansta ve yüksek güçte çalıştırılabilen nanosensörler ve nanocihazlar gibi uygulamalar için SiC nanoyapıları araştırmacıların dikkatini çekmiştir. Bilindiği gibi malzemelerin özellikleri nano boyuta geçildiği zaman kuantum boyut etkisiyle farklılaşabilmektedir (Hacohen vd. 1998). Silisyum karbür bazlı nanoyapılar farklı fiziksel ve kimyasal özellikler gösterir. Silisyum karbür nanotüpler ve nanoteller gibi farklı nanoyapıları, karbon nanotüplerin keşfinden bu yana geniş çapta ele alınmıştır. Kütle halindeki silisyum karbürün benzersiz özellikleri ve silisyum karbür nanoyapıları, onları nano-elektronik endüstrisinde, biyomedikal mühendisliğinde ve optoelektronikte kullanım için iyi bir seçim haline getirmiştir.

En önemli nano ölçekli yapılardan biri, silisen bazlı nanotüplerden olan silisyum karbür nanotüpleridir. $SiCNT$ 'nin yapısı iki farklı atomdan oluştuğu için $SiCNT$ 'nin yapısı CNT 'lerin yapısından farklıdır.

Şekil 2.5'te yukarıdan aşağıya sırasıyla grafen, silisen ve silisyum karbür yapıları hem üstten hem yandan görünüşleri çizdirilmiştir.



Şekil 2.5. Grafen, silisen ve silisyum karbür yapısı

Teorik çalışmalar SiC nanoyapıların yapısını ve özelliklerini anlamada önemli bir rol oynamaktadır. Ortak yaklaşımlar ve yarı deneysel hesaplamaların yanı sıra moleküler dinamik simülasyonları bu doğru tahminlerde önemli rol oynamıştır. SiC nanoyapılarının birçok önemli özelliği daha bu nanoyapılar elde edilmeden doğru tahmin edilmiştir.

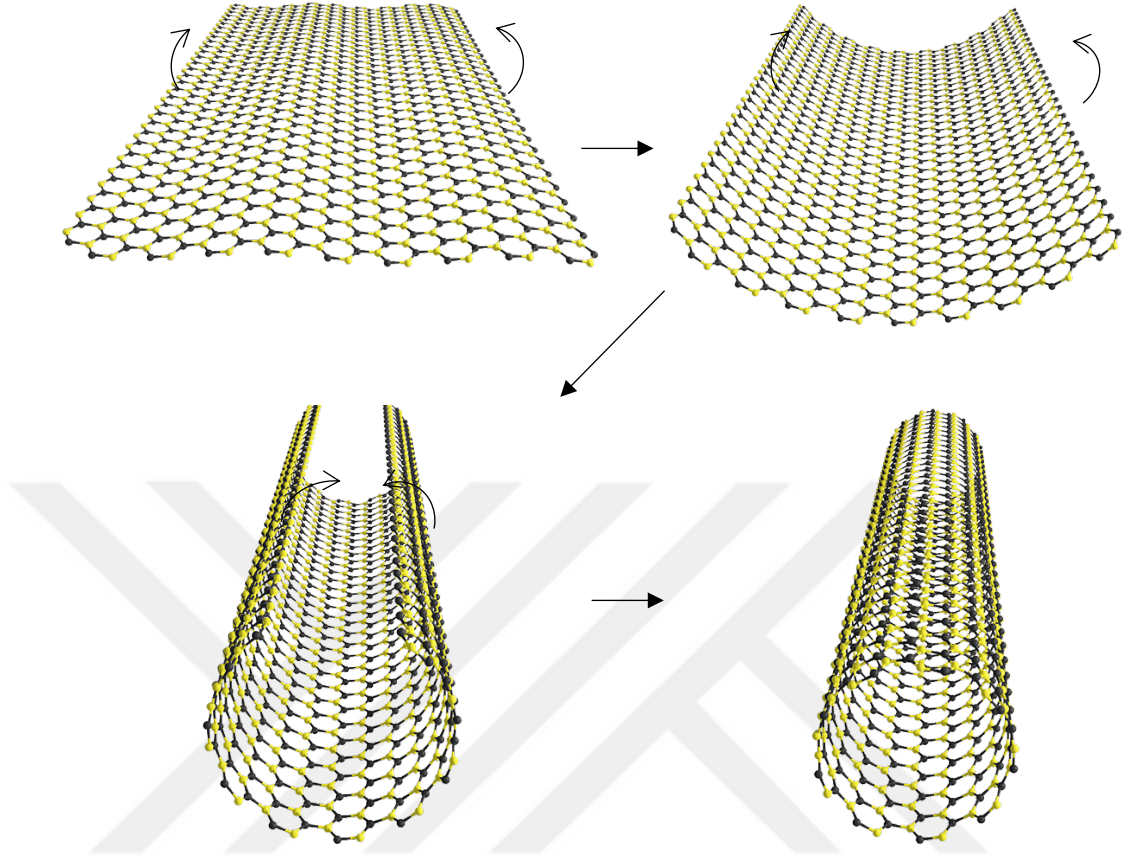
Deneysel çalışmalar veya endüstriyel kullanım için SiCNT sentezlenmesinde bazı zorluklar vardır. İlk olarak, SiCNT yüzeyindeki Si atomları oda sıcaklığında bile kolayca oksitlenmektedir ve bu malzemenin yapısını, elektriksel ve mekanik özelliklerini bozmaktadır. Ayrıca, doğrudan grafitin pul pul dökülmesiyle hazırlanabilen grafenin aksine, doğada gerçek SiCNT çıkarılabileceği grafit benzeri sp^2 yapılı SiC kristali bulunmamaktadır.

2.3.1. Silisyum karbür nanotüpler (SiCNT)

Silisyum karbür nanotüpler silisen yapısına sahip en çok kullanılan nanotüptür. Karbon nanotüplerin keşfinden sonra daha iyi mekanik ve elektronik özelliklere sahip nanotüplerin arayışı içerisinde silisen barındıran nanotüplerin iyi performans göstereceği tahminleri üzerine araştırmacılar karbonla silisenin birleşiminden oluşturulabilecek nanotüp üzerinde çalışmaya başlamıştır. Grafenin termal direnci havada 600 °C'ye kadardır. Bu durum uçak-uzay gibi yüksek sıcaklık altında çalışması gereken elektronik ürünlerde CNT kullanımını sınırlandırmıştır. Bu sorunu çözmek için grafen yerine yeni bir temel nanoyapı olan silisen elde edilmiş ve geliştirilmiştir. Silisen, 1200 °C'ye kadar stabil kalabilen üstün termal dirence sahiptir (Schulz vd. 2013). Silisen, altıgen olarak düzenlenmiş Si atomlarından oluşan bir tabakadır. Üstün termal direncin aksine silisen mekanik olarak grafenden daha zayıf olduğu gösterilmiştir. CNT'nin elastisite modülü ortalama 1 TPa civarındayken bu durum SiCNT için 0.62 TPa civarındadır. Daha uzun

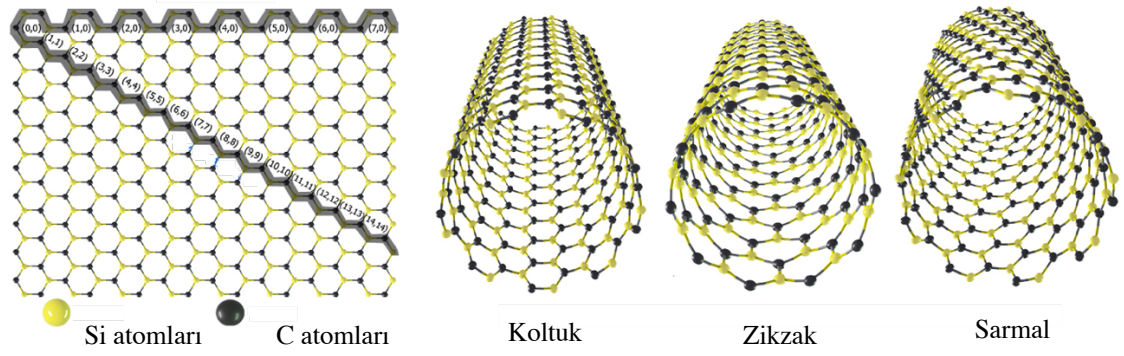
bağ uzunluğu, siliseni borofen ve grafenden daha zayıf yapan daha düşük mekanik özelliklerle sonuçlanmaktadır. Bu durum bu yapılardan elde edilen nanotüpler için aynen geçerlidir. Silisyum ve karbon atomlarının bileşimi ile silisyum karbür levhayı üretilmiştir. NASA Glenn Araştırma Merkezi, karbon ve Si atomlarından silisyum karbür levhalar üretmek için Rensselaer Politeknik Enstitüsü ile işbirliği yapmıştır. Bu işbirliği ile silisyum karbür levha elde etmek için birçok yöntem geliştirilmiştir. Bu işbirliği ile silisyum karbür levha üretilmiştir. Silisyum karbür levhanın termal direnci, nanoyapıyı silisenden daha üstün mekanik özelliklerle 1000 °C'ye kadar stabil kalabilmeyi mümkün kılmıştır. Silisyum karbür nanotüpler silisyum karbür levhaların basitçe kenarlarından yuvarlanması ve iki ucun birleştirilmesiyle elde edilebilmektedir.

Şekil hafızalı sentez, SiCNT sentezlemek için kullanılan en eski yöntemlerden biridir. Bu yöntemde 1200–1350 °C arasında bir sıcaklıkta Si/SiO₂ karışımının ısıtılmasıyla üretilen SiO buharında Si elde edilir, daha sonra SiO ile şekillendirilmiş bir karbon nanotüp şablonu arasındaki yaklaşık 1000–1250 °C'de katı-gaz reaksiyonuyla β -SiC elde edilir. Elde edilen ürün şablon olarak kullanılan karbon malzeme ile aynı şekle sahiptir. SiO buharı ve karbon nanotüpler arasındaki katı-gaz reaksiyonu, iç çapı 30-100 nm arasında olan SiC nanotüpleri üretirken, SiO ve karbon nanolifleri arasındaki reaksiyon, iç çapı 10-80 nm olan SiC nanotüpleri üretir (Pham-Huu vd. 2001). SiC nanotüpler, hem katalizörün kükürt giderme aktivitesini hem de katı kükürt depolama kapasitesini iyileştirir (Nhut vd. 2002). 2005 yılında yapılan bir çalışmada tek fazlı SiCNT, karbon nanotüplerin Si tozu ile 1200 °C'de reaksiyona girmesiyle sentezlenmiştir. Bu çalışmada iletim elektron mikroskopundan alınan görüntülerle hem tek fazlı SiCNT'nin hem de C-SiC koaksiyel nanotüplerin elde edildiği kanıtlanmıştır. İkincil olarak da SiC tabakası ile kaplanmış karbon nanotüpler elde edildiği görülmüştür. Tek fazlı SiC nanotüplerin polikristal olduğu ve yaklaşık 20 nm çapında oldukları gösterilmiştir (Taguchi vd. 2005). Aynı yıl yapılan başka bir çalışmada ise SiC nanotüpler, çok duvarlı karbon nanotüpler ile Si tozu arasında 1350 °C'de akan amonyak içerisinde yüksek sıcaklık reaksiyonu ile sentezlenmiştir. Burada, SiC nanotüplerin karbon dolgu ve açık uçlu olduğu, 0,7-1 μ m arasında uzunluklara ve 45-70 nm arasında çaplara sahip olduğu gösterilmiştir (Borowiak-Palen vd. 2005).



Şekil 2.6. SiCNT elde edilişi

Şekil 2.6’da düzlem halindeki iki boyutlu silisyum karbür tabakasından nanotüp elde etme adımları gösterilmiştir. Görüldüğü üzere iki kenarından basitçe kıvrılarak uçlardaki atomların bağlanması sağlanarak silindirik biçimde elde edilen yapıya silisyum karbür nanotüp denir. Silisyum karbür elde etmenin literatürde yayınlanmış birçok yöntemi vardır. Eğer silisyum karbür tabakası mevcutsa en kolay yöntem Şekil 2.5’te gösterilen kıvrma yöntemidir. Ayrıca bu yöntemden sonra en çok kullanılan yöntem şablon kullanarak SiCNT elde etme yöntemidir. Grafen veya silisyum karbür tabakası farklı açılarda kıvrılarak farklı mekanik ve elektronik özelliklere sahip CNT veya SiCNT elde edilmektedir. Bu farklı kıvrımlara kiralite denir. Kiraliteler (n, m) indisleriyle gösterilir. Kiralitedeki n ve m sayıları, nano tabakanın altıgen yapılarında iki yön boyunca birim vektörlerin numarasını belirtir (Şekil 2.6).



Şekil 2.7. SiCNT kiraliteleri ve yapıları

Şekil 2.7’de farklı kiraliteye sahip SiCNT elde etme kıvrılma açıları gösterilmiştir. Düzlem haldeki tabaka 30 derecelik açıyla kıvrıldığı zaman (n, n) kiraliteye sahip koltuk yapıda nanotüp elde edilmektedir. Eğer bu açı 0 derece olursa $(n, 0)$ kiraliteye sahip zikzak yapıda nanotüp elde edilmektedir. 30 veya 0 dışında herhangi bir açıyla kıvrılmış tabakalarda ise sarmal yapıya sahip nanotüp elde edilmektedir. Çizelge 2.1’de bu tez kapsamında incelenen farklı uzunluklara sahip $(5, 5)$, $(10, 10)$ koltuk ve $(10, 0)$, $(12, 0)$ zikzak silisyum karbür nanotüplere ait çap ve atom sayısını gösteren geometrik parametreler verilmiştir (Ansari vd. 2012).

Çizelge 2.1. Farklı kiraliteye sahip SiCNT’lerin geometrik parametreleri

	Tip	Kiralite	Çap (nm)	Atom sayısı
$L=5 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	400
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	800
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	480
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	576
$L=6 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	480
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	960
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	560
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	672
$L=7 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	560
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	1120
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	680
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	816
$L=8 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	640
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	1280
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	760
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	912
$L=9 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	720
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	1440
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	840
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	1056
$L=10 \text{ nm}$	Koltuk	$(5, 5)$	0.852752	800
	Koltuk	$(10, 10)$	1.705504	1600
	Zikzak	$(10, 0)$	0.99240	960
	Zikzak	$(12, 0)$	1.10910	1152

2.4. Borofen

Borofen (bor tabakası) bor elementinin iki boyutlu düzlem yapıya sahip bir allotropudur. Bor elementinin en kararlıları 10B ve 11B olmak üzere 8B, 10B, 11B, 12B, 13B izotopları vardır. 10B Bor nükleer elemanlarda ve nükleer santrallerde kullanılmaktadır. Nükleer alanındaki öne çıkmasının sebebi yüksek termal nötron tutma özelliğidir. Ayrıca, borofen, lityum-iyon bataryalarda bir anot malzemesi için tüm gereksinimler olan metal iyon depolama, hızlı atomik difüzyon ve elektrik iletimi için potansiyel uygulamalarını gösteren bir morfoloji ve metalik özellikler gösterir (Jiang vd. 2016a). İki boyutlu (2D) malzemeler, yüksek yüzey-hacim oranı ve hacimli muadillerine kıyasla benzersiz elektronik özellikleri nedeniyle dikkat çekmiştir. Borofen hakkında yapılan çalışmalar yaklaşık 30 yıl öncesine dayansa da borofenin gerçek potansiyelinin anlaşılmasıyla birlikte borofenle ilgili son yıllarda hızla artan çalışmalar mevcuttur. Borofenin öne çıkan özellikleri yüksek elektrik iletkenliği, ısı iletkenliği ve hidrojen tutma kapasitesidir. Borofenin son yıllarda popüler hale gelmesindeki en büyük sebep ise yüksek reaktivitesiyle ve düşük yoğunluğuyla lityum-iyon, sodyum-iyon ve çinko-iyon bataryalarda anot olarak yüksek performans sergilemesidir (Huang vd. 2019; Leng vd. 2019). Son yıllarda yüksek kapasiteli batarya içeren elektrikli arabalar, motosikletler, skuterların veya cep telefonlarını, taşınabilir bataryalar gibi neredeyse toplumun tamamının günlük hayatında kullandığı eşyaların aynı zamanda hem güvenli hem de hafif olması istenilmektedir. Borofen bu ihtiyaçları karşılamaktadır ve yüksek performans göstermektedir.

2016 yılı borofenin öne çıktığı yıl olmuştur (Shi vd. 2016; Sun vd. 2016; Wang vd. 2016; Xiao vd. 2016; Xu vd. 2016; Zhang vd. 2016), bir çalışmada araştırmacılar lityum-iyon piller için bir anot malzemesi olarak borofenin potansiyelini araştırmak için moleküler dinamik simülasyonu yöntemini kullanarak borofenin lityum atomuna -1.12 eV'lik bir adsorpsiyon enerjisine sahip olduğu bulunmuştur. Bu enerji adsorpsiyon değeri litiasyon işlemi sırasında iyi bir lityum-borofen stabilitesi sağlamaktadır. Borofenin tamamen litlenmiş fazı $Li_{0.75}B$ ticari grafit anottan (372 mAh g^{-1}) yaklaşık 4 kat daha büyük olan 1860 mAh g^{-1} kapasitesine sahip olduğu gösterilmiştir. Ayrıca aynı çalışmada, oluklu borofenin oluğu boyunca enerji bariyerinin sadece 2.6 meV olduğu bulunmuştur; bu, fosforen (80 meV) ve Ti_3C_2 (70 meV) gibi geniş çapta araştırılan diğer anot malzemelerinden çok daha düşük olduğu bildirilmiştir (Jiang vd. 2016b). Aynı yıl içersinde yayınlanan başka bir makalede borofenin gaz sensörlerinde potansiyel kullanımı araştırması yapılmıştır. Bu çalışmada belirtildiği gibi karbon nanotüpler ve grafen, birkaç öldürücü gaza karşı büyük hassasiyet gösterirerek sensörlerde kullanılabilir olmasının yanında formaldehit (HCOH) gibi bazı aşırı toksik kimyasalları tespit edemediği belirtilmiştir. Burada, HCOH tespiti için bir sensör olarak B_{36} borofen tabakasının potansiyel uygulamasını incelenmiştir. B_{36} borofenin elektriksel iletkenliğinin, HCOH moleküllerinin ortamda var olduğunda önemli ölçüde arttığı ve böylece bir elektrik sinyali ürettiği tahmin gösterilmiştir. Adsorplanan HCOH moleküllerinin sayısı artırıldığında alınan elektrik sinyalinin de arttığı gözlemlenmiştir, bu da bu sensörün HCOH gazının konsantrasyonuna (veya basıncına) duyarlı olduğunu göstermektedir (Kootenaei ve Ansari 2016). Yine 2016 yılında borofen yapısının elektronik, optik ve mekanik özellikleri araştırılmıştır (Le vd. 2016; Lherbier vd. 2016; Mortazavi vd. 2016; Mukherjee ve Thilagar 2016). Başka bir çalışmada 3d geçiş metallerinin atomlarının 5.9-8.3 eV arasında değişen yüksek bağlanma enerjileri ile borofen üzerinde adsorbe edilebileceğini göstermiştir. İlginç bir şekilde, orijinal olarak manyetik olmayan borofen, Ti, V, Cr, Mn ve Fe atomları adsorbe edildiğinde ve manyetik

momentlere geiş metalleri atomları hakim olduėunda ferromanyetik olma eğiliminde olduėu gösterilmiştir. Bu da borofenin manyetik özelliklerinin, spintronik ve nanoelektronikte umut verici uygulamalara sahip olabilecek 3d geiş metalleri atomlarının adsorpsiyonu yoluyla etkili bir şekilde ayarlanabileceėini göstermektedir (Li vd. 2016). Başka bir alıřmada ise arařtırmacılar, B₃₆ borofen tabakasının yüzeyinde amonyanın ayrıřmalı adsorpsiyonunu arařtırmıştır. Bu alıřmada N–H baėının oda sıcaklığında bile B₃₆'nın kenarlarında kırılabilceėi gösterilmiştir (Rostami ve Soleymanabadi 2016).

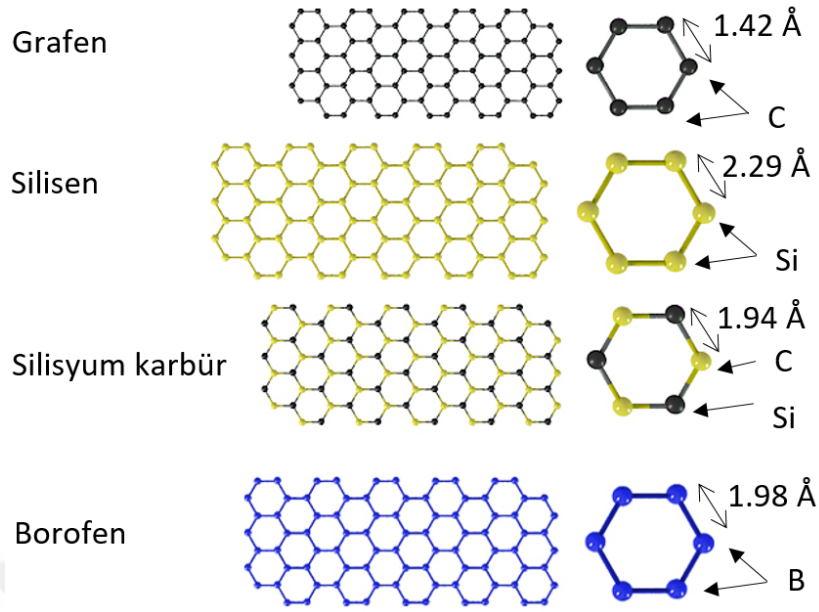
2017 yılında yapılan arařtırmalar genellikle borofenin yeteneklerini keřfetmek ve potansiyel kullanım alanlarını tahmin etmek üzerine olmuřtur. Chen ve ekibi hem teorik hem deneysel yöntemlerin kullanıldıėı alıřmalarında α -MoB₂ (molibden-diborid) katalitik aktivitesinin özellikle büyük akım yoğunluklarında, yüksek iletkenliğinden ve iyi kütle taşıma özelliėinden kaynaklandıėını göstermiştir (Chen vd. 2017). Başka bir alıřmada ise borofenin elektron verme eğilimini incelenmiř, tek halojen atomlarının (F, Cl, Br, I) borofen ile etkileřimi analiz edilmiştir. Adsorpsiyon ve oluřum enerjisinin, atomlar arası mesafenin, yük aktarımının, difüzyon engellerinin ve halojen atomunun tipiyle baė karakterinin deėiřimi arařtırılmıştır. Ayrıca bu alıřmada halojen moleküllerinin (F₂, Cl₂, Br₂, I₂) adsorpsiyonu, ayrıřma olasılıėı da dahil olmak üzere incelenmiştir (Khanifaev vd. 2017). Borofenin etanol tespit edebilme performansı üzerine yapılan bir arařtırmada etanol adsorbe edilmiř borofen nanotabakasının durum yoğunluėundaki ve enerji bandı yapısındaki varyasyon, izole edilmiř borofen tabakasıyla karřılařtırılmış ve etanol molekülünün adsorpsiyonunu doėrulanmıştır. Bu alıřmada elde edilen bulgular borofen nano tabakanın bir etanol sensörü olarak kullanılabileceėini doėrulamıştır (Nagarajan ve Chandiramouli 2017). Başka bir alıřmada ise borofendeki kafes dinamik ve mekanik özellikleri belirlemek için moleküler dinamik simülasyonları kullanılmıştır. Bu moleküler dinamik simülasyonları için temel bileřenler, borofenin düşük enerjili üçgen yapı ile etkileřimi için geliřtirilen iki verimli ampirik potansiyeldir. Bu alıřmada borofenin fonon dispersiyonu yardımıyla deėerlik kuvvet alan modeli sunulmuřtur. Deėerlik kuvvet alanı modeli lineer bir potansiyeldir, bu nedenle borofende lineer büyüklüklerin hesaplanması için oldukça etkili olduėu gösterilmiştir. Ayrıca bu alıřmada parametreleri deėerlik kuvvet alanı modeline dayalı olarak türetilen Stillinger-Weber potansiyeli de sunulmuřtur. Stillinger-Weber potansiyeli, borofen içinde doėrusal olmayan fiziksel veya mekanik miktarların moleküler dinamik simülasyonlarında uygulanabileceėi gösterilmiştir (Zhou ve Jiang 2017).

2018 yılında borofen hakkında yapılan arařtırmalar, borofenin gaz sensörlerinde kullanımı üzerine yoğunlařmıştır. Sülfür dioksit tespit edilmesi üzerine yapılan bir teorik alıřmada yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi kullanılmıştır. Adsorpsiyon iřlemlerinin elektronik davranıřını anlamaya yardımcı olmak için durum yoğunluėu da analiz edilmiştir. Sonuçlar, borofenin SO₂ molekülüne karřı iyi bir adsorpsiyon kabiliyetine ve kapasitesine sahip olduėunu ve rahat adsorpsiyon konfigürasyonuna göre yedi moleküle kadar kimyasal adsorpsiyon ile borofen yüzeyinde adsorbe edilebileceėi gösterilmiştir (Cui vd. 2018). Başka bir alıřmada ise arařtırmacılar, borofenin NH₃, NO, NO₂ ve CO gazlarını adsorbe yeteneėi arařtırılmıştır. Her durumda, adsorpsiyon enerjisinin yüksek olduėu ve borofenin belirgin kırıkřıklıklar geliřtirdiėi gösterilmiştir. Gaz sensörü olarak borofenin yüksek performansı, dengesiz Green fonksiyonu aracılıėıyla malzemenin taşıma özelliklerini simüle ederek gösterilmiştir (Huang vd. 2018). Başka bir alıřmada ise yoğunluk fonksiyonel teori hesaplamalarını kullanarak alkali metal eklenmiř ve kusurlu iki boyutlu borofen tabakasında hidrojen depolamasının

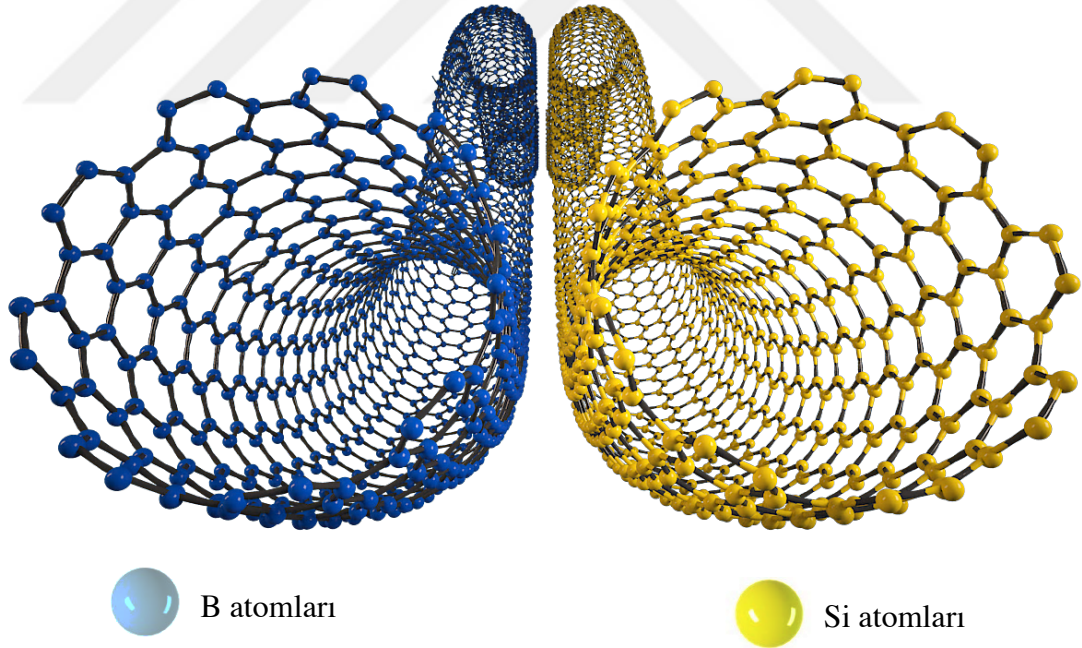
kapsamlı bir çalışması sunulmuştur. Hidrojenin saf borofen üzerinde adsorpsiyonu, H_2 başına -0.045 eV'lik bir bağlanma enerjisi ile zayıf bulunurken, metal ekleme ve nokta kusurları adsorpsiyon gücünü önemli ölçüde arttırdığı gösterilmiştir. İlginç bir şekilde, tek bir H_2 molekülü için Li, Na ve Ca atomları eklenmiş borofene göre bağlanma enerjisinin büyüklüklerinin H_2 başına sırasıyla -0.36 , -0.34 ve -0.12 eV'a kadar arttığı bulunmuştur. Ayrıca, borofen zemin üzerindeki bir H_2 molekülünün bağlanma enerjisi, fosforeninkine benzer şekilde H_2 başına sadece -0.063 eV iken, bağlanma enerjisi H_2 başına -0.69 eV'a yükseldiği gösterilmiştir. Önemli yük birikimi ve tükenmesinin H_2 moleküllerinin güçlü polarizasyonuna neden olduğu ve Na, Li ve Ca eklenmiş borofen gravimetrik yoğunlukları sırasıyla %9.0, %6.8 ve %7.6 olduğu sunulmuştur. Bu sonuçlar, borofenin metal eklenmeleri ve nokta kusurları ile dikkatli bir şekilde tasarlanarak H_2 depolaması için etkili bir zemin olabileceğini göstermiştir (Halder vd. 2018).

Son yıllarda yapılan çalışmalarda ise borofenin stabilitesi, farklı borofen yapıları için mekanik ve elektronik özelliklerinin araştırılması hakkında olmuştur. 2019 yılında yayınlanan bir çalışmada borofenin anot malzeme olarak Zn-ion bataryalarda kullanımı hakkında olmuştur. Zn atomunun tek tabakalı borofen tabakasına karışmasını araştırmak için ilk prensip hesaplamalarını kullanılmıştır. İlk önce daha zayıf bağlanma yerlerini ve buna karşılık gelen bağlanma enerjilerini tanımlanarak borofen zemin ve Zn iyonları arasında yaklaşık 0.79 eV değerinde zayıf bir bağlanma enerjisi sergilediği gösterilmiştir. Ayrıca, Zn içeriğinin artmasıyla bağlanma enerjisi azaldığı ve avantajları arasında küçük difüzyon enerji bariyerleri ve düşük ortalama interkalasyon voltajları tespit edildiği belirtilmiştir. Zn-ion bataryalar için borofen levhada depolama kapasitesinin yüksek bir değer sayılabilecek 433 mAhg^{-1} olduğu gösterilmiştir. Sonuç olarak borofen tabakasının yüksek güç yoğunluğuna sahip Zn-ion piller için çekici bir anot malzemesi olabileceğini gösterilmiştir (Leng vd. 2019). 2020 yılında yayınlanan bir çalışmada ise borofenin Li-ion bataryalarda kullanımı için grafen heteroyapısıyla kullanılabileceği öne sürülmüştür. Bu çalışmada İlk prensip hesaplamaları kullanılarak tek bileşenli borofenin stabilitesini geliştirmek için van der Waals heteroyapıları stabilize etmek için alternatif bir zemin olduğunu gösterilmiştir. Borofen grafen heteroyapısı yüksek bir Li (-2.959 eV) adsorpsiyon enerjisine ve yüksek bir teorik özgül kapasiteye (1469.35 mA h/g) sahip olduğu gösterilmiştir. Borofen grafen heteroyapısının düşük bir difüzyon bariyerine (0.613 eV) sahip olduğunu ve bu özelliklerin borofen grafen heteroyapısı katmanlar arası mesafesi ile değiştiği, teorik spesifik kapasitenin $1763.22 \text{ mA h/g'ye}$ yükseldiği ve difüzyon bariyeri 0.353 eV'ye düştüğü gösterilmiştir. Sonuç olarak borofen grafen heteroyapısının umut verici bir anot malzemesi olduğu ve ara katman aralığının ayarlayarak elektrokimyasal performansın değiştirilebileceği teorik olarak gösterilmiştir (Yu vd. 2020).

Şekil 2.8'de iki boyutlu grafen, silisen, silisyum karbür, borofen nanoyapıları ve detayları gösterilmiştir. Atomlar arasındaki bağ uzunlukları farklı malzemeler arasındaki mekanik özellikler arasında farka neden olmaktadır. Şekil 2.9'da yanyana borofen ve silisen nanotüpler çizilmiştir.



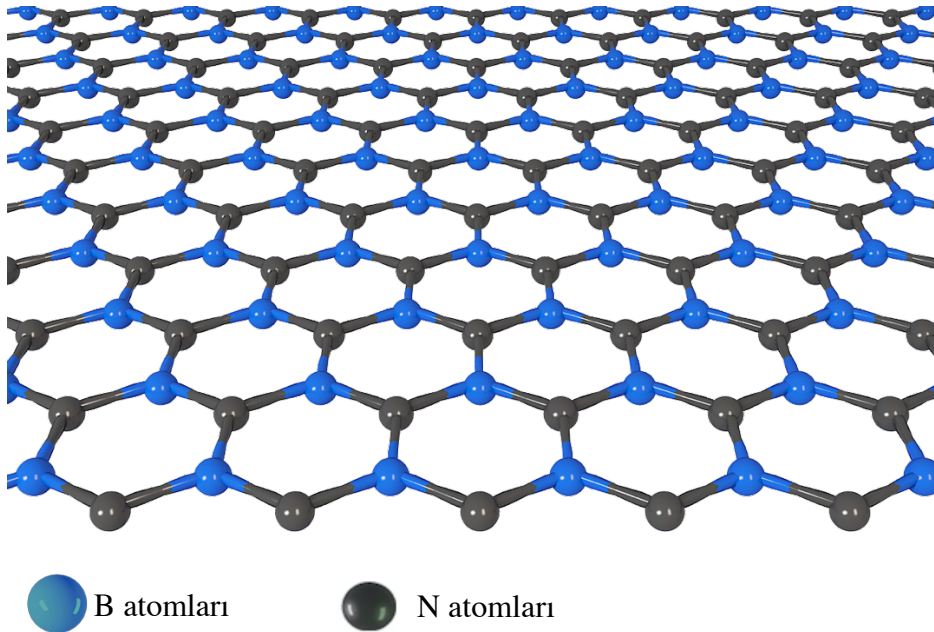
Şekil 2.8. İki boyutlu nanoyapıların karşılaştırmalı bağ uzunluklarının gösterimi



Şekil 2.9. Borofen ve silisen nanotüplerin gösterimi

2.4.1. Bor nitrür yapısı (BN)

Bor nitrür yapısı iki boyutlu bor ve nitrojen atomlarının altıgen biçimde bağ kurarak birleşmesiyle elde edilmektedir ve grafinin yapısal analoglarıdır (Şekil 2.10). Bor bazlı nanomalzemeler ile karbon muadilleri arasındaki temel fark, atomlar arasındaki bağların yapısıdır. Karbon nanomalzemelerdeki C-C bağı saf bir kovalent karaktere sahipken, B-N bağları sp^2 hibritlenmiş bağlardan dolayı kısmen iyonik karakter sergilemektedir. İki boyutlu bor nitrür nanoyapıları üstün özellikleri nedeniyle çeşitli bilimsel ve teknoloji alanlarındaki uygulamaları için giderek daha fazla araştırılmaktadır. BN yapısının yüksek hidrofobik, ısı ve elektrik yalıtımı, oksidasyona direnç, antioksidasyon kapasitesi, termal iletkenlik, yüksek kimyasal kararlılık, mekanik mukavemet ve hidrojen depolama kapasitesi gibi benzersiz fiziksel ve kimyasal özellikleriyle öne çıkmaktadır (Wang vd. 2022a). Ayrıca dolgu maddeleri, antibakteriyel maddeler, koruyucu kaplama maddeleri, yağlayıcılar, canlı vücut içerisine ilaç iletimi için nano taşıyıcılar ve kemosensörlerde reseptör fazı olarak kullanılmaktadır (Merlo vd. 2018). BN tabanlı nanomalzemeler iyi biyouyumlulukları nedeniyle tıbbi uygulamalarda olası kullanımları için araştırmacıların dikkatini çekmiştir. Bor bileşiklerinin kanser tedavisindeki terapötik etkileri ve BN bazlı nanomalzemelerin kontrollü bor salınımı çalışılmıştır. Bu çalışmada hücre canlılığını azaltan ve prostat kanseri hücre apoptozunu artıran kontrollü kristallik ve bor salınımına sahip içi boş bor nitrür küreleri hakkında incelenmiştir. BN küreleri ile tedavi edilen deri altı tümör fare denekler üzerinde yapılan deneylerde tümör büyümesinin önemli ölçüde baskılandığını gösterilmiştir. Bir ortotopik tümör büyüme modeli kullanılarak BN kürelerinin canlı içerisindeki kanser karşıtı davranışı doğrulanmıştır (Li vd. 2017). Ayrıca kozmetiklerde, yağlayıcılarda, yalıtkanlarda ve mikrodalgada şeffaf malzemelerde yaygın olarak BN kullanılmaktadır (Jiang vd. 2015). Altıgen yapıya sahip bor nitrür elmasa kıyasla daha yüksek elastisite modülünden dolayı beyaz elmas olarak da adlandırılmaktadır. Birçok endüstriyel metal malzemeyi kesmek için kullanılmaktadır ve elmasta olduğu gibi ilgili alaşımlarla reaksiyona girmemektedir (Ahmad vd. 2017).



Şekil 2.10. Bor nitrür yapısı

Günümüzde bor nitrür genellikle laboratuvarlarda sentezlenmekte ve farklı yapı kristalliklere yol açan spesifik konformasyonlara sahip eşit sayıda bor ve nitrojen atomlarından oluşmaktadır. Bor nitrürün en kararlı formu olan altıgen bor nitrür (h-BN), grafen benzeri bir yapıya sahip B-N atomları arasında güçlü kovalent bağlara sahiptir. İki boyutlu bor nitrür katmanları, van der Waals etkileşimleri yoluyla bir arada stabil halde durabilmektedir (Weng vd. 2016). BN bazlı nanomalzemeler kompozit malzemelerde sağlayabileceği yüksek gerilme mukavemeti ve elastikiyet dahil olmak üzere yüksek termal iletkenlik ve geliştirilmiş mekanik özellikler için yüksek talep görmektedir. BN bazlı nanomalzemelerin piezoelektrik özelliklere sahip olması doku mühendisliği işlemlerinde kullanılan yeni biyomalzemelerin üretilmesine izin verebilir (Merlo ve diğerleri, 2018). BN bazlı nanomalzemeleri kompozit malzemelerde karbon bazlı muadillerine kıyasla daha öne çıkaran önemli özellik ise elektriksel yalıtımlarıdır.

BN nanomalzemeleri, nanoküreler, nanotüpler, nanolifler, nanoşeritler, ince filmler ve nanolevhalar gibi tüm morfolojik şekillerde bulunmaktadır (Angizi vd. 2022). Geniş bant aralığı ve ultraviyole aralığında bulunan lazer üretimi nedeniyle h-BN, UV ve görünür ışık alanlarında verimli bir yayıcı ve dedektör malzemesi olarak kabul edilmektedir (Solozenko vd. 2001; Weinstein vd. 2013). Nitrürlerdeki kontrol edilemeyen teknik kirleticilerin oksijen ve karbon olduğu bilinmektedir (Vokhmintsev vd. 2016). Bor nitrürün yüzeyi ve düşük boyutlu kuantum etkilerini beraber göz önüne alındığında üstün kimyasal ve fiziksel özellikler uygulamada iyi termal ve kimyasal kararlılık ve üstün elektrik elde edilebilecek potansiyele sahiptir (Xie vd. 2013).

2.4.2. Bor nitrür nanotüpler (BNNT)

Bor nitrür, bor ve nitrojen atomlarının altıgen biçimde bağ kurarak oluşturduğu iki boyutlu yapıdır. Borofen veya bor nitrür nanotüpler (BNNT), geleneksel malzemelere hatta karbon nanotübe karşı üstün özelliklere sahip nispeten yeni bir nanomalzeme türüdür. BNNT, iki boyutlu bor nitrür yapısının basitçe şablon kullanılarak sarılması veya kimyasal yöntemlerle elde edilebilir. Birkaç nanometre çapa sahiptir BNNT'lerin uzunlukları 100 nm ile birkaç mikron arasında değişebilir, bu da çok yüksek en boy oranlarına sahip olmalarını sağlamaktadır. Nanotüpler, keşfedilmelerinden bu yana benzersiz yapısal, mekanik ve elektriksel özellikleri nedeniyle yoğun bir şekilde araştırılmıştır (Cong ve Lee 2018; Lim vd. 2019; Mercan ve Civalek 2022; Mercan ve Civalek 2016c). İlk olarak 1994 yılında yayınlanan bir çalışmada, karbon ve bor nitrür malzemeleri arasındaki özelliklerdeki benzerliklere dayanarak potansiyel bor nitrür nanotüplerinin oluşturulabileceği öne sürülmüştür (Rubio vd. 1994b). 1995 yılında ise bir plazma ark deşarj yöntemini kullanarak 1-3 nm çapında, yaklaşık 200 nm uzunlukta nanotüpleri başarılı bir şekilde sentezlenmiştir (Chopra vd. 1995b).

BNNT'ler, benzer bir moleküler yapıyı (Şekil 2.2) ve mekanik özellikleri paylaştığı için karbon nanotüplere benzer özellikler gösterir. CNT yaklaşık 400 °C'ye kadar verimli çalışmaktayken BNNT 900 °C'ye kadar verimden kaybetmeden stabil halde yapısını ve mekanik özelliklerini kaybetmeden çalışmaktadır. Bu özelliği sayesinde BNNT, uçak-uzay ekipmanlarında kullanım için öne çıkmaktadır. Ayrıca, BNNT çok yüksek nötron absorpsiyon kesiti nedeniyle nötron radyasyonuna karşı koruma sağlamaktadır. BNNT'ler uçak-uzay uygulamaları için inanılmaz özelliklere sahip olsa da, üretim sürecinde gerekli olan yüksek sıcaklık ve basınç gibi aşırı koşullar nedeniyle yüksek kalitede ürünü büyük ölçekte üretmek oldukça zordur. BNNT elde etmek için borofen yapısındaki düzlem malzemeyi şablon kullanarak yuvarlamak dışında birkaç

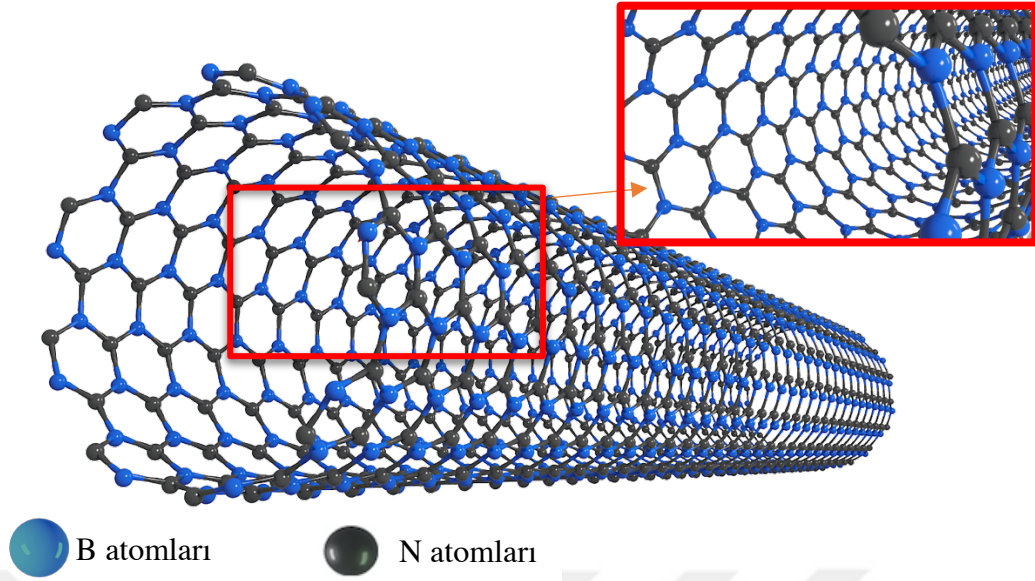
yöntemle sentezlemek mümkündür. Bu yöntemler arasında bilyalı öğütme/tavlama yöntemi, kimyasal buhar biriktirme yöntemi, yüksek sıcaklık basıncı yöntemi, hidrojen destekli bor nitrür nanotüp sentezi yöntemleri yer almaktadır.

Bor nitrür sentetik bir malzemedir. İlk sentez 1842'de erimiş borik asidin potasyum siyanür üzerindeki etkisi kullanılarak elde edilmiştir. Teknolojinin yeterince gelişmemiş olması sebebiyle ilk sentezlendiği 1842 yılından 1960 yılına kadar bu malzemeyi toz veya sıcak preslenmiş halde stabilize etmek mümkün olmamıştır (Arenal vd. 2010).

Sentezlenmesi zor olsa da, BNNT benzersiz bir özellik kombinasyonu sergileyen geniş bant aralıklı yarı iletken nanotüplerdir. BNNT'nin öne çıkan özellikleri şöyle sıralanabilir; yüksek direnç, bant aralığının sürekli ayarlanabilmesi, UV radyasyonu yayması, yüksek mukavemet ve termal stabiliteye sahiptir olmasıdır. Ayrıca, karbon nanotüplerin aksine, BNNT elektronik ve optik özellikleri, kiralitelerinden büyük ölçüde bağımsızdır. Nano ölçekte (özellikle büyük miktarlarda sentezlenen malzemeler için) atomik yapıyı kontrol etmedeki zorluklar göz önüne alındığında, BNNT çeşitli uygulamalar için kararlı bir platform sunar. Bu nedenle, BNNT'lerin büyük ölçekli sentezi ve karakterizasyonu üzerine daha fazla araştırma ve geliştirme ile, BNNT bazlı kompozitler, gaz depolama malzemeleri, UV emisyon kaynakları ve nanoelektromekanik dahil olmak üzere bu malzemeler için farklı ve benzersiz uygulama alanları tasarlamak mümkündür.

BNNT düşük elektrik alanları altında en güçlü yalıtkan nanotüplerden birisi olup kiraliteden, çaptan veya duvar sayısından bağımsız olarak yaklaşık 4-5.5 eV değerinde bir enerji aralığına sahiptir (Griebel ve Hamaekers 2007). Bununla birlikte, BNNT geniş bant aralıklı bir yarı iletken olarak da kabul edilmektedir (Blase vd. 1994; Moon vd. 2004). BNNT harici bir elektrik alanı üzerinde düzgün boşluk kapatma davranışı gösterdiği ve bant aralıklarının, kiraliteden bağımsız olarak elektrik alanlarındaki veya boru çapındaki artışla neredeyse lineer olarak azaldığı bulunmuştur (Hu vd. 2008). Ayrıca yapılan teorik ve deneysel çalışmalarda açık uçlu BNNT'lerin benzersiz manyetik ve elektronik özellikler sergilediği gösterilmiştir (Arshadi vd. 2013; Hao vd. 2006; He vd. 2020).

BNNT'yi oluşturan altıgen boron-nitrür (hBN), yüksek mukavemeti, termal iletkenliği, görünür ışık için şeffaflığı, antimikrobiyal özellikleri, CNT'lere kıyasla bağlı kimyasal ataleti, kiraliteden bağımsız elektrik yalıtkanı, biyo-uyumluluğu, oksidasyona karşı yüksek direnci özellikleri ile öne çıkmaktadır (Kumar vd. 2016). Tüm bu özellikler BNNT'yi nötron emici malzemeler için, tehlikeli bir ortamda çalışan ekipmanın korunması için, biyotıp, yüksek sıcaklık katalizörleri, nano ölçekli elektronik ve fotovoltaiik cihazlardaki birçok uygulamada su arıtıcılar, sensörler ve biyo- dedektörler için kullanılmasına olanak sağlamaktadır (Mistry vd. 2021). Şekil 2.11'de bor nitrür nanotüp çizimi yapılmıştır.



Şekil 2.11. Bor nitrür nanotüp yapısı

Çizelge 2.2’de bu tez kapsamında incelenen farklı uzunluklarda (5, 5), (10, 10) koltuk ve (10, 0), (12, 0) zikzak bor nitrür nanotüplere ait çap ve atom sayısını içeren geometrik parametreler verilmiştir (Sakharova vd. 2021).

Çizelge 2.2. Farklı kiraliteye sahip BNNT’lerin geometrik parametreleri

	Tip	Kiralite	Çap (nm)	Atom sayısı
$L=5 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	400
	Koltuk	(10, 10)	1.404	800
	Zikzak	(10, 0)	0.810	480
	Zikzak	(12, 0)	0.973	576
$L=6 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	480
	Koltuk	(10, 10)	1.404	960
	Zikzak	(10, 0)	0.810	560
	Zikzak	(12, 0)	0.973	672
$L=7 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	560
	Koltuk	(10, 10)	1.404	1120
	Zikzak	(10, 0)	0.810	680
	Zikzak	(12, 0)	0.973	816
$L=8 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	640
	Koltuk	(10, 10)	1.404	1280
	Zikzak	(10, 0)	0.810	760
	Zikzak	(12, 0)	0.973	912
$L=9 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	720
	Koltuk	(10, 10)	1.404	1440
	Zikzak	(10, 0)	0.810	840
	Zikzak	(12, 0)	0.973	1056
$L=10 \text{ nm}$	Koltuk	(5, 5)	0.702	800
	Koltuk	(10, 10)	1.404	1600
	Zikzak	(10, 0)	0.810	960
	Zikzak	(12, 0)	0.973	1152

2.4.3. Bilyalı öğütme/tavlama yöntemi

Ağırlıklı olarak mekanik bir süreç olan yüksek enerjili bilyalı öğütme, buna rağmen uygulandığı malzemede önemli yapısal ve kimyasal değişikliklere neden olmaktadır. Bilyalı öğütme yoluyla düşük sıcaklıklarda malzemelerin dengesiz sentezi, öğütme sırasında meydana gelen termal şok, yüksek hızlı plastik deformasyon, mekanik öğütme-kırma, soğuk kaynak ve yakın karıştırma işlemlerinin kombinasyonu ile mümkündür. Bilyalı öğütme yöntemi kullanılarak BNNT elde etmek için yayınlanan ilk çalışmalar 1999 yılında yayınlanmıştır (Chen vd. 1999a; Chen vd. 1999b). Bu çalışmalar sonucunda çapları 10-150 nm arasında değişen çok duvarlı bor nitrür nanotüpler elde edilmiştir. Bu yöntemde BNNT genellikle basınçlı amonyak atmosferinde paslanmaz çelik öğütme kapları ve sertleştirilmiş çelik bilyalar kullanılarak saf bor veya h-BN tozunun uzun yaklaşık 150 saat boyunca yüksek enerjili öğütülmesiyle sentezlenir. Öğütülmüş malzeme daha sonra 10 saat boyunca 1000 °C'deki nitrojen atmosferinde tavllanır. Bu yöntemle nanotüp oluşumunun iki farklı mekanizmanın uyumlu çalışmasından kaynaklandığı gösterilmiştir. İlk mekanizma, amonyak atmosferinde bor nanoparçacıklarının nitrürlenmesidir. İkinci mekanizma ise öğütme işleminden gelen demir, nikel, krom gibi yüksek enerjili öğütme sırasında bor tozuna dahil edilmesi ve metal parçacıkların daha sonra BNNT büyümesi için katalizör görevi gördüğü belirtilmiştir (Chen vd. 2002). Bu iki mekanizmanın etkin bir şekilde çalışabilmesi için hem bilyalı öğütme hem de tavlama aşamalarının uzun süreler boyunca yapılması gerekmektedir. Bu tekniği tungsten karbür bilya kullanımı ve nikel borit ve alümina karışımının kullanımı dahil olmak üzere çeşitli varyasyonları çalışılmıştır (Arenal vd. 2010). Çalışılan bu yöntemde elde edilen BNNT verimi çok yüksek olmuştur ancak ortaya çıkan nanotüpler hassastır kontaminasyondan ve yapısal etkilerden zarar görebilmektedir (Fitz Gerald vd. 2003).

Bilyalı öğütme ve tavlama yöntemini kullanarak elde edilen BNNT hakkında yapılan bazı çalışmaların sonuçlarından yöntemin doğruluğu ve etkinliği kanıtlanmıştır. 2003 yılında yayınlanan bir çalışmada bu yöntem kullanılarak birkaç mikron uzunluğunda ve 40-100 nm arasında değişen çaplarda sahip BNNT elde edilmiştir. Bu çalışmada, bor ve h-BN'nin bilyalı işleminden geçerek toz elde edilmiştir. Elde edilen toz, daha önce demir parçacıkları ile işleme girmiş bir alümina zemin üzerinde biriktirilmiştir. Öğütme işleminden sonra biriktirilen ürün 1000–1200 °C sıcaklık aralığında amonyak gazında tavlanaştırılmıştır. Elde edilen sonuçlar kaliteli BNNT elde edildiğini ve daha yüksek sıcaklıklarda nanotüplerin daha iyi kristalleştiğini belirtmiştir (Yong Bae vd. 2003). 2005 yılında yayınlanan başka bir çalışmada ise bilyalı öğütme-tavlama işlemi kullanarak amorf borun ilk olarak bir amonyak atmosferinde 150 saat boyunca bilyalı öğütüldüğü ve ardından amonyak içinde 1200 °C'de tavlanaştırıldığı gösterilmiştir. Elde edilen nanotüplerin 10 nm çapından küçük ve iyi kristalize olduğu, nanotüplerin herhangi bir metal parçacık içermediği gösterilmiştir (Yu vd. 2005). Aynı araştırmacılar daha sonra yayınladıkları başka bir çalışmada önceki çalışmadaki bor tozlarını, önce 150 saat boyunca bilyalı öğütülmüş ve daha sonra amonyak gazında 1100 °C'de 6 saat tavlanaştırılmış zenginleştirilmiş ¹⁰B tozları ile değiştirmişlerdir. Bu değişim sonucunda elde edilen iyi kristalize olmuş nanotüplerin yüksek verimde olduğu ve tavlama sıcaklığının elde edilen nanotüplerin çapı üzerindeki etkisi gösterilmiştir (Yu vd. 2006). Daha sonra yapılan bir çalışmada ise amonyak gazı akan bilyalı öğütülmüş bor tozlarını 1200 °C sıcaklıkta ısıtarak saf BNNT sentezlenmiştir. Elde edilen nanotüplerin çapları 40-120 nm aralığında, uzunluklarının 10 mm'den uzun olduğu belirtilmiştir. Sonuç olarak, ısıtma atmosferi nitrojen ile

değiştirildiğinde elde edilen nanotüplerin veriminin önemli ölçüde azaldığına görülmüştür.

2.4.4. Kimyasal buhar sentezi yöntemi

SiC sentezi için kullanılan yöntemle benzer bir yöntemle BNNT elde edilebilir. Bu yöntem ilk olarak fullerenlerin sentezi için kullanılmıştır ve CNT-BNNT üretmek için yöntem uyarlanmıştır. Kullanılan tekniğe ve öncülere bağlı olarak, kimyasal buharlaştırma yöntemi kullanılarak düşük kontaminasyona sahip geniş yüzey alanına sahip, yüksek kaliteli ürünler elde etmek mümkündür. BNNT sentezi için çeşitli öncüler ve teknikler kullanılmıştır. Farklı öncü ve teknikler sonuç olarak farklı kalitede ve geometrik özellikte BNNT elde edilmesini doğrudan etkilediği bilinmektedir. Kullanılan farklı tekniklerden bir tanesi plazma kullanılarak lazer ile buharlaştırma yöntemidir. Plazma bazlı sentez yöntemi dengesiz koşullar altında yeni materyal sentezlemekte öne çıkmaktadır. Plazma, reaktivitesi yüksek iyonların, elektronların ve kararsız nötr gaz moleküllerinin ve atomlarının karışımından oluşmaktadır. Bu son derece dinamik ve reaktif ortam, normalde denge koşulları altında oluşmayan öncü türlerle sonuçlanan gaz fazı reaksiyonlarını kolaylaştırır. Bu nedenle, plazma tabanlı yöntemler, düşük sıcaklıklar gibi dengesiz koşullar altında malzeme sentezini mümkün kılar. Plazma destekli lazer ile buharlaştırma teknikleri, seramik ve yarı iletkenler de dahil olmak üzere çeşitli malzemeleri sentezlemek için kullanılmıştır. Plazma bazlı lazer ile uzaklaştırma tekniği kullanılarak BNNT sentezi için birçok farklı yöntem uygulanmıştır. Bir yöntemde mikrodalga plazma kullanılarak güçlendirilmiş kimyasal buharlaştırma yapılmaktadır. Mikrodalga plazma ile güçlendirilmiş buharlaştırmada, kontrollü bir ortamda yüksek oranda reaktif BN gaz fazı öncüllerinin üretilmektedir böylece düşük kontaminasyon ile yüksek kaliteli BNNT sentezlenmektedir. Ayrıca, plazmanın oldukça aktif olması 1200 °C'de yapılan BN sentez işlemini 800 °C civarında gerçekleşmesini sağlamaktadır. Geleneksel buharlaştırmaya göre daha düşük sıcaklıkta yapılan sentez ile hem üretim maliyeti düşürülmektedir hem de sıcaklığa duyarlı zemin malzemeleri üzerinde BNNT birikimini kolaylaştırır. 1.5 kW, 2.45 GHz'lik RF zemin ısıtıcısı bulunan bir reaktör kullanılarak BNNT elde edilen bir çalışmada sıcaklık, bir optik pirometre ve doğrudan zeminin altındaki grafit alıcıya gömülü bir termokupl yardımıyla izlenmiştir. Plazma kimyasını izlemek için ise optik emisyon spektroskopisi ve dört kutuplu kütle spektroskopisi kullanılmıştır. Gaz fazı öncülleri olarak hidrojen, amonyak ve diboran kullanılmıştır. Elektron ışını buharlaştırması kullanılarak oksitlenmiş Si(111) zemin üzerinde farklı kalınlıklarda Ni ve Co katalizör katmanlarını biriktirilmiştir. Biriktirmeden sonra reaksiyon odası önce 10^{-6} Torr taban basıncına maruz bırakılmıştır ve biriktirme için kontaminasyonu önlemek için 350 °C'ye ısıtılmıştır. Metal katalizör ince filmlerini nano boyutlu tanelere dönüştürmek için sıcaklık daha sonra 800 °C'ye yükseltip 10 dakika boyunca amonyak atmosferinde tutulmuştur. Plazmayı başlatmak için 15 Torr ve 600 W hidrojen kullanılmıştır. Plazma stabilize olduktan sonra reaksiyon odasındaki hidrojen kısmen amonyak ile değiştirilmiştir ve biriktirme işlemi gaz karışımına diboran eklenmesiyle başlatılmıştır. Bu çalışmada sıcaklığın BNNT sentezi üzerindeki etkisi, farklı deneyler ortamları hazırlanarak biriktirme sıcaklığının 600 °C ile 950 °C arasında farklı değerler kullanılarak incelenmiştir (Guo ve Singh 2008). Ayrıca, katalizör tabakası kalınlığının BNNT sentezi üzerindeki etkisi de incelenmiştir (Guo ve Singh 2009). Bu çalışmalarda katalizör tabakasının BNNT sentezi için kritik olduğu ve katalizör filmi olmayan alanlarda BNNT oluşumu olmadığı gösterilmiştir. Ayrıca, katalizörün kalınlığının BNNT sentezi üzerinde önemli bir etkisi olduğu da gösterilmiştir. Katalizör kalınlığı 2 nm'nin altında olduğunda yüksek BNNT verimi yakalandığı

görülmüştür. Elde edilen nanotüplerin BNNT çapının 5 ile 20 nm arasında değiştiği ve duvar kalınlığı 3-4 nm olduğu görülmüştür. Diğer yandan 600 °C'den daha düşük sıcaklıkta BNNT oluşturacak tanelerin çok az miktarda elde edildi ve 950 C'den daha yüksek sıcaklıklarda ise BN ile kaplanmış taneciklerin 100 nm boyutunda elde edildiği belirtilmiştir. Plazma bazlı lazer ile uzaklaştırma/buharlaştırma tekniği kullanılarak BNNT sentezi için ikinci yöntem ise plazma ile güçlendirilmiş darbeli lazer buharlaştırma veya biriktirmedir. Bu yöntemde saf demir, darbeli lazer biriktirme ile oksitlenmiş bir Si zemini üzerinde biriktirilir. Saf demir kaplı Si zemin 600 °C'ye ısıtılır ve saf nitrojen RF plazmasına maruz bırakılır. RF plazmasının zeminin voltajını indüklediği, böylece iyonları hızlandırarak BN buharını zemine biriktirilmesiyle demir üzerinde BNNT oluşturur. Başarılı bir şekilde BNNT sentezlemek için bir RF plazma ve darbeli lazer buharlaştırma kombinasyonunun gerekli olduğu ve demir tabakasının kalınlığının da önemli olduğu gösterilmiştir (Schulz vd. 2013). Başka bir kimyasal buharlaştırma yönteminde ise katalizör kullanmadan bir BN reaksiyon tüpünde bor oksit ve magnezyum oksit karışımının RF indüksiyonla ısıtılması uygulanmıştır. Bu bileşenler arasındaki reaksiyon, bir argon taşıyıcı gaz tarafından sürekli bir amonyak akışı altında 1100 °C'de tutulan bir BN duvarlı reaksiyon odasına taşınan magnezyum ve dibor oksit buharlarının oluşturmuştur. Dibor oksit, amonyak ile reaksiyona girerek reaksiyon odasının BN duvarlarında BNNT birikmesine sebep olmuştur (Tang vd. 2002).

2.4.5. Lazer ile uzaklaştırma yöntemi

Bu sentez yönteminde hem ısıtarak hem de uzaklaştırarak BNNT sentezlemek için darbeli veya sürekli dalga lazerleri kullanılmaktadır. Bu yöntemde tek kristalli kübik BN, bir nitrojen atmosferi altında 5-15 GPa arasında sıkıştırılarak 1 dakika boyunca yüksek güçlü 240 W, 80 mm'lik karbondiyoksit lazer ile ısıtılmaktadır. Reaksiyon odasında sıcaklık yaklaşık 5000 °C ulaşarak BNNT oluşumuyla sonuçlanmaktadır (Golberg vd. 1996). Başka bir yaklaşımda ise BNNT sentezlemek için yüksek basınç olmadan sürekli dalga lazerleri kullanılmıştır. Yüksek basınç yerine, sıcak preslenmiş ve termal olarak şoklanmış h-BN mikropalakaları, yaklaşık 75 Torr'luk bir nitrojen atmosferinde 3 dakika boyunca yüksek güçlü bir karbondiyoksit lazeri ile ısıtılarak BNNT elde edilmiştir (Laude vd. 2000). Başka bir çalışmada ise BN, nikel ve kobalt tozu ile karıştırılmıştır ve sıcak preslenmiştir. Preslenen malzeme argon nitrojen veya helyum taşıyıcı gaz akışıyla 1200 °C sıcaklıkta tutulan bir kuvars tüpe yerleştirilmiştir. Daha sonra bir eksimer lazer ile preslenmiş malzeme kesilip çıkarılmıştır. Kesilen malzeme, akışın çıkış yönüne tutulan su soğutmalı bir bakır blok üzerinde BNNT oluşumuna neden olmuştur. Kobalt ve nikel metallerinin BNNT büyümesi için katalizör görevi gördüğü ve elde edilen nanotüplerin çapının 1.5 ile 8 nm arasında değiştiği ancak nanotüplerin uçlarının, karbon nanotüplerin konik uçlarının aksine, ya düz ya da çokgen olduğu belirtilmiştir (Yu vd. 1998). BNNT'lerin sentezi için katalizörsüz bir lazer ablasyon yaklaşımı da geliştirilmiştir. Lazer ablasyon, yüksek SWBNNT verimi ile sonuçlanan birkaç teknikten biridir. Bununla birlikte, lazerle uzaklaştırma ve ısıtma maliyet açısından çalışmayı zorlaştırmaktadır ve ekipman sürekli olarak çalıştırılamamaktadır, dolayısıyla bu yöntemle nanotüplerin büyük ölçekli sentezi zorlaşmaktadır.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Titreşim Denklemlerinin Elde Edilmesi

Homojen ve sabit elastisite modülüne sahip düzgün geometrik özelliklere sahip bir kirişin serbest titreşim denklemi Denklem (3.1)'deki gibi ifade edilir:

$$EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \rho A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (3.1)$$

Burada E elastisite modülünü, I atalet momentini, A kesit alanını, ρ ise yoğunluğu ifade etmektedir. Sadeleştirme yapmak için Denklem (3.1)'i yoğunluk ve kesit alanına bölünürse:

$$\frac{EI}{\rho A} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (3.2)$$

Denklem (3.2)'de E , I , ρ ve A sabit sayılardır. İşlem kolaylığı için Denklem (3.3)'te verilen c^2 dönüşümü uygulanabilir:

$$\frac{EI}{\rho A} = c^2 \quad (3.3)$$

Denklem (3.3)'te verilen dönüşüm Denklem (3.2)'ye uygulanırsa:

$$c^2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0 \quad (3.4)$$

Değişkenlerine ayırma yöntemi şöyle ifade edilir:

$$w_{(x,t)} = W_{(x)} T_{(t)} \quad (3.5)$$

Denklem (3.5)'te gösterilen değişkenlerine ayırma yöntemi Denklem (3.4) için uygulanırsa Denklem (3.6) elde edilir.

$$\frac{c^2}{W(x)} \frac{\partial^4 W(x)}{\partial x^4} = -\frac{1}{T(t)} \frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} = a = \omega^2 \quad (3.6)$$

Denklem (3.6)'da görülen ω^2 üstel ifadesinden dolayı negatif değer alamaz ve a 'ya eşit olduğu için Denklem (3.6) şöyle ifade edilebilir:

$$\frac{\partial^4 W(x)}{\partial x^4} - \beta^4 W(x) = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial^2 T(t)}{\partial t^2} + \omega^2 T(t) = 0 \quad (3.8)$$

Burada:

$$\beta^4 = \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\rho A \omega^2}{EI} \quad (3.9)$$

Denklem (3.9)'u çözebilmek için Denklem (3.10)'da gösterilen W dönüşümü uygulanabilir:

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = W \quad (3.10)$$

Denklem (3.10)'da verilen dönüşüm Denklem (3.8)'e uygulanırsa:

$$W^2 + \omega^2 W = 0 \quad (3.11)$$

Denklem (3.11)'de Denklem (3.12)'de verilen üstel form dönüşümü yapılırsa çözüm kolaylaşır ve Denklem (3.13) ve Denklem (3.14) elde edilir.

$$W = e^{mx} \quad (3.12)$$

$$m^2 e^{mx} + \omega^2 e^{mx} = 0 \quad (3.13)$$

$$(m^2 + \omega^2) e^{mx} = 0 \quad (3.14)$$

Denklem (3.14)'te görülen üstel e^{mx} 'in sıfırdan farklı bir değer alacağı kesin olduğu için $(m^2 + \omega^2)$ ifadesi Denklem (3.15)'te görüldüğü gibi sıfırdır.

$$m^2 + \omega^2 = 0 \quad (3.15)$$

Denklem (3.15)'te gösterilen iki sayının karesinin toplamının sıfıra eşit olduğu ifadenin kökleri Denklem (3.16)'da m_1 ve m_2 olarak verilmiştir.

$$m_1 = i\omega \text{ ve } m_2 = -i\omega \quad (3.16)$$

m_1 ve m_2 kökleri Denklem (3.12)'de verilen üstel ifadede yerine yazılırsa Denklem (3.17) elde edilir.

$$W = c_1 e^{i\omega x} + c_2 e^{-i\omega x} \quad (3.17)$$

Denklem (3.17)'de gösterilen eşitliğin çözümü için Denklem (3.18) ve Denklem (3.19)'da verilen Euler dönüşümlerinin uygulanması gerekir:

$$e^{i\omega x} = \cos \omega x + i \sin \omega x \quad (3.18)$$

$$e^{-i\omega x} = \cos \omega x - i \sin \omega x \quad (3.19)$$

Euler dönüşümleri Denklem (3.17)'de yapılırsa Denklem (3.20) elde edilir ve düzenlenirse Denklem (3.21) elde edilir.

$$W = c_1(\cos \omega x + i \sin \omega x) + c_2(\cos \omega x - i \sin \omega x) \quad (3.20)$$

$$W = (c_1 + c_2) \cos \omega x + (c_1 - c_2)i \sin \omega x \quad (3.21)$$

$c_1 + c_2$ ve $(c_1 - c_2)i$ sabit sayıya eşit oldukları bilindiğinden işlem kolaylığı için $A = c_1 + c_2$ ve $B = (c_1 - c_2)i$ dönüşümleri Denklem (3.21)'e uygulanırsa Denklem (3.22) elde edilir.

$$T(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \quad (3.22)$$

Denklem (3.22)'de gösterilen A ve B sınır koşullarından hesaplanır. Denklem (3.7) üstel formda Denklem (3.23)'te gösterildiği gibi ifade edilebilir.

$$W(x) = Ce^{sx} \quad (3.23)$$

Denklem (3.23)'te görülen s ve C sabit sayılar olup Denklem (3.7)'de kullanılırsa Denklem (3.24) elde edilir ve bu ifade düzenlenirse Denklem (3.25) elde edilir.

$$s^4.Ce^{sx} - \beta^4 Ce^{sx} = 0 \quad (3.24)$$

$$(s^4 - \beta^4)Ce^{sx} = 0 \quad (3.25)$$

$$Ce^{sx} \neq 0, (s^4 - \beta^4) = 0 \quad (3.26)$$

Denklem (3.26)'da görüldüğü Ce^{sx} sabit sayılar olduğu için sıfıra eşit olamaz, bu durumda $(s^4 - \beta^4)$ sıfıra eşit olur ve kökleri Denklem (3.27)'de gösterildiği gibidir.

$$s_{1,2} = \pm \beta, s_{1,2} = \pm i\beta \quad (3.27)$$

Elde edilen köklerle birlikte Denklem (3.23) şöyle tekrar yazılabilir:

$$W(x) = C_1 e^{\beta x} + C_2 e^{-\beta x} + C_3 e^{i\beta x} + C_4 e^{-i\beta x} \quad (3.28)$$

Denklem (3.28)'de gösterilen C_1, C_2, C_3, C_4 sabit sayılardır. Denklem (3.28)'de Denklem (3.18) ve Denklem (3.19)'da verilen dönüşümler uygulanırsa Denklem (3.29) elde edilir.

$$W(x) = C_1 \cos \beta x + C_2 \sin \beta x + C_3 \cosh \beta x + C_4 \sinh \beta x \quad (3.29)$$

Nanotüplerin doğal frekansları Denklem (3.29) yardımıyla Denklem (3.30)'da gösterildiği gibi bulunur:

$$\omega = \beta^2 \sqrt{\frac{EI}{\rho A}} = (\beta l)^2 \sqrt{\frac{EI}{\rho A l^4}} \quad (3.30)$$

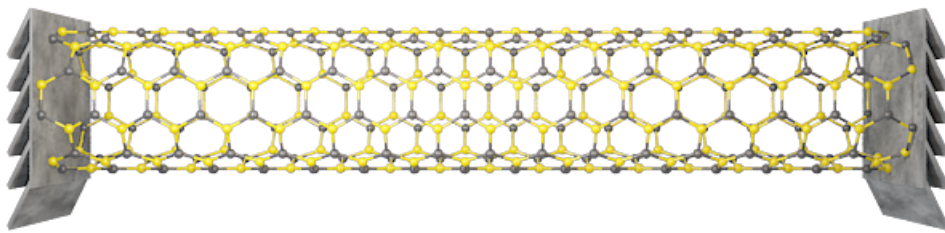
Denklem (3.29)'da gösterilen $W(x)$ fonksiyonu kiriş titreşimine ait karakteristik fonksiyon, ω kirişin doğal frekansını ifade etmektedir. Kirişlere ait sonsuz sayıda mod sayısı ve her moda ait doğal frekansı bulunmaktadır. Denklem (3.29)'daki (C_1 , C_2 , C_3 ve C_4) bilinmeyen sabit sayılar ve β kirişin $x=0$ ve $x=L$ 'deki mesnetlenme (sınır) koşullarına göre hesaplanır. Fonksiyon formda Denklem (3.31) yazılabilir.

$$w(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} W_i(x)(A_i \cos \omega_i t + B_i \sin \omega_i t) \quad (3.31)$$

Burada, ω_i nanotüpe ait i 'nci doğal frekansını ifade etmektedir. $W_i(x)$ ise bu frekansa karşılık gelen normal modu temsil etmektedir. Nanotüplerin mesnetlenme koşullarından ise A_i ve B_i sabitleri hesaplanmaktadır. Bu tez kapsamında nanotüpler hem iki ucu ankastre mesnetli hem de bir ucu ankastre, diğer ucu boşta olacak şekilde modellenip hesaplamalar yapılmıştır.

3.1.1. Her iki ucu ankastre mesnetli nanotüp

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotüp Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Ankastre mesnetlenmiş uçlarda dönme (W') ve deplasman (W) sıfıra eşittir.



Şekil 3.1. İki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp çizimi

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotübün $x=0$ ve $x=L$ 'deki sınır koşulları Denklem (3.51), Denklem (3.52), Denklem (3.53), Denklem (3.54)'te gösterilmiştir.

$$W(0) = 0 \quad (3.51)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.52)$$

$$W(l) = 0 \quad (3.53)$$

$$\frac{dW}{dx}(l) = 0 \quad (3.54)$$

Denklem (3.51), Denklem (3.52), Denklem (3.53) ve Denklem (3.54) nihai denklem olan Denklem (3.29)'da kullanılırsa sırasıyla Denklem (3.55), Denklem (3.56), Denklem (3.57) ve Denklem (3.58) elde edilir.

$$W(0) = C_1 \cdot 1 + C_2 \cdot 0 + C_3 \cdot 1 + C_4 \cdot 0 = 0 \quad (3.55)$$

$$W'(0) = -C_1 \beta \cdot 0 - C_2 \beta \cdot 1 + C_3 \beta \cdot 0 + C_4 \beta \cdot 1 = 0 \quad (3.56)$$

$$W(l) = C_1 \cos \beta l + C_2 \sin \beta l + C_3 \cosh \beta l + C_4 \sinh \beta l = 0 \quad (3.57)$$

$$W'(l) = -C_1 \beta \sin \beta l + C_2 \beta \cos \beta l + C_3 \beta \sinh \beta l + C_4 \beta \cosh \beta l = 0 \quad (3.58)$$

Denklem (3.55) ve Denklem (3.57)'de gösterilen deplasman denklemlerinden C_1 ve C_3 integral sabitlerinin sıfır olduğu görülmektedir. Aynı durum Denklem (3.57) ve Denklem (3.58) için geçerli değildir. Denklem (3.57) ve Denklem (3.58) denklemlerinde C_1 ve C_3 integral sabitlerinin sıfır olduğu yazılırsa Denklem (3.59) ve Denklem (3.60) elde edilir.

$$W(l) = C_2 \sin \beta l + C_4 \sinh \beta l = 0 \quad (3.59)$$

$$W'(l) = C_2 \beta \cos \beta l + C_4 \beta \cosh \beta l = 0 \quad (3.60)$$

İki bilinmeyenli denklemler olan Denklem (3.59) ve Denklem (3.60)'ı çözmek için matris formda yazılır.

$$\begin{bmatrix} \sin \beta l & \sinh \beta l \\ \beta \cos \beta l & \beta \cosh \beta l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.61)$$

Denklem (3.61)'de verilen matrisin determinantı Denklem (3.62)'de gösterildiği gibidir.

$$\cos \beta l \cosh \beta l - 1 = 0 \quad (3.62)$$

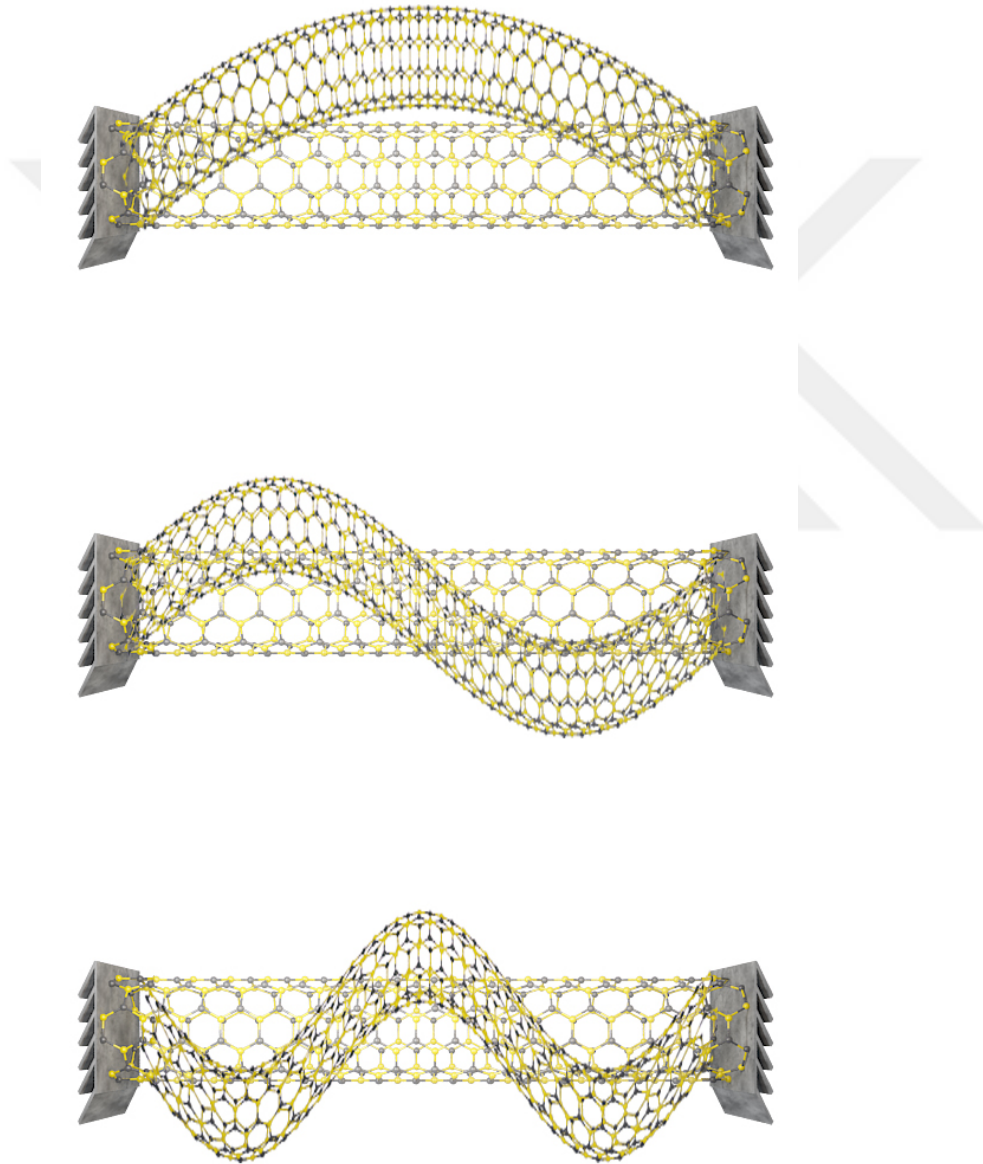
Elde edilen Denklem (3.62) frekans denklemdir. Denklem (3.62) Denklem (3.29)'da verilen nihai denklemde yerine yazılırsa Denklem (3.63) elde edilir.

$$W_n(x) = \left[C_n (\cos \beta_n x - \cosh \beta_n x) - \frac{\cos \beta_n l - \cosh \beta_n l}{\sin \beta_n l - \sinh \beta_n l} (\sin \beta_n x - \sinh \beta_n x) \right] \quad (3.63)$$

Denklem (3.63) düzenlenerek ve Denklem (3.64) kullanılarak n mod sayısındaki genel denklem Denklem (3.65)'te gösterildiği gibi yazılır.

$$w_n(x,t) = W_n(x)(A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t) \quad (3.64)$$

$$W_n(x) = \left[(\cos \beta_n x - \cosh \beta_n x) - \frac{\cos \beta_n l - \cosh \beta_n l}{\sin \beta_n l - \sinh \beta_n l} (\sin \beta_n x - \sinh \beta_n x) \right] \cdot (A_n \cos \omega_n t + B_n \sin \omega_n t) \quad (3.65)$$

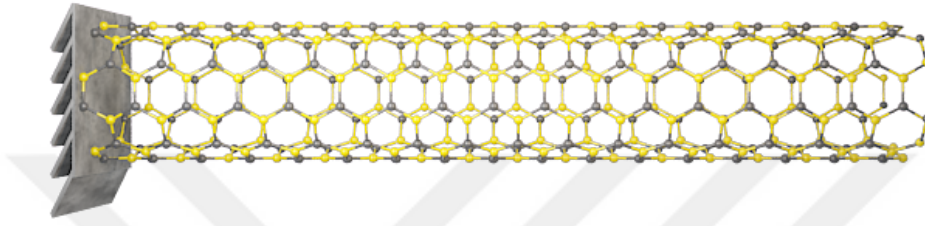


Şekil 3.2. Her iki ucu ankastre mesnetli nanotübün ilk üç mod şekli

Şekil 3.2’de her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotübe ait üçüncü mod şekli ve nanotübün deforme olmamış hali gösterilmiştir.

3.1.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotüp Şekil 3.3’te gösterilmiştir. Ankastre mesnetlenmiş uçta dönme (W') ve deplasman (W) sıfıra eşittir. Serbest uçta ise kesmenin (W'') ve momentin (W''') sıfıra eşittir.



Şekil 3.3. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotüp

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotübe ait sınır koşulları Denklem (3.66), Denklem (3.67), Denklem (3.68) ve Denklem (3.69)’da gösterildiği gibidir.

$$W(0) = 0 \quad (3.66)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.67)$$

$$\frac{d^2W}{dx^2}(l) = 0 \quad (3.68)$$

$$\frac{d^3W}{dx^3}(l) = 0 \quad (3.69)$$

Denklem (3.66), Denklem (3.67), Denklem (3.68) ve Denklem (3.69) sırasıyla Denklem (3.29)’da verilen nihai titreşim denkleminde yerine yazılırsa Denklem (3.70), Denklem (3.71), Denklem (3.72) ve Denklem (3.73) elde edilir.

$$W(0) = C_1 \cdot 1 + C_2 \cdot 0 + C_3 \cdot 1 + C_4 \cdot 0 = 0 \quad (3.70)$$

$$W'(0) = -C_1 \beta \cdot 0 - C_2 \beta \cdot 1 + C_3 \beta \cdot 0 + C_4 \beta \cdot 1 = 0 \quad (3.71)$$

$$\begin{aligned} W'''(l) &= -C_1\beta^2 \cos \beta l - C_2\beta^2 \sin \beta l + \\ C_3\beta^2 \cosh \beta l + C_4\beta^2 \sinh \beta l &= 0 \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} W''''(l) &= C_1\beta^3 \sin \beta l - C_2\beta^3 \cos \beta l + \\ C_3\beta^3 \sinh \beta l + C_4\beta^3 \cosh \beta l &= 0 \end{aligned} \quad (3.73)$$

Denklem (3.70) ve Denklem (3.71)'de gösterilen deplasman ve dönme denklemlerinden C_1 ve C_3 integral sabitlerinin sıfır olduğu görülmektedir. Aynı durum Denklem (3.72) ve Denklem (3.73) için geçerli değildir. Denklem (3.72) ve Denklem (3.73) denklemlerinde C_1 ve C_3 integral sabitlerinin sıfır olduğu yazılırsa Denklem (3.74) ve Denklem (3.75) elde edilir.

$$W''(l) = -C_2\beta^2 \sin \beta l + C_4\beta^2 \sinh \beta l = 0 \quad (3.74)$$

$$W''''(l) = -C_2\beta^3 \cos \beta l + C_4\beta^3 \cosh \beta l = 0 \quad (3.75)$$

İki bilinmeyenli denklemler olan Denklem (3.74) ve Denklem (3.75)'i çözmek için matris formda yazılır.

$$\begin{bmatrix} -\beta^2 \sin \beta l & \beta^2 \sinh \beta l \\ -\beta^3 \cos \beta l & \beta^3 \cosh \beta l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.76)$$

Denklem (3.76)'da gösterilen matrisin determinantını alınırsa Denklem (3.77) elde edilir.

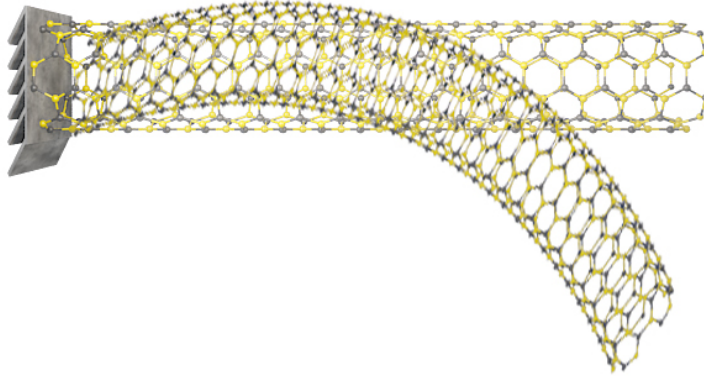
$$\cos \beta l \cosh \beta l + 1 = 0 \quad (3.77)$$

Elde edilen Denklem (3.77) frekans denklemidir. Denklem (3.77) Denklem (3.29)'da verilen nihai denklemde yerine yazılırsa Denklem (3.79) elde edilir.

$$\omega_n = (\beta_n l)^2 \sqrt{\frac{EI}{\rho A l^4}} \quad , \quad \beta_n l \cong \frac{(2n-1)\pi}{2} \quad (3.78)$$

Denklem (3.77) düzenlenerek ve Denklem (3.78) kullanılarak n mod sayısındaki genel denklem Denklem (3.79)'da gösterildiği gibi yazılabilir:

$$\begin{aligned} W_n(x) &= (\cos \beta_n x - \cosh \beta_n x) - \\ \frac{\cos \beta_n l + \cosh \beta_n l}{\sin \beta_n l + \sinh \beta_n l} &(\sin \beta_n x - \sinh \beta_n x) \end{aligned} \quad (3.79)$$



Şekil 3.4. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotübün ilk mod şekli

Şekil 3.4'te bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotübe ait ilk mod şekli verilmiştir. Hem titreşimde hem ilk burkulma modunda nanotüp bu şekli alacaktır.

3.2. Euler-Bernoulli Teorisiyle Nanotüp Burkulması

Euler-Bernoulli kiriş teorisine göre genel burkulma denklemi Denklem (3.80)'de gösterildiği gibidir.

$$EI \frac{d^4 y}{dx^4} + P \frac{d^2 y}{dx^2} = 0 \quad (3.80)$$

İşlem kolaylığı için Denklem (3.81)'de gösterilen dönüşüm uygulanır.

$$\alpha^2 = \frac{P}{EI} \quad (3.81)$$

Denklem (3.81)'da verilen dönüşüm Denklem (3.80)'de uygulanırsa Denklem (3.82) elde edilir.

$$y^{iv} + \alpha^2 y'' = 0 \quad (3.82)$$

Denklem (3.82)'de yine işlem kolaylığı için Denklem (3.83)'te gösterilen üstel dönüşüm yapılabilir.

$$y = e^{rx} \quad (3.83)$$

Denklem (3.83)'te verilen üstel form Denklem (3.82)'de yerine yazılırsa Denklem (3.84) elde edilir.

$$Br^4 e^{rx} + \alpha^2 Br^2 e^{rx} = 0 \quad (3.84)$$

Denklem (3.84) sadeleştirilirse, Denklem (3.85) elde edilir.

$$r^4 + \alpha^2 r^2 = 0 \quad (3.85)$$

4. Dereceden olan Denklem (3.85)'ün kare formdaki kökleri Denklem (3.86)'da gösterildiği gibidir.

$$r^2 = -\alpha^2 \quad (3.86)$$

$$r_{1,2} = \pm 0 \text{ ve } r_{3,4} = \pm i\alpha$$

Denklem (3.86)'da gösterilen $r_{1,2}$ ve $r_{3,4}$ Denklem (3.85)'e ait iki adet çift katlı basit ve kompleks kökleridir. Denklem (3.86)'da verilen kökler Denklem (3.82)'de yazılıp çözülürse, Denklem (3.87) elde edilir.

$$y = C_1 \sin \alpha x + C_2 \cos \alpha x + C_3 \frac{x}{L} + C_4 \quad (3.87)$$

Denklem (3.87)'de gösterilen C_1, C_2, C_3, C_4 mesnetlenme durumuna göre sınır koşullarından hesaplanacak olan sabit sayılardır. Denklem (3.87)'nin türevi Denklem (3.88)'de verilmiştir.

$$y' = C_1 \alpha \cos \alpha x - C_2 \alpha \sin \alpha x + \frac{C_3}{L} \quad (3.88)$$

Denklem (3.87)'nin ikinci mertebeden türevi Denklem (3.89)'da verilmiştir.

$$y'' = -C_1 \alpha^2 \sin \alpha x - C_2 \alpha^2 \cos \alpha x \quad (3.89)$$

Denklem (3.87)'nin üçüncü mertebeden türevi Denklem (3.90)'da verilmiştir.

$$y''' = -C_1 \alpha^3 \cos \alpha x + C_2 \alpha^3 \sin \alpha x \quad (3.90)$$

3.2.1. Bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest olan nanotüp

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş ($x=0$) diğer ucu serbest ($x=L$) nanotübe ait sınır koşulları Denklem (3.91)'de gösterildiği gibidir.

$$y(0) = y'(0) = 0, \quad y''(L) = y'''(L) + \alpha^2 y'(L) = 0 \quad (3.91)$$

Denklem (3.91)'de gösterilen sınır koşulları sırasıyla Denklem (3.87), Denklem (3.88), Denklem (3.89) ve Denklem (3.90)'da uygulanırsa Denklem (3.92), Denklem (3.93), Denklem (3.94) ve Denklem (3.95) elde edilir.

$$y(0) = C_2 + C_4 = 0 \quad (3.92)$$

$$y'(0) = C_1 \alpha + \frac{C_3}{L} = 0 \quad (3.93)$$

$$y''(l) = -C_1 \alpha^2 \sin \alpha l - C_2 \alpha^2 \cos \alpha l = 0 \quad (3.94)$$

$$y'''(l) + \alpha^2 y'(l) = C_3 \frac{\alpha^2}{L} = 0 \quad (3.95)$$

Denklem (3.92), Denklem (3.93), Denklem (3.94), Denklem (3.95)'te gösterilen C_1, C_2, C_3, C_4 sabit sayıları hesaplamak için Denklem (3.91)'de verilen sınır koşulları uygulanırsa çözüm şu şekilde elde edilir:

$$\frac{\alpha^5}{l} \cos(\alpha l) = 0 \quad (3.96)$$

Denklem (3.96)'da gösterilen çarpımdaki iki elemandan birisinin Denklem (3.97)'de gösterildiği gibi sıfıra eşit olması gerekmektedir.

$$\frac{\alpha^5}{l} = 0 \text{ ve } \cos(\alpha l) = 0 \quad (3.97)$$

Denklem (3.97)'de Denklem (3.81)'de verilen dönüşüm uygulanırsa Denklem (3.98) elde edilir.

$$\cos\left(\sqrt{\frac{P}{EI}}l\right) = 0 \text{ yani } \sqrt{\frac{P}{EI}}l = n \frac{\pi}{2} \quad (3.98)$$

Böylece nihai burkulma denklemi Denklem (3.99)'da gösterildiği gibi elde edilir.

$$P = \frac{n^2 \pi^2 EI}{4l^2} \quad (3.99)$$

3.2.2. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotübün $x=0$ ve $x=L$ 'deki sınır koşulları Denklem (3.100) ve Denklem (3.101)'de gösterilmiştir.

$$y(0) = y'(0) = 0 \quad (3.100)$$

$$y(l) = y'(l) = 0 \quad (3.101)$$

Denklem (3.100) ve Denklem (3.101)'de gösterilen sınır koşulları sırasıyla Denklem (3.87), Denklem (3.88), Denklem (3.89) ve Denklem (3.90)'da uygulanırsa Denklem (3.102), Denklem (3.103), Denklem (3.104) ve Denklem (3.105) elde edilir.

$$y(0) = C_2 + C_4 = 0 \quad (3.102)$$

$$y'(0) = C_1 \alpha + \frac{C_3}{L} = 0 \quad (3.103)$$

$$y(l) = C_1 \sin \alpha l + C_2 \cos \alpha l + C_3 + C_4 = 0 \quad (3.104)$$

$$y'(l) = C_1 \alpha \cos \alpha l - C_2 \alpha \sin \alpha l + \frac{C_3}{L} \quad (3.105)$$

uygulanırsa Denklem (3.102), Denklem (3.103), Denklem (3.104) ve Denklem (3.105) önceki bölümlerde gösterildiği gibi matris formda yazılıp çözülürse Denklem (3.106) sonucuna ulaşılır.

$$\sin\left(\frac{1}{2} \alpha l\right) = 0 \quad (3.106)$$

Denklem (3.106) çözümünde Denklem (3.107) elde edilir.

$$\frac{1}{2} \alpha l = \pi \quad (3.107)$$

Denklem (3.81)'de gösterilen dönüşüm Denklem (3.107)'de uygulanırsa nihai burkulma denklemi Denklem (3.108)'de gösterildiği gibi elde edilir.

$$P = 4 \frac{n^2 \pi^2 EI}{l^2} \quad (3.108)$$

3.3. Boyut Etkili Yerel Olmayan Elastisite Teorisi

Klasik mekanik teorileri nano/mikro boyutlu modelleme için küçük boyut etkisini dikkate almamaktadır. Metrelerce uzunluğa sahip elemanlarda yapılan analizlerde kullanılan teorilerin ve bu teorilere ait formüllerin nano veya mikro ölçekteki elemanlara uygulanmasıyla alınacak sonuçların gerçeğe yakın veya doğru sonuçlar almak mümkün olmamaktadır. Klasik veya makro ölçekli elastisitede, herhangi bir cismin x noktasındaki gerilim durumu, klasik elastisitede sadece aynı x noktasındaki gerinim durumu ile ilişkilidir. Klasik süreklilik teorisi klasik elastisitenin kurucu denklemlerinin gerilim ve gerinim bileşenleri arasındaki cebirsel ilişkiye dayanmaktadır. Yerel olmayan elastisite teorisinde belirtildiği gibi, yerel olmayan elastikliğin doğrusal teorisi, homojen, izotropik cisimlerin yer değiştirme alanları için bir dizi tam-kısmi diferansiyel denkleme yol açmaktadır. Bu denklemlerin çözümü genel olarak zordur. Bununla birlikte, bu denklemler, bazı çekirdek türleri için bir dizi tekil kısmi denkleme indirgenebilmektedir. Böylece, yerel olmayan elastisite teorisinin kurucu denklemlerindeki bu uzamsal integraller, belirli koşullar altında eşdeğer diferansiyel kurucu denklemlere dönüştürülebilmektedir. Eringen'in yerel olmayan elastisite teorisine göre, modeldeki herhangi bir referans noktasındaki gerilme, sadece bu noktadaki gerilmelere değil, aynı zamanda modelin tüm noktalarındaki gerilmelere de bağlı olarak değişmektedir. Eringen'in yerel olmayan elastisite teorisindeki bu tanım kafes dinamiğinin atom teorisine ve fonon dağılımına ilişkin bazı deneysel gözlemlere dayanmaktadır. Bu teoride, atomlar etrafındaki uzun menzilli kuvvet dikkate alınır ve bu nedenle iç ölçek etkisi, kurucu

denkleme dahil edilmektedir. Bu teoride, temel denklemler, modeldeki ilgili noktada ilgili gerinim tensörünün katkılarının ağırlıklı ortalamalarını temsil eden uzamsal integralleri içermektedir. Böylece teori, küçük ölçek etkisini bir uzamsal integral kurucu ilişki aracılığıyla sunmaktadır. Cauchy elastisite teorisinden farklı olarak, yerel olmayan elastisite teorisi, herhangi bir sürekli ortam modelinin bir noktasındaki gerilmenin, verilen sürekli ortam ortamındaki tüm noktalardaki gerilmelerin bir fonksiyonu olduğunu varsaymaktadır (Mercan ve Civalek 2016c). Genelliği ve basitliği nedeniyle, birçok araştırmacı, çubuk, kiriş veya plaka teorilerine dayalı nano/mikro boyutlu mekanik veya biyolojik sistemlerin modellenmesi için bu teoriyi uygulamıştır (Akbas vd. 2020; Demir vd. 2017; Demir vd. 2016; Ersoy vd. 2018; Mercan vd. 2018; Mercan ve Civalek 2016a, 2017a; Mercan vd. 2020; Mercan vd. 2019; Mercan vd. 2017a; Numanoglu vd. 2019). Boyut etkisi atomik kuvvet mikroskobu, nano köprüler, nanotüpler, Nanoteller, mikro elektro mekanik sistemler (MEMS), nano elektro mekanik sistemler (NEMS), nano aktüatörler ve sensörler gibi nano ölçekli sistemlerin modellenmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Boyut etkisi dikkate alınan birçok nano/mikro sistem arasında, karbon nanotüpler, bor nitrid nanotüpler, silisyum karbür nanotüpler ve mikro köprülerde yapılan analizlerde deneysel olarak elde edilen sonuçlara daha yakın sonuçlar elde edilmiştir (Mercan 2016; Mercan ve Civalek 2016b, 2016c, 2017b, 2017c; Mercan vd. 2017b).

3.3.1. Boyut etkili titreşim

Yerel olmayan elastisite teorisine (NET) göre kurucu denklem şu şekilde ifade edilir (Eringen 1983)

$$[1 - (e_0 a)^2 \nabla^2] \sigma_{ij} = C_{ijkl} \quad (3.109)$$

Denklem (3.109)'da gösterilen $\sigma_{i,j}$ yerel olmayan (nonlocal) gerilme tansörünü, ∇^2 Laplace operatörünü, $C_{ijkl}(x')$ herhangi bir x' noktasındaki klasik veya yerel gerilme tansörünü, a malzemenin iç ve dış karakteristik özelliklerine (latis parametresi, atomlar arası mesafe vb.) bağlı bir uzunluk değerini, ve e_0 her malzemeye özel aralıklarda seçilen yerel olmayan parametredir. Buradaki e_0 yerel olmayan parametre nanotüpler için çapın iki katından daha büyük seçilmemelidir. Bir nanotüp çubuk olarak modellenirse x eksen boyuna tek boyutlu boyuna hareketi dikkate alındığında Denklem (3.109) düzenlenir ve Denklem (3.110) elde edilir.

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \sigma_{ij(x,t)} = E \varepsilon_{x(x,t)} \quad (3.110)$$

Denklem (3.110)'da gösterilen ε_x eksenel gerilmedir. Yerel elastisite (y) teorisine göre eksenel kuvvet Denklem (3.111)'de verildiği gibidir.

$$P_{(x,t)}^y = \int_A \sigma_{x(x,t)}^y dA = \int_A E \varepsilon_{x(x,t)} dA \quad (3.111)$$

Denklem (3.111)'de verilen integralde Denklem (3.110)'dan yararlanarak yerel olmayan (y_0) halde düzenlenirse Denklem (3.112) elde edilir.

$$\int_A \left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \sigma_x^{yo} dA = \int_A E \varepsilon_x(x,t) dA \quad (3.112)$$

Denklem (3.112) integre edilirse Denklem (3.113) elde edilir

$$P_{(x,t)}^{yo} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 P_{(x,t)}^{yo}}{\partial x^2} = P_{(x,t)}^y \quad (3.113)$$

$$P_{(x,t)}^y = EA \frac{\partial u_{(x,t)}}{\partial x} \quad (3.114)$$

Burada $u_{(x,t)}$ yer değiştirme bileşenidir. Denklem (3.114) eşitliği Denklem (3.113)'te yerine yazılırsa Denklem (3.115) elde edilir.

$$P_{(x,t)}^{yo} = (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 P_{(x,t)}^{yo}}{\partial x^2} + EA \frac{\partial u_{(x,t)}}{\partial x} \quad (3.115)$$

Düzgün geometriye sahip bir nanotübün sonsuz küçük bir elemanın hareket denkleminde ve yerel elastisite teorisinden Denklem (3.116) elde edilir.

$$\frac{\partial P_{(x,t)}^y}{\partial x} + K_{(x,t)} = \rho A \frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \quad (3.116)$$

Denklem (3.116)'da gösterilen $K_{(x)}$ dağıtılmış eksenel kuvvet, t ise zamandır. Denklem (3.116)'nın türevi alınırsa Denklem (3.117) elde edilir.

$$\frac{\partial^2 P_{(x,t)}^{yo}}{\partial x^2} = \rho A \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) - \frac{\partial K_{(x,t)}}{\partial x} \quad (3.117)$$

Denklem (3.117), Denklem (3.115)'te yazılırsa yerel olmayan eksenel kuvvet Denklem (3.118)'de gösterildiği gibi elde edilir.

$$P_{(x,t)}^{yo} = (e_0 a)^2 \rho A \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) - \frac{\partial K_{(x,t)}}{\partial x} \right] + EA \frac{\partial u_{(x,t)}}{\partial x} \quad (3.118)$$

Denklem (3.116) ve Denklem (3.118) kullanılarak denge denklemi Denklem (3.119)'da verildiği gibi elde edilir.

$$\rho A \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) = \quad (3.119)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((e_0 a)^2 \rho A \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) - \frac{\partial K_{(x,t)}}{\partial x} \right] + EA \frac{\partial u_{(x,t)}}{\partial x} \right) + K_{(x,t)}$$

Denklem (3.119) düzenlenirse Denklem (3.120) elde edilir.

$$\begin{aligned} \rho A \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) \right) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial u_{(x,t)}}{\partial x} \right) + K_{(x,t)} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) \end{aligned} \quad (3.120)$$

Denklem (3.120) aksenal yükün olmadığı serbest durumda Denklem (3.121)'de gösterildiği gibi yazılır.

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial t^2} \right) \rho A = EA \left(\frac{\partial^2 u_{(x,t)}}{\partial x^2} \right) \quad (3.121)$$

Nanotüpler için harmonik bir titreşim gerçekleştiği varsayarak, uzunlamasına yer değiştirme, değişkenlerin ayrılması tekniği kullanılarak tek değişkenli iki fonksiyon olarak Denklem (3.122)'de gösterildiği gibi elde edilir.

$$u_{(x,t)} = U_x \sin \omega t \quad (3.122)$$

Denklem (3.121), Denklem (3.121)'e uygulanırsa Denklem (3.123)'te gösterilen yönetici denklem elde edilir.

$$U_x \left(\frac{\gamma^2}{1 - (e_0 a)^2 \gamma^2} \right) + \frac{\partial^2 U_{(x)}}{\partial x^2} = 0 \quad (3.123)$$

Burada

$$\gamma^2 = \frac{\rho A \omega^2}{EA} \quad (3.124)$$

Taşıma matrisi yöntemi kullanılarak yönetici denklemin çözümü için Denklem (3.125) ve Denklem (3.126)'da verilen varsayımlar yapılır.

$$u_{(x,t)} = u_{(x)}^* \sin \omega t \quad (3.125)$$

$$P_{(x,t)} = P_{(x)}^* \sin \omega t \quad (3.126)$$

Bir nanotübün uzunlamasına yerel olmayan serbest titreşimini yöneten hareket denklemleri Denklem (3.127) ve Denklem (3.128)'de kural sal biçimde verilmiştir.

$$\frac{du_{(x)}^*}{dx} = \frac{P_{(x)}^*}{A(E - (e_0 a)^2 \omega^2 \rho)} \quad (3.127)$$

$$\frac{dN_{(x)}^*}{dx} = -\omega^2 \rho A u_{(x)}^* \quad (3.128)$$

Denklem (3.128), Denklem (3.127)'nin birinci dereceden türeviyle birleştirilirse Denklem (3.129) elde edilir.

$$\frac{d^2 u_{(x)}^*}{dx^2} + u_{(x)}^* \frac{\omega^2 \rho A}{EA - (e_0 a)^2 \omega^2 \rho} = 0 \quad (3.129)$$

Denklem (3.130)'da durum vektörü verilmiştir.

$$D_{(x)} = \begin{Bmatrix} u_{(x)}^* \\ N_{(x)}^* \end{Bmatrix} \quad (3.130)$$

Denklem (3.127), Denklem (3.128) ve Denklem (3.130) kullanılarak Denklem (3.131) elde edilir.

$$\frac{\partial}{\partial x} \begin{Bmatrix} u_{(x)}^* \\ N_{(x)}^* \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} u_{(x)}^* \\ N_{(x)}^* \end{Bmatrix}^* \quad (3.131)$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}} \\ -\omega^2 \rho A & 0 \end{bmatrix}$$

Denklem (3.130)'da verilen durum vektörünün birinci mertebeden türevi diferansiyel matrisi R verir. Denklem (3.131)'de verilen matristeki değerlerin tamamı sabit sayılarda oluşmaktadır. Transfer matrisi $T_{(x,\omega)}$ Denklem (3.132)'de gösterilen diferansiyel denklemi sağlamalıdır.

$$\frac{d}{dx} T_{(x,\omega)} = R T_{(x,\omega)} \quad (3.132)$$

Denklem (3.132)'un çözümü Denklem (3.133)'te verilen kapalı formda transfer matrisini verir.

$$T_{(x,\omega)} = e^{xR}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{x\omega \sqrt{\rho A}}{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}}\right) & \frac{\sin\left(\frac{x\omega \sqrt{\rho A}}{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}}\right)}{\sqrt{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}} \sqrt{EA} \omega \sqrt{\rho A}} \\ -\sqrt{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}} \sqrt{EA} \omega \sqrt{\rho A} \sin\left(\frac{x\omega \sqrt{\rho A}}{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}}\right) & \cos\left(\frac{x\omega \sqrt{\rho A}}{1 - (e_0 a)^2 \frac{\omega^2 \rho A}{EA}}\right) \end{bmatrix} \quad (3.133)$$

Sınır koşulları şöyle yazılır:

$$T_{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.134)$$

Transfer matrisi, herhangi bir noktadaki $D_{(x)}$ durum vektörünün $x=0$ 'daki $D_{(0)}$ başlangıç durum vektörü ile Denklem (3.135)'te gösterildiği gibi ilişkilendirir.

$$D_{(x)} = T_{(x,\omega)} D_{(0)}, \quad 0 \leq x \leq L \quad (3.135)$$

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotübün $x=0$ ve $x=L$ 'deki sınır koşulları Denklem (3.136), Denklem (3.137), Denklem (3.138), Denklem (3.139)'da gösterilmiştir.

$$W(0) = 0 \quad (3.136)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.137)$$

$$W(L) = 0 \quad (3.138)$$

$$\frac{dW}{dx}(L) = 0 \quad (3.139)$$

Denklem (3.136), Denklem (3.137), Denklem (3.138), Denklem (3.139)'da verilen sınır koşulları transfer matrisi formda Denklem (3.140) ve Denklem (3.141)'de gösterildiği gibidir.

$$T_{(0,\omega)}^{12} = 0 \quad (3.140)$$

$$T_{(L,\omega)}^{12} = 0 \quad (3.141)$$

Denklem (3.140) ve Denklem (3.141)'de verilen sınır koşulları, Denklem (3.133)'te kullanılıp matrisin determinantı alınırsa doğal frekans denklemi olan Denklem (3.142) elde edilir.

$$\omega = \sin \frac{\omega^2 \rho A L}{\sqrt{\omega^2 \rho A (\omega^2 \rho A (e_0 a)^2 - EA)}} \quad (3.142)$$

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş ($x=0$) diğer ucu serbest ($x=L$) nanotübe ait sınır koşulları Denklem (3.143)'te gösterildiği gibidir.

$$y(0) = y'(0) = 0, \quad y''(L) = y'''(L) + \alpha^2 y'(L) = 0 \quad (3.143)$$

Denklem (3.143)'te verilen sınır koşulları transfer matrisi formda Denklem (3.144) ve Denklem (3.145)'te verilmiştir.

$$T_{(0,\omega)}^{12} = 0 \quad (3.144)$$

$$T_{(L,\omega)}^{22} = 0 \quad (3.145)$$

Denklem (3.144) ve Denklem (3.145)'te verilen sınır koşulları, Denklem (3.133)'te kullanılıp matrisin determinantı alınırsa doğal frekans denklemi olan Denklem (3.146) elde edilir.

$$\omega = \cos \frac{\omega L \sqrt{\rho A}}{\sqrt{EA} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega^2 \rho A (e_0 a)^2}{EA} \right)}} \quad (3.146)$$

Nanotüpler çubuk değil de kiriş olarak modellenmek istenirse Euler-Bernoulli kiriş teorisine göre yer değiştirme bileşenleri Denklem (3.147), Denklem (3.148), Denklem (3.149)'da verildiği gibidir.

$$u_1(x, z) = -z \frac{dw(x)}{dx} \quad (3.147)$$

$$u_2(x, z) = 0 \quad (3.148)$$

$$u_3(x, z) = w(x) \quad (3.149)$$

Koordinat eksenine göre sırasıyla x , y , ve z eksenlerindeki yer değiştirme bileşenleri, u_1 , u_2 , u_3 yer değiştirme vektörleriyle gösterilmiştir, w ise enine yer

değiştirir. Gerilme-yer değiştirme ilişkisi Euler-Bernoulli ve von Karman'a göre Denklem (3.150)'de gösterildiği gibi ifade edilir.

$$\varepsilon_{11} = \frac{du}{dx} = -z \frac{d^2 w}{dx^2}, \quad \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = \varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0 \quad (3.150)$$

Denklem (3.150)'de gösterilen ε_{11} aksenal gerilmeyi ifade etmektedir. Nanotübün gerilme-şekil değiştirme denklemi Denklem (3.151)'de Euler-Bernoulli kiriş teorisine göre ifade edilmiştir.

$$\sigma_{11} = -Ez \frac{d^2 w}{dx^2}, \quad \sigma_{22} = \sigma_{33} = \tau_{12} = \tau_{13} = \tau_{23} = 0 \quad (3.151)$$

Denklem (3.109)'da gösterilen yerel olmayan elastisite teorisi kurucu denkleminde göre gerilme-şekil değiştirme denklemi şöyle yazılabilir:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \sigma_{11}}{\partial x^2} &= E \varepsilon_{11}, \quad \sigma_{22} = 0, \quad \sigma_{33} = 0 \quad \text{ve} \quad \tau_{12} = \tau_{21} = 0 \\ , \quad \tau_{13} &= \tau_{31} = 0, \quad \tau_{23} = \tau_{32} = 0 \end{aligned} \quad (3.152)$$

Hareket denklemi Denklem (3.153)'te gösterildiği gibi yazılır (Reddy ve Pang 2008).

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-EI \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\rho A \frac{d^2 w}{dt^2} - \frac{\rho A h^2}{12} \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} \right) \\ = \rho A \frac{d^2 w}{dt^2} - \frac{\rho A h^2}{12} \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} \end{aligned} \quad (3.153)$$

Nanotüpler için harmonik bir titreşim gerçekleştiği varsayarak, değişkenlerine ayırma metodu yardımıyla periyodik fonksiyon Denklem (3.154)'te gösterildiği gibi elde edilir.

$$w_{(x,t)} = W_{(x)} e^{i\omega t} \quad (3.154)$$

Denklem (3.154)'te gösterilen $W_{(x)}$ mod şeklini temsil etmektedir. Denklem (3.154), Denklem (3.153)'te kullanılırsa Denklem (3.155) elde edilir.

$$\begin{aligned} \left(EI - \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\rho A h^2}{12} \right) \frac{\partial^4 W}{\partial x^4} + \omega^2 \frac{\rho A h^2}{12} + \\ (e_0 a)^2 \rho A \omega^2 \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} - \rho A \omega^2 W = 0 \end{aligned} \quad (3.155)$$

Denklem (3.155)'in genel çözümü Denklem (3.156)'da gösterildiği gibidir.

$$W = c_1 \sin \eta x + c_2 \cos \eta x + c_3 \sinh \psi x + c_4 \cosh \psi x \quad (3.156)$$

Denklem (3.156)'da gösterilen c_1, c_2, c_3, c_4 sabit sayılardır, η ve ψ dönüşümlerinin değerleri sırasıyla Denklem (3.157) ve Denklem (3.158)'de gösterilmiştir.

$$\eta^2 = \frac{\omega^2 \frac{\rho A h^2}{12} + (e_0 a)^2 \rho A \omega^2 + \sqrt{\omega^2 \frac{\rho A h^2}{12} + (e_0 a)^2 \rho A \omega^2 + 4 \left(EI - \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\rho A h^2}{12} \rho A \omega^2 \right)}}{2(EI - \omega^2 (e_0 a)^2)} \quad (3.157)$$

$$\psi^2 = \frac{-\omega^2 \frac{\rho A h^2}{12} - (e_0 a)^2 \rho A \omega^2 + \sqrt{\omega^2 \frac{\rho A h^2}{12} + (e_0 a)^2 \rho A \omega^2 + 4 \left(EI - \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\rho A h^2}{12} \rho A \omega^2 \right)}}{2(EI - \omega^2 (e_0 a)^2)} \quad (3.158)$$

Denklem (3.156) kullanılarak dönme, moment ve kesme sonuçları Denklem (3.159), Denklem (3.160), Denklem (3.161) elde edilir.

$$W' = \eta(c_1 \cos \eta x - c_2 \sin \eta x) + \psi(c_3 \cosh \psi x + c_4 \sinh \psi x) \quad (3.159)$$

$$\begin{aligned} W'' &= EI - \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} - \rho A \omega^2 (e_0 a)^2 W \\ &= [\eta^2 (EI - \omega^2 (e_0 a)^2) - \rho A \omega^2 (e_0 a)^2] [c_1 \sin \eta x + c_2 \cos \eta x] \\ &\quad - [\psi^2 (EI - \omega^2 (e_0 a)^2) + \rho A \omega^2 (e_0 a)^2] * \\ &\quad [c_3 \sinh \psi x + c_4 \cosh \psi x] \end{aligned} \quad (3.160)$$

$$\begin{aligned} W''' &= EI - \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\partial^3 W}{\partial x^3} - \rho A \omega^2 (e_0 a)^2 \frac{\partial W}{\partial x} \\ &= \eta \left[\eta^2 (EI - \omega^2 (e_0 a)^2) - \frac{\rho A h^2}{12} \omega^2 \right] [c_1 \cos \eta x - c_2 \sin \eta x] \\ &\quad - \psi \left[\psi^2 (EI - \omega^2 (e_0 a)^2) + \frac{\rho A h^2}{12} \omega^2 \right] * \\ &\quad [c_3 \cosh \psi x + c_4 \sinh \psi x] \end{aligned} \quad (3.161)$$

3.3.1.1. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotübün $x=0$ ve $x=L$ 'deki sınır koşulları Denklem (3.163), Denklem (3.164), Denklem (3.165), Denklem (3.166)'da gösterilmiştir.

$$W(0) = 0 \quad (3.162)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.163)$$

$$W(l) = 0 \quad (3.164)$$

$$\frac{dW}{dx}(l) = 0 \quad (3.165)$$

Denklem (3.162), Denklem (3.163), Denklem (3.164) ve Denklem (3.165) nihai denklem olan Denklem (3.156), Denklem (3.159)'da kullanılırsa Denklem (3.166), Denklem (3.167), Denklem (3.168) elde edilir.

$$c_3 = c_4 = 0 \quad (3.166)$$

$$c_1 \left(\sin \eta L - \frac{\eta}{\psi} \sinh \psi L \right) + c_2 (\cos \eta L - \cosh \psi L) = 0 \quad (3.167)$$

$$c_1 \eta (\cos \eta L - \cosh \psi L) - c_2 (\sin \eta L + \psi \sinh \psi L) = 0 \quad (3.168)$$

Denklem (3.167) ve Denklem (3.168) iki bilinmeyenli iki denklemdir. Çözmek için matris formda Denklem (3.169)'de gösterildiği gibi yazılır.

$$\begin{bmatrix} \left(\sin \eta L - \frac{\eta}{\psi} \sinh \psi L \right) & (\cos \eta L - \cosh \psi L) \\ (\cos \eta L - \cosh \psi L) & (\sin \eta L + \psi \sinh \psi L) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.169)$$

Denklem (3.169)'in determinantını alarak Denklem (3.170) elde edilir

$$-2 + 2 \cos \eta L + \left(\frac{\eta}{\psi} - \frac{\psi}{\eta} \right) \sin \eta L \sinh \psi L = 0 \quad (3.170)$$

Denklem (3.170)'in çözümünden η 'nin alınan değeri Denklem (3.171)'e yerleştirilse nihai titreşim denklemi elde edilir

$$\omega = \sqrt{\eta^2 \frac{EI}{\left(\rho A + \frac{\rho A h^2}{12} \eta^2 \right) + (1 + (e_0 a)^2 \eta^2)}} \quad (3.171)$$

3.3.1.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş ($x=0$) diğer ucu serbest ($x=L$) nanotübe ait sınır koşulları Denklem (3.172), Denklem (3.173), Denklem (3.174) ve Denklem (3.175)'te gösterildiği gibidir.

$$W(0) = 0 \quad (3.172)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.173)$$

$$\frac{d^2W}{dx^2}(L) = 0 \quad (3.174)$$

$$\frac{d^3W}{dx^3}(L) = 0 \quad (3.175)$$

Denklem (3.172), Denklem (3.173), Denklem (3.174) ve Denklem (3.175) ve Denklem (3.156), Denklem (3.159), Denklem (3.160), Denklem (3.161)'de kullanılarak Denklem (3.176), Denklem (3.177), Denklem (3.178) ve Denklem (3.179) elde edilir.

$$c_2 + c_4 = 0 \quad (3.176)$$

$$c_1\eta + c_3\psi = 0 \quad (3.177)$$

$$\begin{aligned} & [\eta^2(EI - \omega^2(e_0a)^2) - \rho A\omega^2(e_0a)^2][c_1 \sin \eta xL + c_2 \sin \eta L] \\ & - [\psi^2(EI - \omega^2(e_0a)^2) + \rho A\omega^2(e_0a)^2] * \\ & [c_3 \sinh \psi L + c_4 \cosh \psi L] = 0 \end{aligned} \quad (3.178)$$

$$\begin{aligned} & \eta \left[\eta^2(EI - \omega^2(e_0a)^2) - \frac{\rho Ah^2}{12} \omega^2 \right] [c_1 \cos \eta L - c_2 \sin \eta L] \\ & - \psi \left[\psi^2(EI - \omega^2(e_0a)^2) + \frac{\rho Ah^2}{12} \omega^2 \right] * \\ & [c_3 \cosh \psi L + c_4 \sinh \psi L] = 0 \end{aligned} \quad (3.179)$$

Denklem (3.176), Denklem (3.177), Denklem (3.178) ve Denklem (3.179) dört bilinmeyenli dört denklemdir. Çözmek için matris formda yazılıp determinantı alınır, alınan determinantın sonucu Denklem (3.180)'de gösteriliği gibidir.

$$-2 - (e_0a)^2(\eta^2 - \psi^2) \quad (3.180)$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{\eta}{\psi} - \frac{\psi}{\eta} - 2(e_0 a)^2 \eta \psi \right) \sin \eta L \sinh \psi L \\
& + \left[(e_0 a)^2 (\eta^2 - \psi^2) + \left(\frac{\eta^2}{\psi^2} + \frac{\psi^2}{\eta^2} \right) \right] \cos \eta L \cosh \psi L = 0
\end{aligned}$$

Denklem (3.180)'in çözümünden η 'nin alınan değeri Denklem (3.181)'e yerleştirilse nihai titreşim denklemi elde edilir

$$\omega = \sqrt{\eta^2 \frac{EI}{\left(\rho A + \frac{\rho A h^2}{12} \eta^2 \right) + (1 + (e_0 a)^2 \eta^2)}} \quad (3.181)$$

3.3.2. Boyut etkili burkulma

Minimum toplam potansiyel enerji prensibi kullanılarak yönetici denklemler Denklem (3.182)'de gösterildiği gibi elde edilebilir. Denklem (3.182)'de gösterilen minimum toplam enerji potansiyeline göre, sistemdeki toplam enerjisinin ilk varyasyonu sıfır olmalıdır.

$$\delta \Pi = \delta U - \delta W = 0 \quad (3.182)$$

Denklem (3.182)'de toplam potansiyel enerji Π ile, dış yükler tarafından yapılan gerilme ve toplam enerjilerin sırasıyla ilk varyasyonları δU ve δW ile gösterilmiştir. Gerilme enerjisi olan δU nanotüpler için Euler-Bernoulli kiriş teorisine göre Denklem (3.154)'te gösterildiği gibi yazılmaktadır.

$$\delta U = \int_0^L \int_A (\sigma_{11} \delta \varepsilon_{11}) dA dx = \int_0^L \int_A \left(\sigma_{11} \left(-z \frac{d^2 \delta w}{dx^2} \right) \right) dA dx \quad (3.183)$$

Yapılan iş Denklem (3.184)'te gösterildiği gibi hesaplanmaktadır.

$$\delta W = \int_0^L \left(P \frac{dw}{dx} \delta \frac{dw}{dx} + q w(x) \right) dx \quad (3.184)$$

Denklem (3.183) ve Denklem (3.184) Denklem (3.182)'de yerine yazılırsa Denklem (3.156) elde edilir.

$$\int_0^L \left(-M \frac{d^2 \delta w}{dx^2} \right) dx - \int_0^L \left(P \frac{dw}{dx} \delta \frac{dw}{dx} + q \delta w(x) \right) dx = 0 \quad (3.185)$$

Denklem (3.185)'te gösterilen P eksenel basınç kuvvetini temsil etmektedir. Denklem (3.185)'ya kısmi integral uygulanıp varyasyon kuralları uygulanırsa burkulma denklemleri ve sınır koşulları Denklem (3.186) ve Denklem (3.187)'de gösterildiği gibi elde edilir:

$$\delta w : \frac{dw}{dx} \left(P \frac{dw}{dx} \right) - q = \frac{d^2 M}{dx^2} \quad (3.186)$$

$$\frac{dM}{dx} - P \frac{dw}{dx} = 0 \text{ ve } M = 0 \quad (3.187)$$

Denklem (3.181) kullanılarak nanotüp için yerel olmayan moment Denklem (3.159)'da gösterildiği gibi elde edilir.

$$M - (e_0 a)^2 \frac{d^2 M}{dx^2} = -EI \frac{d^2 w}{dx^2} \quad (3.188)$$

Denklem (3.186) ve Denklem (3.188) kullanılarak yerel olmayan moment Denklem (3.189)'da gösterildiği gibi elde edilir.

$$M = (e_0 a)^2 \left[\frac{d}{dx} \left(P \frac{dw}{dx} \right) - q \right] - EI \frac{d^2 w}{dx^2} \quad (3.189)$$

Denklem (3.189)'ın ikinci dereceden türevi alınıp Denklem (3.182)'da yerine yazılırsa Denklem (3.190) elde edilir.

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{dx^2} \left(EI \frac{d^2 w}{dx^2} \right) + \frac{d}{dx} \left(P \frac{dw}{dx} \right) \\ & - (e_0 a)^2 \frac{d^2}{dx^2} \left[\frac{d}{dx} \left(P \frac{dw}{dx} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.190)$$

Denklem (3.190) iki kez integre edilirse Denklem (3.191) elde edilir

$$EI \frac{d^2 w}{dx^2} - (e_0 a)^2 P \frac{d^2 w}{dx^2} + Pw = D_1 x + D_2 \quad (3.191)$$

Denklem (3.191)'de gösterilen D_1 ve D_2 integral sabitleridir. Denklem (3.191)'in homojen çözümü Denklem (3.192)'de verilmiştir.

$$\frac{d^2 w}{dx^2} + \frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P} w = 0 \quad (3.192)$$

Denklem (3.192)'nin çözümünden Denklem (3.193), Denklem (3.194), Denklem (3.195), Denklem (3.196) elde edilir.

$$w_x = c_1 \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x + c_2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x + \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) D_1 x + D_2 \quad (3.193)$$

$$W' = c_1 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x - c_2 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x + D_1 \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) \quad (3.194)$$

$$W'' = P \left[c_1 \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x + c_2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} x \right] \quad (3.195)$$

$$W''' = -PD_1 \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) \quad (3.196)$$

Denklem (3.193), Denklem (3.194), Denklem (3.195), Denklem (3.196)'da gösterilen c_1, c_2, D_1, D_2 integral sabitleri mesnetlenme koşullarından hesaplanacaktır.

3.3.2.1. Her iki ucu ankastre mesnetlenmiş nanotüp

Her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotübün $x=0$ ve $x=L$ 'deki sınır koşulları Denklem (3.197), Denklem (3.198), Denklem (3.199), Denklem (3.200)'de gösterilmiştir.

$$W(0) = 0 \quad (3.197)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.198)$$

$$W(l) = 0 \quad (3.199)$$

$$\frac{dW}{dx}(l) = 0 \quad (3.200)$$

Denklem (3.197), Denklem (3.198), Denklem (3.199), Denklem (3.200)'de verilen sınır koşulları Denklem (3.193), Denklem (3.194)'te kullanılırsa Denklem (3.201), Denklem (3.202), Denklem (3.203), Denklem (3.204) elde edilir.

$$W_{(0)} = c_2 + D_2 = 0 \quad (3.201)$$

$$W_{(0)}' = c_1 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} + D_1 \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) = 0 \quad (3.202)$$

$$W_{(L)} = c_1 \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L + c_2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L + \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) D_1 L + D_2 = 0 \quad (3.203)$$

$$W_{(L)}' = c_1 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L - c_2 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L + D_1 \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) \quad (3.204)$$

Denklem (3.201), Denklem (3.202), Denklem (3.203), Denklem (3.204) dört bilinmeyenli dört denklemdir. Bu denklemleri matris formda yazarsak Denklem (3.205) elde edilir.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} & 0 & \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P}\right) & 0 \\ \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L & \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L & \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P}\right) L & 1 \\ \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L & \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L & \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P}\right) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ D_1 \\ D_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.205)$$

Denklem (3.205)'in determinantı alınırsa Denklem (3.206) elde edilir.

$$\begin{aligned} & \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L \\ & + 2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L = 0 \end{aligned} \quad (3.206)$$

Denklem (3.206) iterasyon yöntemiyle çözülürse Denklem (3.207) elde edilir.

$$P = \frac{4\pi^2 EI}{(1 + 4(e_0 a)^2 \pi^2) L^2} \quad (3.206)$$

3.2.2.2. Bir ucu ankastre bir ucu serbest nanotüp

Bir ucu ankastre mesnetlenmiş ($x=0$) diğer ucu serbest ($x=L$) nanotübe ait sınır koşulları Denklem (3.207), Denklem (3.208), Denklem (3.209) ve Denklem (3.210)'da gösterildiği gibidir.

$$W(0) = 0 \quad (3.207)$$

$$\frac{dW}{dx}(0) = 0 \quad (3.208)$$

$$\frac{d^2 W}{dx^2}(L) = 0 \quad (3.209)$$

$$\frac{d^3 W}{dx^3}(L) = 0 \quad (3.210)$$

Denklem (3.207), Denklem (3.208), Denklem (3.209) ve Denklem (3.210)'da verilen sınır koşulları Denklem (3.193), Denklem (3.194), Denklem (3.195), Denklem (3.196)'da yerlerine yazılırsa Denklem (3.211), Denklem (3.212), Denklem (3.213) ve Denklem (3.214) elde edilir.

$$W_{(0)} = c_2 + D_2 = 0 \quad (3.211)$$

$$W_{(0)}' = c_1 \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} + D_1 \left(\frac{EI - (e_0 a)^2 P}{P} \right) = 0 \quad (3.212)$$

$$W_L'' = P \left[c_1 \sin \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L + c_2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L \right] \quad (3.213)$$

$$= 0$$

$$W_L''' = D_1 (EI - (e_0 a)^2 P) = 0 \quad (3.214)$$

Denklem (3.211), Denklem (3.212), Denklem (3.213) ve Denklem (3.214) düzenlenirse Denklem (3.215), Denklem (3.216), Denklem (3.217) ve Denklem (3.218) elde edilir.

$$c_1 = 0 \quad (3.215)$$

$$c_2 \cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L = 0 \quad (3.216)$$

$$D_1 = 0 \quad (3.217)$$

$$D_2 + c_2 \frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P} = 0 \quad (3.218)$$

Denklem (3.215), Denklem (3.216), Denklem (3.217) ve Denklem (3.218) kullanılarak aşikar olmayan çözüm Denklem (3.219), Denklem (3.220)'de verilmiştir.

$$\cos \sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} L = 0 \quad (3.219)$$

$$(3.220)$$

$$\sqrt{\frac{P}{EI - (e_0 a)^2 P}} = \frac{\pi(2n - 1)}{2L}$$

Denklem (3.219) ve Denklem (3.220) kullanılarak nihai burkulma denklemi Denklem (3.221)'de gösterildiği gibi elde edilir.

$$P = \frac{\pi^2 EI}{(4 + (e_0 a)^2 \pi^2) L^2} \quad (3.221)$$

3.4. Moleküler Dinamik

Teorik ve deneysel çalışmaların yanında moleküler dinamik (MD) simülasyonları, hem teorik tahminleri doğrulayarak hem de deneyde ulaşılması bazen zor ve hatta imkansız olan koşullarda gerçek malzeme ve laboratuvar kullanmadan analiz yapılmasına olanak sağlamaktadır. Moleküler Dinamik, modeli oluşturan atomların ve moleküllerin konumlarının sürekli değişiminin incelenmesine dayanan malzemelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerini analiz etmek için kullanılan sayısal bir yöntemdir. Atomların bir ortamdaki hareketlerini tahmin etmek için birbirleriyle nasıl etkileştiklerini anlamak gerekmektedir. Tek tek atomlar arasındaki etkileşimleri hesaplamak mümkün olsa da, milyonlarca atom veya molekül içeren büyük bir sistemi kuantum mekaniksel hassasiyetle ele almak pratik değildir. Geçmişte sıklıkla kullanılan ve günümüzde hala kullanılmakta olan yoğunluk fonksiyonel teorisi sadece birkaç yüz ila birkaç bin atomlu sistemlere uygulanabilmektedir. Büyük ölçekli sistemler için atomların etkileşim modelleri daha basit ve daha verimli olması gerekmektedir. Hesaplamalı olarak verimli bir atomlar arası potansiyel işlevi, moleküler dinamikler gibi büyük ölçekli atomistik modellemede atomlar arasındaki etkileşimleri yöneterek, kuantum mekanik simülasyonlarından daha uzun simülasyon sürelerinde çok daha karmaşık sistemleri simüle etmeyi mümkün kılmaktadır. Moleküler dinamik simülasyonlarında zaman ve boyut ölçeklerine bağlı olarak analiz yapılmaktadır. Bu yöntemde atomlar arası kuvvetler çeşitli yöntemler kullanılarak modellenmektedir. Simülasyonlarda kullanılan zaman ve boyut ölçekleri arttıkça gerçek sonuçlardan uzak sonuçlar alınmaktadır. Sonlu elemanlar yöntemlerinde incelenen modeller mezo ve makro zaman ve boyut ölçeklerinde ele alınmaktadır. Moleküler dinamik simülasyonlarıyla karşılaştırıldığında sonlu elemanlar yöntemlerinde atomik ölçekte altta yatan mekanizmaları dikkate alınmadığı için yine gerçek sonuçlardan uzak sonuçlar elde edilmektedir. Sonlu elemanlar yöntemlerinin aksine, moleküler dinamik simülasyonları, nano-metre ve nano-saniye uzunluk ve zaman ölçeklerinde çalışmaktadır ve milyonlarca atomdan oluşan sistemler doğru şekilde modellenirse doğru sonuçlar elde edilmektedir (Rentsch ve Vdi Gesell 1996). İlk moleküler dinamik fikri ve çalışmaları yaklaşık 65 yıl öncesine dayanmaktadır (Alder ve Wainwright 1957, 1959; Gibson vd. 1960). MD yöntemi var olan teorik-gerçek modellerin ve potansiyel fonksiyonların test edilmesi dahil olmak üzere çok çeşitli problemleri araştırmak için kullanılan güçlü bir yöntemdir. MD kullanılarak difüzyon ve adsorpsiyon işlemleri (Jiang ve Cheng 2019; Luo vd. 2021; Zhang vd. 2022), malzemelerin faz diyagramlarının belirlenmesi (Broughton ve Li 1987; Tanaka 1996), faz birlikteliği ve faz geçişleri (Kim 2009; Parrinello ve Rahman 1981), polimer zincirlerinin denge yapıları ve dinamiği (Rappe ve Goddard 1991; Sukumaran 2013), proteinlerin dinamiği (MacKerell vd. 1998), hidrodinamik kararsızlıklar (Dimonte vd.

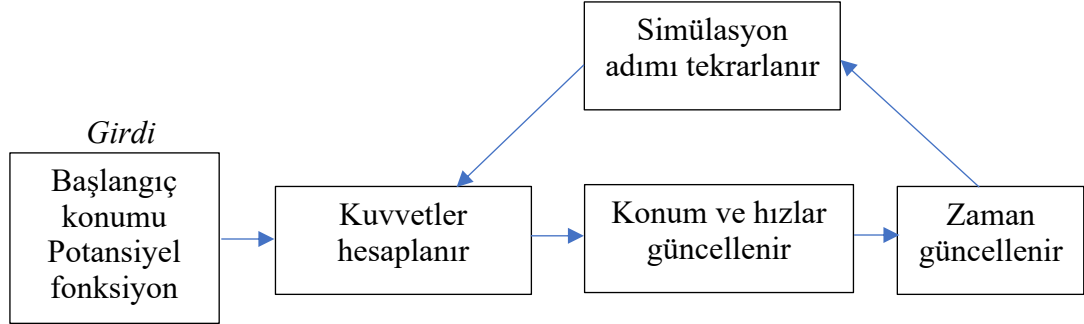
2011; Nishihara vd. 2010), malzeme özelliklerinin belirlenmesi (Klochko vd. 2022; Nasrollahpour vd. 2022; Song vd. 2022), stabilite analizleri (Lundgren vd. 2022; Sinehbaghizadeh vd. 2022; Wang vd. 2022b) yapılabilmektedir.

Sistemlerdeki atomların potansiyel enerjisini hesaplamak için kullanılan uygulanması kolay olan analitik fonksiyonlara atomlar arası potansiyeller denir. Yirminci yüzyılın ortalarına kadar atomistik simülasyonlar, mekanik enerjinin atom çiftlerinin bağ enerjilerinin eklenmesiyle hesaplandığı basit çift potansiyellerini kullanarak yörüngeyi tahmin etmek için ilk kez kullanılmıştır (Sinnott ve Brenner 2012). İlk yayınlanan MD çalışmalarından 1964 yılında yayınlanan makalede atomik etkileşimleri tanımlamak için basit bir Lennard-Jones potansiyeli kullanarak argon gazı moleküllerinin hareketi incelenmiştir. Bu öncü çalışmada atomlar belirli bir potansiyel fonksiyonuna göre etkileşime giren ve Newton'un klasik hareket denklemlerine uyan küreler olarak modellenmiştir (Rahman 1964). 1980'li yıllarda atomlar arası bağlanma ile ilgili yeni teoriler atom yöntemi potansiyelleri ve bağ düzeni potansiyelleri dahil olmak üzere çok cisimli potansiyellerin geliştirilmesine öncü olmuştur (Daw ve Baskes 1984; Finnis ve Sinclair 1984; Tersoff 1988b). Potansiyellerin gelişmiş kesinliği ve tahmin kapasiteleri sayesinde çeşitli malzeme süreçlerinin simülasyonlarını yapmak mümkün olmuştur. Erime, dislokasyon devinimi, korozyon ve ısınlama etkilerinin atomistik simülasyonları, bağ kırılmasını ve oluşumunu gerçekçi bir şekilde simüle etmek çok cisimli potansiyeller kullanılarak mümkün olmuştur.

MD tabanlı simülasyonlarda kullanılan atomlar arası potansiyellerin çoğu, deneyler veya daha yüksek doğrulukta sayısal simülasyonlar yardımıyla ampirik olarak geliştirilmektedir. Atomlar arası potansiyeller, atom sisteminin potansiyel enerjisini (E) tahmin etmek için matematiksel ifadelerdir. Yaygın olarak kullanılan atomlar arası potansiyeller; Tersoff potansiyeli (Tersoff 1986, 1988a, 1988b), Lennard-Jones (LJ) (Jones ve Chapman 1924), gömülü atom yöntemi (EAM) (Daw ve Baskes 1984), REBO (Jeong vd. 2007) ve AIREBO (Stuart vd. 2000) potansiyelleridir. MD simülasyonlarında nanotüpleri incelemek için en çok kullanılan ve doğru sonuç veren potansiyeller Lennard-Jones ve Tersoff potansiyelleridir. Bu tez kapsamında bu iki potansiyel iki farklı MD simülasyon paketinde kullanılarak sonuçlar elde edilmiş ve klasik, boyut etkili sürekli ortam mekaniği sonuçları ile karşılaştırmalı grafikler çizilmiştir.

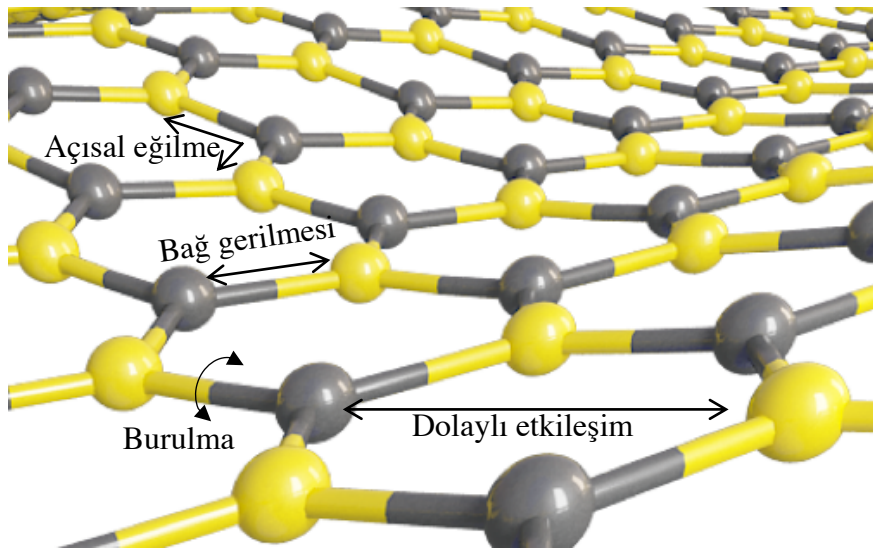
MD simülasyonda sistemin potansiyel enerjisi ve ilk atomik konumlarının bilinmesi koşuluyla, her bir atoma etki eden kuvvetler hesaplanmaktadır. Sistemdeki bütün atomların konumları hesaplamadan sonra zamana Δt eklenerek zaman güncellenir. Hassas ve doğru sonuçlar elde etmek için Δt Taylor genişlemesinin çeşitli şemalarına dayalı sayısal farklılaşmaya izin verecek kadar küçük olacak şekilde seçilmesi gerekmektedir. MD tabanlı simülasyonlarda, konum ve hız vektörleri her zaman adımından sonra, genellikle Verlet algoritması, Velocity-Verlet algoritması, Leapfrog algoritması veya Beeman'ın algoritması gibi sayısal entegrasyon algoritmalarından herhangi biri kullanılarak güncellenmektedir. En popüler güncelleme yöntemi $t + \Delta t$ 'deki konumların ve hızların t ve $t - \Delta t$ konumları ve ayrıca t 'deki ivmeler kullanılarak hesaplandığı Verlet algoritmasıdır. Simülasyonda belirlenecek olan zaman adımı, bir atomun titreşim periyodunun %10'undan daha az olmalıdır (Memarian vd. 2017). Literatürdeki çalışmalar 0.5-0.8 fs zaman adımının karbon nanotüp simülasyonlarında kabul edilebilir sonuçlar verdiğini göstermiştir (Zhang ve Huang 2008). Bu tez kapsamında yapılan moleküler dinamik simülasyonlarında 0.6 fs zaman aralığı seçilmiştir. Daha düşük zaman aralığı seçimi sonucu çok değiştirmezken daha yüksek

zaman aralığı seçimi ise gerçekten uzak sonuçlar vermektedir. 1 fs (femtosaniye) saniyenin katrilyonda biri veya nanosaniyenin milyonda birine denktir. MD simülasyonun çalışma adımları Şekil 3.5'te gösterilmiştir.



Şekil 3.5. MD simülasyonun çalışma adımları

Şekil 3.5'ten görülebileceği gibi, atomlar arası potansiyel, MD simülasyonunun önemli bir girdisidir. MD simülasyonundan doğru sonuç almak için doğru bir potansiyel fonksiyonun kullanılması gerekmektedir. Seçilecek olan potansiyel fonksiyonunun belirli sayıda özelliğe uyacak kadar esnek, aktarılabilir, doğru ve hızlı olması gerekmektedir. Simülasyonu yapılacak modele uygun bir atomlar arası potansiyel fonksiyonu için, hesaplama verimliliği, malzeme özelliklerini ve fazlarını doğru bir şekilde tahmin etme kapasitesi gibi bir dizi parametrenin kullanılmasını gerektirir. Bu nedenle, atomlar arası potansiyelin parametreleri modelin fiziksel özellikleriyle eşleşmelidir. Potansiyel değerlendirilirken erime noktası, kusur oluşum enerjileri ve yüzey enerjilerinin tümü dikkate alınmaktadır. Uydurma (fitting) prosedüründe ihtiyaç duyulan farklı özelliklerin değerlerini elde etmek için deneyler veya yoğunluk fonksiyonel teorisi simülasyonları kullanılmaktadır. Potansiyelin geliştirilmekte olduğu uygulamalar için en önemli olan özelliklerin daha iyi tanımlanmasını sağlamak için daha az önemli olan birçok özelliğin göz ardı edilmesi gerekmektedir (Brenner 2000). Şekil 3.6'da MD simülasyonda etken atomlar arası çekme ve itme kuvvetleriyle momenti gösterilmiştir.



Şekil 3.6. Silisyum Karbür yapısındaki atomlar arası kuvvetler

Moleküler dinamik simülasyonunda kritik burkulma yükünü elde etmek için nanotüpün bir ucu sabitlenir ve nanotüp daha sonra en az 500 ps'lik yeterli bir süre boyunca sabit eksenel yük altına yerleştirilir ve MD simülasyonlarının dengeden sapmamasını sağlamak için toplam enerji ve sıcaklık izlenir. Daha sonra yük artırılır ve simülasyon, nanotüpün burkulmasına neden olan kuvvet belirlenip kaydedilene kadar tekrarlanır. Kritik dışındaki diğer modlardaki burkulma yüklerini elde etmek için simülasyon başında uygulanan eksenel kuvvet artırılır (kritik yükten büyük) ve istenilen mod şekli elde edilene kadar için toplam enerji ve sıcaklık izlenir.

Moleküler dinamik simülasyonu, Newton'un 2. yasası esas alınarak, adım adım çözümünden oluşmaktadır. Newton'un 2. yasası ve türevleri şöyledir:

$$F = m_i a_i = m \frac{dv_i}{dt} = \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{dp}{dt} \quad (3.222)$$

Denklem (3.226)'da F kuvvet, m kütle, a ivme, p momentum, t zaman, i alt indisi ise atom indeksini göstermektedir. Newton'un ikinci yasasını entegre ederek atom hızları denklemleri elde edilmektedir. Elde edilen hız denklemlerini entegre edildiğinde ise atomun konum denklemi elde edilmektedir. Atom yörünge denkleminin 3. dereceden Taylor açılımının zamanda ileri ve geri versiyonları sırasıyla Denklem (3.223) ve Denklem (3.224)'te gösterilmiştir.

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + O\Delta t^4 + \frac{\ddot{r}(t)\Delta t^3}{3!} + \frac{a(t)\Delta t^2}{2} \quad (3.223)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + O\Delta t^4 - \frac{\ddot{r}(t)\Delta t^3}{3!} + \frac{a(t)\Delta t^2}{2} \quad (3.224)$$

Atomların ortalama pozisyonlarını hesaplamak için Denklem (3.223) ve Denklem (3.224) toplanırsa Denklem (3.225) elde edilir.

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + O\Delta t^4 + a(t)\Delta t^2 \quad (3.225)$$

Böylece bir sonraki adımda zaman adımını önceki konum ve mevcut hızlanma cinsinden ifade edilebilir.

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) + O\Delta t^4 + a(t)\Delta t^2 - +r(t - \Delta t) \quad (3.226)$$

Denklem (3.226)'da gösterilen entegrasyon sistemdeki atomların her biri için yapılmaktadır. Denklem (3.226)'da moleküler Dinamikte en çok kullanılan entegrasyon işlemi olan Verlet algoritmasının temelini oluşturan denklemler gösterilmiştir.

Moleküler dinamik simülasyonları dış ortamdan bağımsız kutu ismiyle tabir edilen izole bir ortamı simüle ederek çalışmaktadır bu yüzden sistemdeki toplam enerji hesaplanabilir. Aralarında doğrudan kimyasal bağ bulunan ($E_{bağlı}$) ve aralarında herhangi bir kimyasal bağ bulunmayan ($E_{dolaylı}$) ile her bir atoma etki eden kuvvetlerden dolayı oluşan enerji şöyle ifade edilir:

$$E_{bağlı} = E_{bağ\ gerilmesi} + E_{açısal\ eğilme} + E_{burulma} \quad (3.227)$$

$$E_{dolaylı} = E_{van\ der\ Waals} + E_{elektrostatik} \quad (3.228)$$

Burada

$$2E_{bağ\ gerilmesi} = \sum_{1,2\ çifti} K_b (b - b_0)^2 \quad (3.229)$$

$$2E_{açısal\ eğilme} = \sum_{1,2\ çifti} K_\gamma (\gamma - \gamma_0)^2 \quad (3.230)$$

$$2E_{burulma} = \sum_{1,4\ çifti} K_\omega (1 - \cos(n\omega))^2 \quad (3.231)$$

$$E_{elektrostatik} = \sum_{dolaylı\ (bağımsız)\ çiftler} \frac{q_i q_k}{Dr_{ik}} \quad (3.232)$$

Denklem (3.229), Denklem (3.230), Denklem (3.231)'de görüldüğü gibi birbirine bağlı olan atomlar çift bağ ile bağlı oldukları için hesaplanacak enerjilerinin de ikiyle çarpılması gerekmektedir. Yukarıda verilmeyen $E_{van\ der\ Waals}$ 'ın fonksiyonu ve değeri seçilecek olan potansiyele fonksiyonuna göre değişmektedir. Moleküler dinamikte sistemin potansiyel enerjisinin doğru hesaplanması yapılacak olan analizler için çok önemlidir ve alınacak sonuçların kalitesini belirlemektedir. Sistemin potansiyel enerjisini hesaplamak için birçok teori geliştirilmiştir. MD potansiyelleri daha fazla hesaplama yapıldıkça ve bunlar kullanıma sunulduğunda deneysel verilerle karşılaştırıldıkça geliştirilerek daha doğru hale gelmektedir.

Moleküler dinamik yönteminde mekanik anlamda bildiğimiz bütün mesnetlenme koşullarını uygulamak mümkün değildir. Serbest halde mesnet tanımlarken dikkat edilmesi gereken noktalar vardır. Bu durumda, modelin sınırındaki atomlara ek girdi tanımlanmasına gerek yoktur ancak sınırdaki atomların yalnızca tek taraftan komşu atomları olduğu için özel koşullar altında olduklarına dikkat edilmesi gerekmektedir. Serbest sınır koşulları sadece atomlar büyük mesafelerde birbirini çektiğinde kullanılabilir aksi takdirde atomlar sistemden zıt yönlerde kaçıp kutu diye tabir edilen simülasyon odasının kenarlarına değerek yanlış sonuçlar alınmasına sebep olmaktadır. Diğer yandan ankastre mesnet olarak tabir edilen, hareketi ve dönmesi kısıtlanmış durumda sınır atomlarının koordinatları sabitlenir ve hızları yapay olarak sıfıra getirilir. Bunu yapabilmek için sınır atomları MD simülasyonunun dışında bırakılır.

3.4.1. Tersoff potansiyeli

B-N ve Si-C bağı içeren malzemelerin davranışını iyileştirilmiş doğrulukla tahmin etmek için atomlar arası potansiyellerin geliştirilmesinde önemli ilerleme kaydedilmiştir. MD tabanlı bir ortamda BN veya SiC içeren malzemelerin modellenmesi için, araştırmacıların çoğu Tersoff ya da Tersoff potansiyelinin değiştirilmiş bir formunu kullanmıştır (Le 2014b; Singh vd. 2013; Zhang vd. 2011). BN'deki atomik etkileşimleri

yönetmek için birkaç araştırmacı tarafından bir harmonik kuvvet alanı da kullanılmıştır (Le 2014a, 2015). Başlangıçta tanıtılan Tersoff potansiyeli Brenner tarafından radikallerin doğal aşırı bağlanması ve yerel olmayan etkiler için ek terimler içerecek şekilde daha da değiştirilmiştir (Brenner 1990). Bu değiştirilmeye ek olarak çeşitli araştırmacılar atomistik simülasyonların doğruluğunu geliştirmek için optimize edilmiş Tersoff potansiyel parametreleri de önermiştir. Bir çalışmada kübik BN'nin yığın özelliklerini uydurarak bor için Tersoff parametrelerini önerilmiştir. Bu önermenin yapıldığı çalışmanın simülasyonlarında, BN tek bir cisim olarak ele alınmıştır, bu da hem bor hem de azot için özdeş bir parametre anlamına gelmektedir. Bu önerilen Tersoff potansiyel parametreleri yalnızca BN etkileşimleriyle sınırlıdır ve bor veya nitrojenin diğer atomlarla etkileşimlerini incelemek için genişletilememektedir (Sekkal vd. 1998). Bu potansiyeldeki parametreler BN nanodolgu maddelerinin yapısal ve termal özelliklerini tahmin etmek için birçok araştırmacı tarafından başarıyla kullanılmıştır. Başka bir çalışmada ise BN'deki deneysel fonon dağılımını etkin bir şekilde yakalayan Tersoff potansiyeli için parametreler önerilmiştir. Bu parametrelerin fonon dispersiyonunu etkin bir şekilde yakalama kabiliyeti nedeniyle, BN tabanlı nanoyapıların kafes ısı iletkenliğini tahmin etmek için daha uygun oldukları düşünülmektedir (Sevik vd. 2011). Başka bir çalışmada ise bor, nitrojen ve karbon atomları için ayrı ayrı parametre setleri önerilmiştir. Bu potansiyel parametre setinin deneysel olarak ölçülen kafes sabitlerini, yığın modülünü ve kübik bor nitrürün bağlanma enerjisini yeniden üretmek için daha uygun olduğu kabul görmüştür (Matsunaga ve Iwamoto 2001). Bu parametrelere ek olarak BN ince filmlerin iyon demeti birikimini simüle etmek için toplu BN malzemeleri için Tersoff potansiyel parametreleri önerilmiştir. Bu önerilen parametrelerle ilgili büyük bir avantaj, BN bağının sp^2 yapısını içermesidir (Albe ve Möller 1998). Bütün bu önermeler zamanla potansiyelin daha güçlü ve doğru hale gelmesini sağlamıştır.

Bir atomun çevresinin atomik geometrisini hesaba dahil etmek için potansiyel enerji hesaplamasına çok cisim bileşenlerini dahil etmek gerekmektedir. Bünyesinde n atom sayısına sahip bir sistemin toplam potansiyel enerjisi en genel halde şöyle yazılmaktadır:

$$V = \sum_i^n V_1 r_i + \sum_{i,j}^n V_2 (r_i + r_j) + \sum_{i,j,k}^n V_3 (r_i + r_j + r_k) \quad (3.233)$$

Denklem (3.233)'te gösterilen V_1 bir cisim potansiyeli, V_2 iki cisim potansiyeli, V_3 ise üç cisim potansiyelini temsil etmektedir. Yalnızca sistem elektrik alanı gibi harici bir alana maruz kaldığında tek cisim terimi kullanılmaktadır. Simülasyonlar kapalı bir kutu içerisinde yapıldığı için potansiyel enerji atomik konumlardan bağımsızdır ve atomlar arası uzunluklar ve açılar kullanılarak Denklem (3.233) daha genel bir biçimde Denklem (3.234)'te gösterildiği gibi ifade edilebilir.

$$U = \sum_{i,j}^n V_2 (r_{ij}) + \sum_{i,j,k}^n V_3 (r_{ij} + r_{jk} + \theta_{i,j,k}) \quad (3.234)$$

Denklem (3.234)'te r atomlar arası mesafeyi (i, j atomları), θ ise i atomunun j ve k atomlarıyla yaptığı açığı temsil etmektedir. Tersoff potansiyeli kuvvetten gelen açılal

bir katkıyı da içeren üç cisimli bir potansiyeldir. Tersoff'a göre potansiyel (Tersoff 1988b):

$$2E = 2 \sum_i E_i \sum_{i \neq j}^n V_{ij} \quad (3.235)$$

$$V_{ij} = k_K(r_{ij})[k_i(r_{ij}) + b_{ij}k_C(r_{ij})] \quad (3.236)$$

Denklem (3.236)'da görülen V_{ij} bağ enerjisini, k_K pürüzsüz kesme fonksiyonunu, k_i itici çift potansiyelini, k_C ise çekici çift potansiyelini temsil etmektedir ve Denklem (3.237), Denklem (3.238), Denklem (3.239)'da gösterildiği gibi hesaplanır.

$$k_i(r) = Ae^{(-\lambda_1 r)} \quad (3.237)$$

$$k_C(r) = -Be^{(-\lambda_2 r)} \quad (3.238)$$

$$k_K(r) = \begin{cases} 1 & \text{eğer } r < R - D \\ 0.5 - 0.5 \sin\left(\frac{\pi}{2}\left(\frac{r - D}{D}\right)\right) & \text{eğer } R - D < r < R + D \\ 0 & \text{eğer } r > R + D \end{cases} \quad (3.239)$$

$$b_{ij} = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta^n \xi_{ij}^n}} \quad (3.240)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} k_K(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) e^{\lambda_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m} \quad (3.241)$$

$$g(\theta) = \gamma_{ijk} \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (\cos\theta - \cos\theta_0)^2} \right) \quad (3.242)$$

Burada b_{ij} bağ sırasını temsil etmektedir. Denklem (3.239)'da görüldüğü gibi atomlar arası mesafe r simüle edilen sistemdeki molekül veya atomlara özel angstrom ölçeğindeki sabit R ve D değerlerinin farkından küçük olursa pürüzsüz kesme fonksiyonu değeri 1 olurken toplamlarından büyük olursa 0 olur. Eğer r değeri bu sabit sayıların farkından büyük ama toplamından küçükse pürüzsüz kesme değeri Denklem (3.239)'da verilen formülle hesaplanır. Ayrıca A ve B sabitleri birimi eV, $\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3$ birimi angstrom⁻¹ olan ve bağ türüne göre değişen sabitlerdir. Tersoff potansiyeli parametreleri ise β , c , d , n 'dir. Çizelge 3.1'de bu tez kapsamında incelenen BNNT ve SiCNT'ye ait moleküler dinamikte kullanılan parametreler verilmiştir (Goel vd. 2011; Kumar vd. 2016; Matsunaga ve Iwamoto 2001). Her incelenen nanotüp için kullanılacak olan elastisite modülü MD simülasyonlardan elde edilmiştir.

Çizelge 3.1. BNNT ve SiCNT'deki atom bağlarına ait moleküler dinamik parametreleri

Bağ	A (eV)	B (eV)	$\lambda_1(\text{\AA})$	$\lambda_2(\text{\AA})$	β
B-B	277.02	183.49	1.9922	1.5856	$16E^{-7}$
N-N	11.0	219.45	5.7708	2.5115	0.10562
B-N	1380	340	3.568	2.199	$12.57E^{-8}$
Si-Si	1830.8	471.18	2.4799	1.7322	$1.0999E^{-6}$
C-C	1544.8	389.63	3.4653	2.3064	$4.1612E^{-6}$
Si-C	1681.73	432.154	2.9726	2.0193	-
	c	d	n	R (Å)	D (Å)
B-B	0.52629	0.001587	3.9929	1.95	0.15
N-N	79.934	134.32	12.4498	2.15	0.15
B-N	25	4.3484	0.72751	1.95	0.05
Si-Si	100390	16.218	0.78734	2.85	0.15
C-C	19981	7.034	0.99054	1.8	0.21
Si-C	-	-	-	2.204	2.51

3.4.2. Lennard-Jones potansiyeli

Lennard-Jones modelinin 12-6 formuna göre potansiyel fonksiyonu V_r şöyle hesaplanmaktadır:

$$V_{r_{ij}} = 4\epsilon \left[\frac{\kappa_{ik}}{r_{ik}^{12}} - \frac{\kappa_{ik}}{r_{ik}^6} \right] \quad (3.243)$$

Denklem (3.243)'te r atomlar arası mesafeyi (i, j atomları), κ etkileşimin uzunluk ölçeği (atomlar arası potansiyelin sıfır olduğu sonlu mesafe), ϵ ise Lennard-Jones parametresini ifade etmektedir. Ayrıca 12 üstü, elektron bulutları üst üste geldiğinde sistemin enerjisinin aniden arttığı Pauli ilkesine dayanan atomların itme etkileşimini tanımlarken 6 üstü terimi, dispersiyon veya dipol-dipol etkileşimlerinden türetilen uzun menzilli çekici etkileşimleri tanımlamaktadır. İki farklı atom türü arasındaki ϵ ve κ parametreleri aşağıda açıklanan Lorentz-Berthelot kuralı ile hesaplanır.

$$\kappa_{ik} = \frac{\kappa_{ii} + \kappa_{kk}}{2} \quad (3.244)$$

$$\epsilon_{ik} = \sqrt{\epsilon_{ii}\epsilon_{kk}} \quad (3.245)$$

Bu ampirik potansiyel hesaplama yöntemi çekirdek elektronların güçlü itmesini temsil eden itici bir r_{ik}^{12} etkileşimi ve uzun menzilli çekici bir r_{ik}^6 van der Waals etkileşimini bir arada içermektedir. Böylece $r_{denge} = \sqrt[6]{2}\kappa$ denge mesafesi ile ayrılmış olan atomlar için gerçekçi bir potansiyel hesaplaması sağlamaktadır. Böyle basit bir potansiyel fonksiyonu kullanarak, kuvvetler $V_{r \rightarrow f_i} = - \frac{\partial}{\partial r} V_{ri}$ 'nin analitik türeviyle kolayca hesaplanır. Bu kolaylığın yanında basit bir potansiyel hesaplamasına sahip olan bu modelde iyonik, metalik veya kovalent olarak bağlı katıların özelliklerini temsil edememektedir. Karbon sistemleri de dahil olmak üzere kovalent katıları tanımlamak için, hem κ hem de π bağlarının yanı sıra açıl ve koordinasyon bağımlılıklarını hesaba

katan daha karmaşık bir potansiyel gereklidir. Kovalent bağ, diğer tüm bağ türleri arasında en güçlü olanıdır ve tekli, ikili ve hatta üçlü bağlar oluşturabilmektedir. Si-C gibi kovalent bağlı karbon sistemleri için çeşitli potansiyeller önerilmiş ve yıllar boyunca kullanılarak geliştirilmiştir.

3.4.3. Lammmps

L.A.M.M.P.S. (Large Scale Atomic/Molecular Massive Parallel Simulator) Philadelphia, Pennsylvania'da bulunan Temple üniversitesi'nden Sandia ulusal laboratuvarları tarafından geliştirilen malzeme modellemeye odaklanan klasik bir moleküler dinamik kodudur. LAMMPS, paralel iletişim için mesaj geçiş arayüzünü kullanır ve ücretsiz ve açık kaynaklı bir yazılımdır. LAMMPS, yakındaki atom veya molekülleri takip etmek için komşu listelerini kullanır. Listeler, partiküllerin yerel yoğunluğunun çok büyük olmadığı, kısa mesafelerde itici olan atom veya moleküllere sahip sistemler için optimize edilmiştir. LAMMPS yazılımının kurulumu tamamlandıktan sonra bilgisayardaki komut isteminden çalıştırılır. Alışlagelmiş analiz veya multi-fizik programları gibi bir kullanıcı arayüzüne sahip değildir. Bir arayüzünün olmaması LAMMPS kullanımını veya kullanım esnasında karşılaşılabilecek hataların çözümünü zorlaştırmaktadır. LAMMPS programını analiz yapmak için gerekli dosyalar şöyle sıralanabilir; giriş komut dosyası, veri dosyası, potansiyel dosyası. Giriş komut dosyasında LAMMPS yazılımına özel yönergelerle uygun hazırlanmış kodlar içeren yazılmış bir komut dosyası bulunmaktadır. Bu dosya atomlar arası potansiyeli, sınır koşullarını, hesaplama boyutlarını, hesaplama değişkenlerini ve çıktı parametrelerini içermektedir. Veri dosyasında ise modeldeki atomların ayrıntıları ve başlangıç koordinatlarını yazmaktadır. Potansiyel dosyasında ise sistem içinde temsil edilen atomların davranışını modellemede kullanılan potansiyel enerji verileri yazmaktadır. Çizelge 3.2'de LAMMPS için hazırlanan koordinatların belirtildiği data dosyası gösterilmiştir. Çizelge 3.2 ve Çizelge 3.3'te (10, 10) kiraliteye sahip 6 nm uzunluğunda 800 atomlu bor nitrid nanotüp için x, y ve z koordinatlarını ve bağ bilgilerini her atom için gösteren data dosyaları gösterilmiştir. Her uzunlukta (5-15 nm) her farklı kiraliteye sahip nanotüp örnekleri için ayrı ayrı dosyalar hazırlanıp moleküler dinamik simülasyonları gerçekleştirilmiştir.

Çizelge 3.2. BNNT (10, 10)'a ait koordinatların yazıldığı LAMMPS dosyası (L= 6 nm)

Atom no	Bağ tipi	Koordinatlar			Atom no	Bağ tipi	Koordinatlar		
		X	Y	Z			X	Y	Z
1	1	6.91361	0	0	401	1	6.91361	0	25.0455
2	2	6.76254	1.43742	0	402	2	6.76254	1.43742	25.0455
3	1	6.57524	2.13642	1.25227	403	1	6.57524	2.13642	26.2977
4	2	5.98737	3.45681	1.25227	404	2	5.98737	3.45681	26.2977
5	1	5.59323	4.06372	0	405	1	5.59323	4.06372	25.0455
6	2	4.62611	5.13782	0	406	2	4.62611	5.13782	25.0455
7	1	4.06372	5.59323	1.25227	407	1	4.06372	5.59323	26.2977
8	2	2.81202	6.3159	1.25227	408	2	2.81202	6.3159	26.2977
9	1	2.13642	6.57524	0	409	1	2.13642	6.57524	25.0455

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

10	2	0.722669	6.87574	0	410	2	0.722669	6.87574	25.0455
11	1	-2.65E-15	6.91361	1.25227	411	1	-2.65E-15	6.91361	26.2977
12	2	-1.43742	6.76254	1.25227	412	2	-1.43742	6.76254	26.2977
13	1	-2.13642	6.57524	0	413	1	-2.13642	6.57524	25.0455
14	2	-3.45681	5.98737	0	414	2	-3.45681	5.98737	25.0455
15	1	-4.06372	5.59323	1.25227	415	1	-4.06372	5.59323	26.2977
16	2	-5.13782	4.62611	1.25227	416	2	-5.13782	4.62611	26.2977
17	1	-5.59323	4.06372	0	417	1	-5.59323	4.06372	25.0455
18	2	-6.3159	2.81202	0	418	2	-6.3159	2.81202	25.0455
19	1	-6.57524	2.13642	1.25227	419	1	-6.57524	2.13642	26.2977
20	2	-6.87574	0.722669	1.25227	420	2	-6.87574	0.722669	26.2977
21	1	-6.91361	-5.29E-15	0	421	1	-6.91361	-5.29E-15	25.0455
22	2	-6.76254	-1.43742	0	422	2	-6.76254	-1.43742	25.0455
23	1	-6.57524	-2.13642	1.25227	423	1	-6.57524	-2.13642	26.2977
24	2	-5.98737	-3.45681	1.25227	424	2	-5.98737	-3.45681	26.2977
25	1	-5.59323	-4.06372	0	425	1	-5.59323	-4.06372	25.0455
26	2	-4.62611	-5.13782	0	426	2	-4.62611	-5.13782	25.0455
27	1	-4.06372	-5.59323	1.25227	427	1	-4.06372	-5.59323	26.2977
28	2	-2.81202	-6.3159	1.25227	428	2	-2.81202	-6.3159	26.2977
29	1	-2.13642	-6.57524	0	429	1	-2.13642	-6.57524	25.0455
30	2	-0.722669	-6.87574	0	430	2	-0.722669	-6.87574	25.0455
31	1	4.87E-15	-6.91361	1.25227	431	1	4.87E-15	-6.91361	26.2977
32	2	1.43742	-6.76254	1.25227	432	2	1.43742	-6.76254	26.2977
33	1	2.13642	-6.57524	0	433	1	2.13642	-6.57524	25.0455
34	2	3.45681	-5.98737	0	434	2	3.45681	-5.98737	25.0455
35	1	4.06372	-5.59323	1.25227	435	1	4.06372	-5.59323	26.2977
36	2	5.13782	-4.62611	1.25227	436	2	5.13782	-4.62611	26.2977
37	1	5.59323	-4.06372	0	437	1	5.59323	-4.06372	25.0455
38	2	6.3159	-2.81202	0	438	2	6.3159	-2.81202	25.0455
39	1	6.57524	-2.13642	1.25227	439	1	6.57524	-2.13642	26.2977
40	2	6.87574	-0.722669	1.25227	440	2	6.87574	-0.722669	26.2977
41	1	6.91361	0	2.50455	441	1	6.91361	0	27.55
42	2	6.76254	1.43742	2.50455	442	2	6.76254	1.43742	27.55
43	1	6.57524	2.13642	3.75682	443	1	6.57524	2.13642	28.8023
44	2	5.98737	3.45681	3.75682	444	2	5.98737	3.45681	28.8023
45	1	5.59323	4.06372	2.50455	445	1	5.59323	4.06372	27.55
46	2	4.62611	5.13782	2.50455	446	2	4.62611	5.13782	27.55
47	1	4.06372	5.59323	3.75682	447	1	4.06372	5.59323	28.8023
48	2	2.81202	6.3159	3.75682	448	2	2.81202	6.3159	28.8023

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

49	1	2.13642	6.57524	2.50455	449	1	2.13642	6.57524	27.55
50	2	0.722669	6.87574	2.50455	450	2	0.722669	6.87574	27.55
51	1	-2.65E-15	6.91361	3.75682	451	1	-2.65E-15	6.91361	28.8023
52	2	-1.43742	6.76254	3.75682	452	2	-1.43742	6.76254	28.8023
53	1	-2.13642	6.57524	2.50455	453	1	-2.13642	6.57524	27.55
54	2	-3.45681	5.98737	2.50455	454	2	-3.45681	5.98737	27.55
55	1	-4.06372	5.59323	3.75682	455	1	-4.06372	5.59323	28.8023
56	2	-5.13782	4.62611	3.75682	456	2	-5.13782	4.62611	28.8023
57	1	-5.59323	4.06372	2.50455	457	1	-5.59323	4.06372	27.55
58	2	-6.3159	2.81202	2.50455	458	2	-6.3159	2.81202	27.55
59	1	-6.57524	2.13642	3.75682	459	1	-6.57524	2.13642	28.8023
60	2	-6.87574	0.722669	3.75682	460	2	-6.87574	0.722669	28.8023
61	1	-6.91361	-5.29E-15	2.50455	461	1	-6.91361	-5.29E-15	27.55
62	2	-6.76254	-1.43742	2.50455	462	2	-6.76254	-1.43742	27.55
63	1	-6.57524	-2.13642	3.75682	463	1	-6.57524	-2.13642	28.8023
64	2	-5.98737	-3.45681	3.75682	464	2	-5.98737	-3.45681	28.8023
65	1	-5.59323	-4.06372	2.50455	465	1	-5.59323	-4.06372	27.55
66	2	-4.62611	-5.13782	2.50455	466	2	-4.62611	-5.13782	27.55
67	1	-4.06372	-5.59323	3.75682	467	1	-4.06372	-5.59323	28.8023
68	2	-2.81202	-6.3159	3.75682	468	2	-2.81202	-6.3159	28.8023
69	1	-2.13642	-6.57524	2.50455	469	1	-2.13642	-6.57524	27.55
70	2	-0.722669	-6.87574	2.50455	470	2	-0.722669	-6.87574	27.55
71	1	4.87E-15	-6.91361	3.75682	471	1	4.87E-15	-6.91361	28.8023
72	2	1.43742	-6.76254	3.75682	472	2	1.43742	-6.76254	28.8023
73	1	2.13642	-6.57524	2.50455	473	1	2.13642	-6.57524	27.55
74	2	3.45681	-5.98737	2.50455	474	2	3.45681	-5.98737	27.55
75	1	4.06372	-5.59323	3.75682	475	1	4.06372	-5.59323	28.8023
76	2	5.13782	-4.62611	3.75682	476	2	5.13782	-4.62611	28.8023
77	1	5.59323	-4.06372	2.50455	477	1	5.59323	-4.06372	27.55
78	2	6.3159	-2.81202	2.50455	478	2	6.3159	-2.81202	27.55
79	1	6.57524	-2.13642	3.75682	479	1	6.57524	-2.13642	28.8023
80	2	6.87574	-0.722669	3.75682	480	2	6.87574	-0.722669	28.8023
81	1	6.91361	0	5.00909	481	1	6.91361	0	30.0545
82	2	6.76254	1.43742	5.00909	482	2	6.76254	1.43742	30.0545
83	1	6.57524	2.13642	6.26136	483	1	6.57524	2.13642	31.3068
84	2	5.98737	3.45681	6.26136	484	2	5.98737	3.45681	31.3068
85	1	5.59323	4.06372	5.00909	485	1	5.59323	4.06372	30.0545
86	2	4.62611	5.13782	5.00909	486	2	4.62611	5.13782	30.0545
87	1	4.06372	5.59323	6.26136	487	1	4.06372	5.59323	31.3068

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

88	2	2.81202	6.3159	6.26136	488	2	2.81202	6.3159	31.3068
89	1	2.13642	6.57524	5.00909	489	1	2.13642	6.57524	30.0545
90	2	0.722669	6.87574	5.00909	490	2	0.722669	6.87574	30.0545
91	1	-2.65E-15	6.91361	6.26136	491	1	-2.65E-15	6.91361	31.3068
92	2	-1.43742	6.76254	6.26136	492	2	-1.43742	6.76254	31.3068
93	1	-2.13642	6.57524	5.00909	493	1	-2.13642	6.57524	30.0545
94	2	-3.45681	5.98737	5.00909	494	2	-3.45681	5.98737	30.0545
95	1	-4.06372	5.59323	6.26136	495	1	-4.06372	5.59323	31.3068
96	2	-5.13782	4.62611	6.26136	496	2	-5.13782	4.62611	31.3068
97	1	-5.59323	4.06372	5.00909	497	1	-5.59323	4.06372	30.0545
98	2	-6.3159	2.81202	5.00909	498	2	-6.3159	2.81202	30.0545
99	1	-6.57524	2.13642	6.26136	499	1	-6.57524	2.13642	31.3068
100	2	-6.87574	0.722669	6.26136	500	2	-6.87574	0.722669	31.3068
101	1	-6.91361	-5.29E-15	5.00909	501	1	-6.91361	-5.29E-15	30.0545
102	2	-6.76254	-1.43742	5.00909	502	2	-6.76254	-1.43742	30.0545
103	1	-6.57524	-2.13642	6.26136	503	1	-6.57524	-2.13642	31.3068
104	2	-5.98737	-3.45681	6.26136	504	2	-5.98737	-3.45681	31.3068
105	1	-5.59323	-4.06372	5.00909	505	1	-5.59323	-4.06372	30.0545
106	2	-4.62611	-5.13782	5.00909	506	2	-4.62611	-5.13782	30.0545
107	1	-4.06372	-5.59323	6.26136	507	1	-4.06372	-5.59323	31.3068
108	2	-2.81202	-6.3159	6.26136	508	2	-2.81202	-6.3159	31.3068
109	1	-2.13642	-6.57524	5.00909	509	1	-2.13642	-6.57524	30.0545
110	2	-0.722669	-6.87574	5.00909	510	2	-0.722669	-6.87574	30.0545
111	1	4.87E-15	-6.91361	6.26136	511	1	4.87E-15	-6.91361	31.3068
112	2	1.43742	-6.76254	6.26136	512	2	1.43742	-6.76254	31.3068
113	1	2.13642	-6.57524	5.00909	513	1	2.13642	-6.57524	30.0545
114	2	3.45681	-5.98737	5.00909	514	2	3.45681	-5.98737	30.0545
115	1	4.06372	-5.59323	6.26136	515	1	4.06372	-5.59323	31.3068
116	2	5.13782	-4.62611	6.26136	516	2	5.13782	-4.62611	31.3068
117	1	5.59323	-4.06372	5.00909	517	1	5.59323	-4.06372	30.0545
118	2	6.3159	-2.81202	5.00909	518	2	6.3159	-2.81202	30.0545
119	1	6.57524	-2.13642	6.26136	519	1	6.57524	-2.13642	31.3068
120	2	6.87574	-0.722669	6.26136	520	2	6.87574	-0.722669	31.3068
121	1	6.91361	0	7.51364	521	1	6.91361	0	32.5591
122	2	6.76254	1.43742	7.51364	522	2	6.76254	1.43742	32.5591
123	1	6.57524	2.13642	8.76591	523	1	6.57524	2.13642	33.8114
124	2	5.98737	3.45681	8.76591	524	2	5.98737	3.45681	33.8114
125	1	5.59323	4.06372	7.51364	525	1	5.59323	4.06372	32.5591
126	2	4.62611	5.13782	7.51364	526	2	4.62611	5.13782	32.5591

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

127	1	4.06372	5.59323	8.76591	527	1	4.06372	5.59323	33.8114
128	2	2.81202	6.3159	8.76591	528	2	2.81202	6.3159	33.8114
129	1	2.13642	6.57524	7.51364	529	1	2.13642	6.57524	32.5591
130	2	0.722669	6.87574	7.51364	530	2	0.722669	6.87574	32.5591
131	1	-2.65E-15	6.91361	8.76591	531	1	-2.65E-15	6.91361	33.8114
132	2	-1.43742	6.76254	8.76591	532	2	-1.43742	6.76254	33.8114
133	1	-2.13642	6.57524	7.51364	533	1	-2.13642	6.57524	32.5591
134	2	-3.45681	5.98737	7.51364	534	2	-3.45681	5.98737	32.5591
135	1	-4.06372	5.59323	8.76591	535	1	-4.06372	5.59323	33.8114
136	2	-5.13782	4.62611	8.76591	536	2	-5.13782	4.62611	33.8114
137	1	-5.59323	4.06372	7.51364	537	1	-5.59323	4.06372	32.5591
138	2	-6.3159	2.81202	7.51364	538	2	-6.3159	2.81202	32.5591
139	1	-6.57524	2.13642	8.76591	539	1	-6.57524	2.13642	33.8114
140	2	-6.87574	0.722669	8.76591	540	2	-6.87574	0.722669	33.8114
141	1	-6.91361	-5.29E-15	7.51364	541	1	-6.91361	-5.29E-15	32.5591
142	2	-6.76254	-1.43742	7.51364	542	2	-6.76254	-1.43742	32.5591
143	1	-6.57524	-2.13642	8.76591	543	1	-6.57524	-2.13642	33.8114
144	2	-5.98737	-3.45681	8.76591	544	2	-5.98737	-3.45681	33.8114
145	1	-5.59323	-4.06372	7.51364	545	1	-5.59323	-4.06372	32.5591
146	2	-4.62611	-5.13782	7.51364	546	2	-4.62611	-5.13782	32.5591
147	1	-4.06372	-5.59323	8.76591	547	1	-4.06372	-5.59323	33.8114
148	2	-2.81202	-6.3159	8.76591	548	2	-2.81202	-6.3159	33.8114
149	1	-2.13642	-6.57524	7.51364	549	1	-2.13642	-6.57524	32.5591
150	2	-0.722669	-6.87574	7.51364	550	2	-0.722669	-6.87574	32.5591
151	1	4.87E-15	-6.91361	8.76591	551	1	4.87E-15	-6.91361	33.8114
152	2	1.43742	-6.76254	8.76591	552	2	1.43742	-6.76254	33.8114
153	1	2.13642	-6.57524	7.51364	553	1	2.13642	-6.57524	32.5591
154	2	3.45681	-5.98737	7.51364	554	2	3.45681	-5.98737	32.5591
155	1	4.06372	-5.59323	8.76591	555	1	4.06372	-5.59323	33.8114
156	2	5.13782	-4.62611	8.76591	556	2	5.13782	-4.62611	33.8114
157	1	5.59323	-4.06372	7.51364	557	1	5.59323	-4.06372	32.5591
158	2	6.3159	-2.81202	7.51364	558	2	6.3159	-2.81202	32.5591
159	1	6.57524	-2.13642	8.76591	559	1	6.57524	-2.13642	33.8114
160	2	6.87574	-0.722669	8.76591	560	2	6.87574	-0.722669	33.8114
161	1	6.91361	0	10.0182	561	1	6.91361	0	35.0636
162	2	6.76254	1.43742	10.0182	562	2	6.76254	1.43742	35.0636
163	1	6.57524	2.13642	11.2705	563	1	6.57524	2.13642	36.3159
164	2	5.98737	3.45681	11.2705	564	2	5.98737	3.45681	36.3159
165	1	5.59323	4.06372	10.0182	565	1	5.59323	4.06372	35.0636

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

166	2	4.62611	5.13782	10.0182	566	2	4.62611	5.13782	35.0636
167	1	4.06372	5.59323	11.2705	567	1	4.06372	5.59323	36.3159
168	2	2.81202	6.3159	11.2705	568	2	2.81202	6.3159	36.3159
169	1	2.13642	6.57524	10.0182	569	1	2.13642	6.57524	35.0636
170	2	0.722669	6.87574	10.0182	570	2	0.722669	6.87574	35.0636
171	1	-2.65E-15	6.91361	11.2705	571	1	-2.65E-15	6.91361	36.3159
172	2	-1.43742	6.76254	11.2705	572	2	-1.43742	6.76254	36.3159
173	1	-2.13642	6.57524	10.0182	573	1	-2.13642	6.57524	35.0636
174	2	-3.45681	5.98737	10.0182	574	2	-3.45681	5.98737	35.0636
175	1	-4.06372	5.59323	11.2705	575	1	-4.06372	5.59323	36.3159
176	2	-5.13782	4.62611	11.2705	576	2	-5.13782	4.62611	36.3159
177	1	-5.59323	4.06372	10.0182	577	1	-5.59323	4.06372	35.0636
178	2	-6.3159	2.81202	10.0182	578	2	-6.3159	2.81202	35.0636
179	1	-6.57524	2.13642	11.2705	579	1	-6.57524	2.13642	36.3159
180	2	-6.87574	0.722669	11.2705	580	2	-6.87574	0.722669	36.3159
181	1	-6.91361	-5.29E-15	10.0182	581	1	-6.91361	-5.29E-15	35.0636
182	2	-6.76254	-1.43742	10.0182	582	2	-6.76254	-1.43742	35.0636
183	1	-6.57524	-2.13642	11.2705	583	1	-6.57524	-2.13642	36.3159
184	2	-5.98737	-3.45681	11.2705	584	2	-5.98737	-3.45681	36.3159
185	1	-5.59323	-4.06372	10.0182	585	1	-5.59323	-4.06372	35.0636
186	2	-4.62611	-5.13782	10.0182	586	2	-4.62611	-5.13782	35.0636
187	1	-4.06372	-5.59323	11.2705	587	1	-4.06372	-5.59323	36.3159
188	2	-2.81202	-6.3159	11.2705	588	2	-2.81202	-6.3159	36.3159
189	1	-2.13642	-6.57524	10.0182	589	1	-2.13642	-6.57524	35.0636
190	2	-0.722669	-6.87574	10.0182	590	2	-0.722669	-6.87574	35.0636
191	1	4.87E-15	-6.91361	11.2705	591	1	4.87E-15	-6.91361	36.3159
192	2	1.43742	-6.76254	11.2705	592	2	1.43742	-6.76254	36.3159
193	1	2.13642	-6.57524	10.0182	593	1	2.13642	-6.57524	35.0636
194	2	3.45681	-5.98737	10.0182	594	2	3.45681	-5.98737	35.0636
195	1	4.06372	-5.59323	11.2705	595	1	4.06372	-5.59323	36.3159
196	2	5.13782	-4.62611	11.2705	596	2	5.13782	-4.62611	36.3159
197	1	5.59323	-4.06372	10.0182	597	1	5.59323	-4.06372	35.0636
198	2	6.3159	-2.81202	10.0182	598	2	6.3159	-2.81202	35.0636
199	1	6.57524	-2.13642	11.2705	599	1	6.57524	-2.13642	36.3159
200	2	6.87574	-0.722669	11.2705	600	2	6.87574	-0.722669	36.3159
201	1	6.91361	0	12.5227	601	1	6.91361	0	37.5682
202	2	6.76254	1.43742	12.5227	602	2	6.76254	1.43742	37.5682
203	1	6.57524	2.13642	13.775	603	1	6.57524	2.13642	38.8205
204	2	5.98737	3.45681	13.775	604	2	5.98737	3.45681	38.8205

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

205	1	5.59323	4.06372	12.5227	605	1	5.59323	4.06372	37.5682
206	2	4.62611	5.13782	12.5227	606	2	4.62611	5.13782	37.5682
207	1	4.06372	5.59323	13.775	607	1	4.06372	5.59323	38.8205
208	2	2.81202	6.3159	13.775	608	2	2.81202	6.3159	38.8205
209	1	2.13642	6.57524	12.5227	609	1	2.13642	6.57524	37.5682
210	2	0.722669	6.87574	12.5227	610	2	0.722669	6.87574	37.5682
211	1	-2.65E-15	6.91361	13.775	611	1	-2.65E-15	6.91361	38.8205
212	2	-1.43742	6.76254	13.775	612	2	-1.43742	6.76254	38.8205
213	1	-2.13642	6.57524	12.5227	613	1	-2.13642	6.57524	37.5682
214	2	-3.45681	5.98737	12.5227	614	2	-3.45681	5.98737	37.5682
215	1	-4.06372	5.59323	13.775	615	1	-4.06372	5.59323	38.8205
216	2	-5.13782	4.62611	13.775	616	2	-5.13782	4.62611	38.8205
217	1	-5.59323	4.06372	12.5227	617	1	-5.59323	4.06372	37.5682
218	2	-6.3159	2.81202	12.5227	618	2	-6.3159	2.81202	37.5682
219	1	-6.57524	2.13642	13.775	619	1	-6.57524	2.13642	38.8205
220	2	-6.87574	0.722669	13.775	620	2	-6.87574	0.722669	38.8205
221	1	-6.91361	-5.29E-15	12.5227	621	1	-6.91361	-5.29E-15	37.5682
222	2	-6.76254	-1.43742	12.5227	622	2	-6.76254	-1.43742	37.5682
223	1	-6.57524	-2.13642	13.775	623	1	-6.57524	-2.13642	38.8205
224	2	-5.98737	-3.45681	13.775	624	2	-5.98737	-3.45681	38.8205
225	1	-5.59323	-4.06372	12.5227	625	1	-5.59323	-4.06372	37.5682
226	2	-4.62611	-5.13782	12.5227	626	2	-4.62611	-5.13782	37.5682
227	1	-4.06372	-5.59323	13.775	627	1	-4.06372	-5.59323	38.8205
228	2	-2.81202	-6.3159	13.775	628	2	-2.81202	-6.3159	38.8205
229	1	-2.13642	-6.57524	12.5227	629	1	-2.13642	-6.57524	37.5682
230	2	-0.722669	-6.87574	12.5227	630	2	-0.722669	-6.87574	37.5682
231	1	4.87E-15	-6.91361	13.775	631	1	4.87E-15	-6.91361	38.8205
232	2	1.43742	-6.76254	13.775	632	2	1.43742	-6.76254	38.8205
233	1	2.13642	-6.57524	12.5227	633	1	2.13642	-6.57524	37.5682
234	2	3.45681	-5.98737	12.5227	634	2	3.45681	-5.98737	37.5682
235	1	4.06372	-5.59323	13.775	635	1	4.06372	-5.59323	38.8205
236	2	5.13782	-4.62611	13.775	636	2	5.13782	-4.62611	38.8205
237	1	5.59323	-4.06372	12.5227	637	1	5.59323	-4.06372	37.5682
238	2	6.3159	-2.81202	12.5227	638	2	6.3159	-2.81202	37.5682
239	1	6.57524	-2.13642	13.775	639	1	6.57524	-2.13642	38.8205
240	2	6.87574	-0.722669	13.775	640	2	6.87574	-0.722669	38.8205
241	1	6.91361	0	15.0273	641	1	6.91361	0	40.0727
242	2	6.76254	1.43742	15.0273	642	2	6.76254	1.43742	40.0727
243	1	6.57524	2.13642	16.2795	643	1	6.57524	2.13642	41.325

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

244	2	5.98737	3.45681	16.2795	644	2	5.98737	3.45681	41.325
245	1	5.59323	4.06372	15.0273	645	1	5.59323	4.06372	40.0727
246	2	4.62611	5.13782	15.0273	646	2	4.62611	5.13782	40.0727
247	1	4.06372	5.59323	16.2795	647	1	4.06372	5.59323	41.325
248	2	2.81202	6.3159	16.2795	648	2	2.81202	6.3159	41.325
249	1	2.13642	6.57524	15.0273	649	1	2.13642	6.57524	40.0727
250	2	0.722669	6.87574	15.0273	650	2	0.722669	6.87574	40.0727
251	1	-2.65E-15	6.91361	16.2795	651	1	-2.65E-15	6.91361	41.325
252	2	-1.43742	6.76254	16.2795	652	2	-1.43742	6.76254	41.325
253	1	-2.13642	6.57524	15.0273	653	1	-2.13642	6.57524	40.0727
254	2	-3.45681	5.98737	15.0273	654	2	-3.45681	5.98737	40.0727
255	1	-4.06372	5.59323	16.2795	655	1	-4.06372	5.59323	41.325
256	2	-5.13782	4.62611	16.2795	656	2	-5.13782	4.62611	41.325
257	1	-5.59323	4.06372	15.0273	657	1	-5.59323	4.06372	40.0727
258	2	-6.3159	2.81202	15.0273	658	2	-6.3159	2.81202	40.0727
259	1	-6.57524	2.13642	16.2795	659	1	-6.57524	2.13642	41.325
260	2	-6.87574	0.722669	16.2795	660	2	-6.87574	0.722669	41.325
261	1	-6.91361	-5.29E-15	15.0273	661	1	-6.91361	-5.29E-15	40.0727
262	2	-6.76254	-1.43742	15.0273	662	2	-6.76254	-1.43742	40.0727
263	1	-6.57524	-2.13642	16.2795	663	1	-6.57524	-2.13642	41.325
264	2	-5.98737	-3.45681	16.2795	664	2	-5.98737	-3.45681	41.325
265	1	-5.59323	-4.06372	15.0273	665	1	-5.59323	-4.06372	40.0727
266	2	-4.62611	-5.13782	15.0273	666	2	-4.62611	-5.13782	40.0727
267	1	-4.06372	-5.59323	16.2795	667	1	-4.06372	-5.59323	41.325
268	2	-2.81202	-6.3159	16.2795	668	2	-2.81202	-6.3159	41.325
269	1	-2.13642	-6.57524	15.0273	669	1	-2.13642	-6.57524	40.0727
270	2	-0.722669	-6.87574	15.0273	670	2	-0.722669	-6.87574	40.0727
271	1	4.87E-15	-6.91361	16.2795	671	1	4.87E-15	-6.91361	41.325
272	2	1.43742	-6.76254	16.2795	672	2	1.43742	-6.76254	41.325
273	1	2.13642	-6.57524	15.0273	673	1	2.13642	-6.57524	40.0727
274	2	3.45681	-5.98737	15.0273	674	2	3.45681	-5.98737	40.0727
275	1	4.06372	-5.59323	16.2795	675	1	4.06372	-5.59323	41.325
276	2	5.13782	-4.62611	16.2795	676	2	5.13782	-4.62611	41.325
277	1	5.59323	-4.06372	15.0273	677	1	5.59323	-4.06372	40.0727
278	2	6.3159	-2.81202	15.0273	678	2	6.3159	-2.81202	40.0727
279	1	6.57524	-2.13642	16.2795	679	1	6.57524	-2.13642	41.325
280	2	6.87574	-0.722669	16.2795	680	2	6.87574	-0.722669	41.325
281	1	6.91361	0	17.5318	681	1	6.91361	0	42.5773
282	2	6.76254	1.43742	17.5318	682	2	6.76254	1.43742	42.5773

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

283	1	6.57524	2.13642	18.7841	683	1	6.57524	2.13642	43.8295
284	2	5.98737	3.45681	18.7841	684	2	5.98737	3.45681	43.8295
285	1	5.59323	4.06372	17.5318	685	1	5.59323	4.06372	42.5773
286	2	4.62611	5.13782	17.5318	686	2	4.62611	5.13782	42.5773
287	1	4.06372	5.59323	18.7841	687	1	4.06372	5.59323	43.8295
288	2	2.81202	6.3159	18.7841	688	2	2.81202	6.3159	43.8295
289	1	2.13642	6.57524	17.5318	689	1	2.13642	6.57524	42.5773
290	2	0.722669	6.87574	17.5318	690	2	0.722669	6.87574	42.5773
291	1	-2.65E-15	6.91361	18.7841	691	1	-2.65E-15	6.91361	43.8295
292	2	-1.43742	6.76254	18.7841	692	2	-1.43742	6.76254	43.8295
293	1	-2.13642	6.57524	17.5318	693	1	-2.13642	6.57524	42.5773
294	2	-3.45681	5.98737	17.5318	694	2	-3.45681	5.98737	42.5773
295	1	-4.06372	5.59323	18.7841	695	1	-4.06372	5.59323	43.8295
296	2	-5.13782	4.62611	18.7841	696	2	-5.13782	4.62611	43.8295
297	1	-5.59323	4.06372	17.5318	697	1	-5.59323	4.06372	42.5773
298	2	-6.3159	2.81202	17.5318	698	2	-6.3159	2.81202	42.5773
299	1	-6.57524	2.13642	18.7841	699	1	-6.57524	2.13642	43.8295
300	2	-6.87574	0.722669	18.7841	700	2	-6.87574	0.722669	43.8295
301	1	-6.91361	-5.29E-15	17.5318	701	1	-6.91361	-5.29E-15	42.5773
302	2	-6.76254	-1.43742	17.5318	702	2	-6.76254	-1.43742	42.5773
303	1	-6.57524	-2.13642	18.7841	703	1	-6.57524	-2.13642	43.8295
304	2	-5.98737	-3.45681	18.7841	704	2	-5.98737	-3.45681	43.8295
305	1	-5.59323	-4.06372	17.5318	705	1	-5.59323	-4.06372	42.5773
306	2	-4.62611	-5.13782	17.5318	706	2	-4.62611	-5.13782	42.5773
307	1	-4.06372	-5.59323	18.7841	707	1	-4.06372	-5.59323	43.8295
308	2	-2.81202	-6.3159	18.7841	708	2	-2.81202	-6.3159	43.8295
309	1	-2.13642	-6.57524	17.5318	709	1	-2.13642	-6.57524	42.5773
310	2	-0.722669	-6.87574	17.5318	710	2	-0.722669	-6.87574	42.5773
311	1	4.87E-15	-6.91361	18.7841	711	1	4.87E-15	-6.91361	43.8295
312	2	1.43742	-6.76254	18.7841	712	2	1.43742	-6.76254	43.8295
313	1	2.13642	-6.57524	17.5318	713	1	2.13642	-6.57524	42.5773
314	2	3.45681	-5.98737	17.5318	714	2	3.45681	-5.98737	42.5773
315	1	4.06372	-5.59323	18.7841	715	1	4.06372	-5.59323	43.8295
316	2	5.13782	-4.62611	18.7841	716	2	5.13782	-4.62611	43.8295
317	1	5.59323	-4.06372	17.5318	717	1	5.59323	-4.06372	42.5773
318	2	6.3159	-2.81202	17.5318	718	2	6.3159	-2.81202	42.5773
319	1	6.57524	-2.13642	18.7841	719	1	6.57524	-2.13642	43.8295
320	2	6.87574	-0.722669	18.7841	720	2	6.87574	-0.722669	43.8295
321	1	6.91361	0	20.0364	721	1	6.91361	0	45.0818

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

322	2	6.76254	1.43742	20.0364	722	2	6.76254	1.43742	45.0818
323	1	6.57524	2.13642	21.2886	723	1	6.57524	2.13642	46.3341
324	2	5.98737	3.45681	21.2886	724	2	5.98737	3.45681	46.3341
325	1	5.59323	4.06372	20.0364	725	1	5.59323	4.06372	45.0818
326	2	4.62611	5.13782	20.0364	726	2	4.62611	5.13782	45.0818
327	1	4.06372	5.59323	21.2886	727	1	4.06372	5.59323	46.3341
328	2	2.81202	6.3159	21.2886	728	2	2.81202	6.3159	46.3341
329	1	2.13642	6.57524	20.0364	729	1	2.13642	6.57524	45.0818
330	2	0.722669	6.87574	20.0364	730	2	0.722669	6.87574	45.0818
331	1	-2.65E-15	6.91361	21.2886	731	1	-2.65E-15	6.91361	46.3341
332	2	-1.43742	6.76254	21.2886	732	2	-1.43742	6.76254	46.3341
333	1	-2.13642	6.57524	20.0364	733	1	-2.13642	6.57524	45.0818
334	2	-3.45681	5.98737	20.0364	734	2	-3.45681	5.98737	45.0818
335	1	-4.06372	5.59323	21.2886	735	1	-4.06372	5.59323	46.3341
336	2	-5.13782	4.62611	21.2886	736	2	-5.13782	4.62611	46.3341
337	1	-5.59323	4.06372	20.0364	737	1	-5.59323	4.06372	45.0818
338	2	-6.3159	2.81202	20.0364	738	2	-6.3159	2.81202	45.0818
339	1	-6.57524	2.13642	21.2886	739	1	-6.57524	2.13642	46.3341
340	2	-6.87574	0.722669	21.2886	740	2	-6.87574	0.722669	46.3341
341	1	-6.91361	-5.29E-15	20.0364	741	1	-6.91361	-5.29E-15	45.0818
342	2	-6.76254	-1.43742	20.0364	742	2	-6.76254	-1.43742	45.0818
343	1	-6.57524	-2.13642	21.2886	743	1	-6.57524	-2.13642	46.3341
344	2	-5.98737	-3.45681	21.2886	744	2	-5.98737	-3.45681	46.3341
345	1	-5.59323	-4.06372	20.0364	745	1	-5.59323	-4.06372	45.0818
346	2	-4.62611	-5.13782	20.0364	746	2	-4.62611	-5.13782	45.0818
347	1	-4.06372	-5.59323	21.2886	747	1	-4.06372	-5.59323	46.3341
348	2	-2.81202	-6.3159	21.2886	748	2	-2.81202	-6.3159	46.3341
349	1	-2.13642	-6.57524	20.0364	749	1	-2.13642	-6.57524	45.0818
350	2	-0.722669	-6.87574	20.0364	750	2	-0.722669	-6.87574	45.0818
351	1	4.87E-15	-6.91361	21.2886	751	1	4.87E-15	-6.91361	46.3341
352	2	1.43742	-6.76254	21.2886	752	2	1.43742	-6.76254	46.3341
353	1	2.13642	-6.57524	20.0364	753	1	2.13642	-6.57524	45.0818
354	2	3.45681	-5.98737	20.0364	754	2	3.45681	-5.98737	45.0818
355	1	4.06372	-5.59323	21.2886	755	1	4.06372	-5.59323	46.3341
356	2	5.13782	-4.62611	21.2886	756	2	5.13782	-4.62611	46.3341
357	1	5.59323	-4.06372	20.0364	757	1	5.59323	-4.06372	45.0818
358	2	6.3159	-2.81202	20.0364	758	2	6.3159	-2.81202	45.0818
359	1	6.57524	-2.13642	21.2886	759	1	6.57524	-2.13642	46.3341
360	2	6.87574	-0.722669	21.2886	760	2	6.87574	-0.722669	46.3341

Devamı arkada

Çizelge 3.2'nin devamı

361	1	6.91361	0	22.5409	761	1	6.91361	0	47.5864
362	2	6.76254	1.43742	22.5409	762	2	6.76254	1.43742	47.5864
363	1	6.57524	2.13642	23.7932	763	1	6.57524	2.13642	48.8386
364	2	5.98737	3.45681	23.7932	764	2	5.98737	3.45681	48.8386
365	1	5.59323	4.06372	22.5409	765	1	5.59323	4.06372	47.5864
366	2	4.62611	5.13782	22.5409	766	2	4.62611	5.13782	47.5864
367	1	4.06372	5.59323	23.7932	767	1	4.06372	5.59323	48.8386
368	2	2.81202	6.3159	23.7932	768	2	2.81202	6.3159	48.8386
369	1	2.13642	6.57524	22.5409	769	1	2.13642	6.57524	47.5864
370	2	0.722669	6.87574	22.5409	770	2	0.722669	6.87574	47.5864
371	1	-2.65E-15	6.91361	23.7932	771	1	-2.65E-15	6.91361	48.8386
372	2	-1.43742	6.76254	23.7932	772	2	-1.43742	6.76254	48.8386
373	1	-2.13642	6.57524	22.5409	773	1	-2.13642	6.57524	47.5864
374	2	-3.45681	5.98737	22.5409	774	2	-3.45681	5.98737	47.5864
375	1	-4.06372	5.59323	23.7932	775	1	-4.06372	5.59323	48.8386
376	2	-5.13782	4.62611	23.7932	776	2	-5.13782	4.62611	48.8386
377	1	-5.59323	4.06372	22.5409	777	1	-5.59323	4.06372	47.5864
378	2	-6.3159	2.81202	22.5409	778	2	-6.3159	2.81202	47.5864
379	1	-6.57524	2.13642	23.7932	779	1	-6.57524	2.13642	48.8386
380	2	-6.87574	0.722669	23.7932	780	2	-6.87574	0.722669	48.8386
381	1	-6.91361	-5.29E-15	22.5409	781	1	-6.91361	-5.29E-15	47.5864
382	2	-6.76254	-1.43742	22.5409	782	2	-6.76254	-1.43742	47.5864
383	1	-6.57524	-2.13642	23.7932	783	1	-6.57524	-2.13642	48.8386
384	2	-5.98737	-3.45681	23.7932	784	2	-5.98737	-3.45681	48.8386
385	1	-5.59323	-4.06372	22.5409	785	1	-5.59323	-4.06372	47.5864
386	2	-4.62611	-5.13782	22.5409	786	2	-4.62611	-5.13782	47.5864
387	1	-4.06372	-5.59323	23.7932	787	1	-4.06372	-5.59323	48.8386
388	2	-2.81202	-6.3159	23.7932	788	2	-2.81202	-6.3159	48.8386
389	1	-2.13642	-6.57524	22.5409	789	1	-2.13642	-6.57524	47.5864
390	2	-0.722669	-6.87574	22.5409	790	2	-0.722669	-6.87574	47.5864
391	1	4.87E-15	-6.91361	23.7932	791	1	4.87E-15	-6.91361	48.8386
392	2	1.43742	-6.76254	23.7932	792	2	1.43742	-6.76254	48.8386
393	1	2.13642	-6.57524	22.5409	793	1	2.13642	-6.57524	47.5864
394	2	3.45681	-5.98737	22.5409	794	2	3.45681	-5.98737	47.5864
395	1	4.06372	-5.59323	23.7932	795	1	4.06372	-5.59323	48.8386
396	2	5.13782	-4.62611	23.7932	796	2	5.13782	-4.62611	48.8386
397	1	5.59323	-4.06372	22.5409	797	1	5.59323	-4.06372	47.5864
398	2	6.3159	-2.81202	22.5409	798	2	6.3159	-2.81202	47.5864
399	1	6.57524	-2.13642	23.7932	799	1	6.57524	-2.13642	48.8386
400	2	6.87574	-0.722669	23.7932	800	2	6.87574	-0.722669	48.8386

3.4.4. Gromacs

Gromacs (groningen machine for chemical simulations), Hollanda'da bulunan Groningen üniversitesi biyofiziksel kimya bölümü tarafından geliştirilmiştir. Moleküler dinamik simülasyonları ve enerji minimizasyonu gerçekleştiren bir motordur. Gromacs ilk başta proteinler ve lipidler gibi birçok karmaşık bağlı etkileşime sahip biyokimyasal moleküller için tasarlanmıştır, ancak bağlanmamış etkileşimleri (genellikle simülasyonlara hakim olan) hesaplamada son derece hızlı olduğu nanotüpler gibi için biyolojik olmayan sistemler üzerinde araştırmalar için de kullanılmaya başlanmıştır (Pall vd. 2020; Rakhshani vd. 2019; Vo vd. 2021). Gromacs içerdiği örnek polimerler, gazlar, sıvılar için hazır topolojiler, parametre dosyaları ve net bir biçimde yazılmış hata mesajları ile kullanıcı dostudur. Gromacs herhangi bir linux tabanlı makinede çalışan, ücretsiz olarak temin edilebilen bir açık kaynak pakettir. ANSI C'de yazılan yazılım, paralel bir donanım projesi için geliştirilmiştir ve işlemci kümelerinde paralelleştirme için uygundur. Komşu arama ve iç döngü performansının dikkatli bir şekilde optimizasyonu ile moleküler dinamik simülasyonu için hızlı bir pakettir. Kendine ait bir potansiyel hesaplayıcısı yoktur ancak birçok farklı potansiyel tanımlanabilmektedir. Gromacs çok yönlüdür, çünkü kullanıcı tarafından kuvvet rutinleri eklenebilir, tablolaştırılmış fonksiyonlar belirtilebilir ve analizler özelleştirilebilmektedir. Dengesizlik dinamiği ve serbest enerji belirlemeleri dahil edilmiştir. Paket 100'den fazla yardımcı program ve analiz programı içermektedir. LAMMPS'e benzer olarak Gromacs da kullanıcı dostu bir arayüze sahip değildir ve komut sistemi üzerinden çalışmaktadır. Komut sistemi altında çalışan programlar girdi verilerinin ve parametrelerinin tutarlı ve doğru olduğundan emin olmak için ikili ve üçlü kontrol yapmaktadır. Bununla birlikte başka bir avantaj ise incelenmekte olan *i* atomunun farklı görüntülerinin sabit kaymalı ayrı komşu listeleri olarak ele alınabilmesidir. Bu tür listelerin her biri için *i* atomu ilk önce doğru görüntü konumuna kaydırılır ve komşular üzerinde en içteki döngüde herhangi bir periyodik görüntü hesaplamak zorunda kalmadan tüm bağlı olmayan etkileşimler dahil değerlendirilmektedir. Çizelge 3.3'te Gromacs paketine uygun olarak hazırlanmış 6 nm uzunluğunda 800 atomlu (10, 10) kiraliteye sahip bor nitrür nanotübe ait koordinat dosyası gösterilmiştir. Sırasıyla nanotüpteki her atomun adı, türü, x, y ve z koordinatları gösterilmiştir.

2021 yılında yayınlanan bir çalışmada GROMACS kodu ve gelişmiş örnekleme teknikleri ve dengesiz simya metodolojilerinin bir kombinasyonunu kullanan PLUMED paketi ile mutlak ayrışma serbest enerjisinin hesaplanması için adım adım bir protokol tanımlanmıştır. Hesaplama protokolü, GROMACS/PLUMED giriş dosyalarının yüksek performanslı bilgi işlem tesislerinde yürütülmek üzere ayarlanmasına olanak tanıyan açık kaynaklı bir Python ara yazılımı (HPC_Drug) aracılığıyla otomatikleştirilmiştir. Önerilen protokol, GROMACS kodunun grafik işleme birimleri üzerindeki gücünden ve doğal paralelliğinden yararlanarak, atomistik düzeyde açıklanan ilaç-reseptör sistemlerindeki ayrışma sabitlerinin doğru ve kesin tahminlerini sağlama potansiyeline sahiptir. Prosedür, Pfizer tarafından önerilen bir oral antiviral olan PF-07321332'nin SARS-CoV-2'nin ana proteazı (3CLpro) ile mutlak ayrışma serbest enerjisinin hesaplanmasına uygulandığı görülmüştür. Yapılan bu çalışmada kısaca bağlı durumdaki ligand yok etme çalışmasını, toplu çözücüdeki ligand büyüme çalışmasıyla etkin bir şekilde birleştirerek çift sistemli tek kutulu ligand-reseptör ayrışma sürecini simüle etmiştir. vDSSB (toplu olarak ayrılmış ligand) kullanarak kütle çözücü ve solvatlanmış kompleks içindeki ligand solvasyon serbest enerjisinin farkı olarak bir termodinamik döngüsünde hesaplanmıştır. vDSSB, bağlanmamış ve bağlı (birleştirilmiş proteine bağlı ligand) son durumlarının geliştirilmiş

örneklemesine ve ardından ligandın kademeli olarak olduğu iki NE'den bağımsız yörünge sürüsünün üretiminden oluşan NE adımına dayandığı gösterilmiştir ve bu çalışmada SARS-CoV-2 ana proteazının PF-07321332 inhibitörünün kovalent olmayan ayrışma afinitesinin incelenmiştir (Macchiagodena vd. 2021).

Gromacs ve Lammmps moleküler dinamik simülasyonu paketlerinin karşılaştırıldığı bir çalışmada ise fosfolipid çift katmanının farklı gerilme durumları (eş-eksenli, 2:1 eş-eksensiz, 4:1 eş-eksenli olmayan) altında deforme olduğu biyomoleküllerin MD simülasyonlarını gerçekleştirmiş ve elde ettiği sonuçları karşılaştırmıştır. Gerilim-gerilme, gözenek çekirdeklenmesi ve büyümesi, hasar davranışı için sonuçlar karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak, Gromacs ve Lammmps, hasar gelişimi ve gerilim durumunun fosfolipid çift tabaka başarısızlığı üzerindeki etkisi dahil olmak üzere benzer deformasyon davranışları göstermiştir. Bununla birlikte, Gromacs, Lammmps'den daha düşük gerilmelerde daha fazla sayıda gözenek oluşturduğu ve daha düşük stres değerleri ve daha yüksek hasar değerleri ürettiği görülmüştür. Bu çalışmada özellikle fosfolipid çift katmanlarının ve diğer biyolojik sistemlerin mekanik hasarı üzerine gelecekteki MD araştırmalarında parametre ayarlarının ve simülasyon sonuçlarının çapraz kontrolüne yardımcı olacağı öngörülmüştür (Vo vd. 2021).

Çizelge 3.3. BNNT (10, 10)'a ait koordinatların yazıldığı GROMACS dosyası (L=6 nm)

Atom			Koordinatlar			Atom			Koordinatlar		
Adı	Tür	No	X	Y	Z	Adı	Tür	No	X	Y	Z
1BNT	B	1	0.691	0	0	401BNT	B	401	0.691	0	2.505
2BNT	N	2	0.676	0.144	0	402BNT	N	402	0.676	0.144	2.505
3BNT	B	3	0.658	0.214	0.125	403BNT	B	403	0.658	0.214	2.63
4BNT	N	4	0.599	0.346	0.125	404BNT	N	404	0.599	0.346	2.63
5BNT	B	5	0.559	0.406	0	405BNT	B	405	0.559	0.406	2.505
6BNT	N	6	0.463	0.514	0	406BNT	N	406	0.463	0.514	2.505
7BNT	B	7	0.406	0.559	0.125	407BNT	B	407	0.406	0.559	2.63
8BNT	N	8	0.281	0.632	0.125	408BNT	N	408	0.281	0.632	2.63
9BNT	B	9	0.214	0.658	0	409BNT	B	409	0.214	0.658	2.505
10BNT	N	10	0.072	0.688	0	410BNT	N	410	0.072	0.688	2.505
11BNT	B	11	0	0.691	0.125	411BNT	B	411	0	0.691	2.63
12BNT	N	12	-0.144	0.676	0.125	412BNT	N	412	-0.144	0.676	2.63
13BNT	B	13	-0.214	0.658	0	413BNT	B	413	-0.214	0.658	2.505
14BNT	N	14	-0.346	0.599	0	414BNT	N	414	-0.346	0.599	2.505
15BNT	B	15	-0.406	0.559	0.125	415BNT	B	415	-0.406	0.559	2.63
16BNT	N	16	-0.514	0.463	0.125	416BNT	N	416	-0.514	0.463	2.63
17BNT	B	17	-0.559	0.406	0	417BNT	B	417	-0.559	0.406	2.505
18BNT	N	18	-0.632	0.281	0	418BNT	N	418	-0.632	0.281	2.505
19BNT	B	19	-0.658	0.214	0.125	419BNT	B	419	-0.658	0.214	2.63
20BNT	N	20	-0.688	0.072	0.125	420BNT	N	420	-0.688	0.072	2.63

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

21BNT	B	21	-0.691	0	0	421BNT	B	421	-0.691	0	2.505
22BNT	N	22	-0.676	-0.144	0	422BNT	N	422	-0.676	-0.144	2.505
23BNT	B	23	-0.658	-0.214	0.125	423BNT	B	423	-0.658	-0.214	2.63
24BNT	N	24	-0.599	-0.346	0.125	424BNT	N	424	-0.599	-0.346	2.63
25BNT	B	25	-0.559	-0.406	0	425BNT	B	425	-0.559	-0.406	2.505
26BNT	N	26	-0.463	-0.514	0	426BNT	N	426	-0.463	-0.514	2.505
27BNT	B	27	-0.406	-0.559	0.125	427BNT	B	427	-0.406	-0.559	2.63
28BNT	N	28	-0.281	-0.632	0.125	428BNT	N	428	-0.281	-0.632	2.63
29BNT	B	29	-0.214	-0.658	0	429BNT	B	429	-0.214	-0.658	2.505
30BNT	N	30	-0.072	-0.688	0	430BNT	N	430	-0.072	-0.688	2.505
31BNT	B	31	0	-0.691	0.125	431BNT	B	431	0	-0.691	2.63
32BNT	N	32	0.144	-0.676	0.125	432BNT	N	432	0.144	-0.676	2.63
33BNT	B	33	0.214	-0.658	0	433BNT	B	433	0.214	-0.658	2.505
34BNT	N	34	0.346	-0.599	0	434BNT	N	434	0.346	-0.599	2.505
35BNT	B	35	0.406	-0.559	0.125	435BNT	B	435	0.406	-0.559	2.63
36BNT	N	36	0.514	-0.463	0.125	436BNT	N	436	0.514	-0.463	2.63
37BNT	B	37	0.559	-0.406	0	437BNT	B	437	0.559	-0.406	2.505
38BNT	N	38	0.632	-0.281	0	438BNT	N	438	0.632	-0.281	2.505
39BNT	B	39	0.658	-0.214	0.125	439BNT	B	439	0.658	-0.214	2.63
40BNT	N	40	0.688	-0.072	0.125	440BNT	N	440	0.688	-0.072	2.63
41BNT	B	41	0.691	0	0.25	441BNT	B	441	0.691	0	2.755
42BNT	N	42	0.676	0.144	0.25	442BNT	N	442	0.676	0.144	2.755
43BNT	B	43	0.658	0.214	0.376	443BNT	B	443	0.658	0.214	2.88
44BNT	N	44	0.599	0.346	0.376	444BNT	N	444	0.599	0.346	2.88
45BNT	B	45	0.559	0.406	0.25	445BNT	B	445	0.559	0.406	2.755
46BNT	N	46	0.463	0.514	0.25	446BNT	N	446	0.463	0.514	2.755
47BNT	B	47	0.406	0.559	0.376	447BNT	B	447	0.406	0.559	2.88
48BNT	N	48	0.281	0.632	0.376	448BNT	N	448	0.281	0.632	2.88
49BNT	B	49	0.214	0.658	0.25	449BNT	B	449	0.214	0.658	2.755
50BNT	N	50	0.072	0.688	0.25	450BNT	N	450	0.072	0.688	2.755
51BNT	B	51	0	0.691	0.376	451BNT	B	451	0	0.691	2.88
52BNT	N	52	-0.144	0.676	0.376	452BNT	N	452	-0.144	0.676	2.88
53BNT	B	53	-0.214	0.658	0.25	453BNT	B	453	-0.214	0.658	2.755
54BNT	N	54	-0.346	0.599	0.25	454BNT	N	454	-0.346	0.599	2.755
55BNT	B	55	-0.406	0.559	0.376	455BNT	B	455	-0.406	0.559	2.88
56BNT	N	56	-0.514	0.463	0.376	456BNT	N	456	-0.514	0.463	2.88
57BNT	B	57	-0.559	0.406	0.25	457BNT	B	457	-0.559	0.406	2.755
58BNT	N	58	-0.632	0.281	0.25	458BNT	N	458	-0.632	0.281	2.755
59BNT	B	59	-0.658	0.214	0.376	459BNT	B	459	-0.658	0.214	2.88

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

60BNT	N	60	-0.688	0.072	0.376	460BNT	N	460	-0.688	0.072	2.88
61BNT	B	61	-0.691	0	0.25	461BNT	B	461	-0.691	0	2.755
62BNT	N	62	-0.676	-0.144	0.25	462BNT	N	462	-0.676	-0.144	2.755
63BNT	B	63	-0.658	-0.214	0.376	463BNT	B	463	-0.658	-0.214	2.88
64BNT	N	64	-0.599	-0.346	0.376	464BNT	N	464	-0.599	-0.346	2.88
65BNT	B	65	-0.559	-0.406	0.25	465BNT	B	465	-0.559	-0.406	2.755
66BNT	N	66	-0.463	-0.514	0.25	466BNT	N	466	-0.463	-0.514	2.755
67BNT	B	67	-0.406	-0.559	0.376	467BNT	B	467	-0.406	-0.559	2.88
68BNT	N	68	-0.281	-0.632	0.376	468BNT	N	468	-0.281	-0.632	2.88
69BNT	B	69	-0.214	-0.658	0.25	469BNT	B	469	-0.214	-0.658	2.755
70BNT	N	70	-0.072	-0.688	0.25	470BNT	N	470	-0.072	-0.688	2.755
71BNT	B	71	0	-0.691	0.376	471BNT	B	471	0	-0.691	2.88
72BNT	N	72	0.144	-0.676	0.376	472BNT	N	472	0.144	-0.676	2.88
73BNT	B	73	0.214	-0.658	0.25	473BNT	B	473	0.214	-0.658	2.755
74BNT	N	74	0.346	-0.599	0.25	474BNT	N	474	0.346	-0.599	2.755
75BNT	B	75	0.406	-0.559	0.376	475BNT	B	475	0.406	-0.559	2.88
76BNT	N	76	0.514	-0.463	0.376	476BNT	N	476	0.514	-0.463	2.88
77BNT	B	77	0.559	-0.406	0.25	477BNT	B	477	0.559	-0.406	2.755
78BNT	N	78	0.632	-0.281	0.25	478BNT	N	478	0.632	-0.281	2.755
79BNT	B	79	0.658	-0.214	0.376	479BNT	B	479	0.658	-0.214	2.88
80BNT	N	80	0.688	-0.072	0.376	480BNT	N	480	0.688	-0.072	2.88
81BNT	B	81	0.691	0	0.501	481BNT	B	481	0.691	0	3.005
82BNT	N	82	0.676	0.144	0.501	482BNT	N	482	0.676	0.144	3.005
83BNT	B	83	0.658	0.214	0.626	483BNT	B	483	0.658	0.214	3.131
84BNT	N	84	0.599	0.346	0.626	484BNT	N	484	0.599	0.346	3.131
85BNT	B	85	0.559	0.406	0.501	485BNT	B	485	0.559	0.406	3.005
86BNT	N	86	0.463	0.514	0.501	486BNT	N	486	0.463	0.514	3.005
87BNT	B	87	0.406	0.559	0.626	487BNT	B	487	0.406	0.559	3.131
88BNT	N	88	0.281	0.632	0.626	488BNT	N	488	0.281	0.632	3.131
89BNT	B	89	0.214	0.658	0.501	489BNT	B	489	0.214	0.658	3.005
90BNT	N	90	0.072	0.688	0.501	490BNT	N	490	0.072	0.688	3.005
91BNT	B	91	0	0.691	0.626	491BNT	B	491	0	0.691	3.131
92BNT	N	92	-0.144	0.676	0.626	492BNT	N	492	-0.144	0.676	3.131
93BNT	B	93	-0.214	0.658	0.501	493BNT	B	493	-0.214	0.658	3.005
94BNT	N	94	-0.346	0.599	0.501	494BNT	N	494	-0.346	0.599	3.005
95BNT	B	95	-0.406	0.559	0.626	495BNT	B	495	-0.406	0.559	3.131
96BNT	N	96	-0.514	0.463	0.626	496BNT	N	496	-0.514	0.463	3.131
97BNT	B	97	-0.559	0.406	0.501	497BNT	B	497	-0.559	0.406	3.005
98BNT	N	98	-0.632	0.281	0.501	498BNT	N	498	-0.632	0.281	3.005

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

99BNT	B	99	-0.658	0.214	0.626	499BNT	B	499	-0.658	0.214	3.131
100BNT	N	100	-0.688	0.072	0.626	500BNT	N	500	-0.688	0.072	3.131
101BNT	B	101	-0.691	0	0.501	501BNT	B	501	-0.691	0	3.005
102BNT	N	102	-0.676	-0.144	0.501	502BNT	N	502	-0.676	-0.144	3.005
103BNT	B	103	-0.658	-0.214	0.626	503BNT	B	503	-0.658	-0.214	3.131
104BNT	N	104	-0.599	-0.346	0.626	504BNT	N	504	-0.599	-0.346	3.131
105BNT	B	105	-0.559	-0.406	0.501	505BNT	B	505	-0.559	-0.406	3.005
106BNT	N	106	-0.463	-0.514	0.501	506BNT	N	506	-0.463	-0.514	3.005
107BNT	B	107	-0.406	-0.559	0.626	507BNT	B	507	-0.406	-0.559	3.131
108BNT	N	108	-0.281	-0.632	0.626	508BNT	N	508	-0.281	-0.632	3.131
109BNT	B	109	-0.214	-0.658	0.501	509BNT	B	509	-0.214	-0.658	3.005
110BNT	N	110	-0.072	-0.688	0.501	510BNT	N	510	-0.072	-0.688	3.005
111BNT	B	111	0	-0.691	0.626	511BNT	B	511	0	-0.691	3.131
112BNT	N	112	0.144	-0.676	0.626	512BNT	N	512	0.144	-0.676	3.131
113BNT	B	113	0.214	-0.658	0.501	513BNT	B	513	0.214	-0.658	3.005
114BNT	N	114	0.346	-0.599	0.501	514BNT	N	514	0.346	-0.599	3.005
115BNT	B	115	0.406	-0.559	0.626	515BNT	B	515	0.406	-0.559	3.131
116BNT	N	116	0.514	-0.463	0.626	516BNT	N	516	0.514	-0.463	3.131
117BNT	B	117	0.559	-0.406	0.501	517BNT	B	517	0.559	-0.406	3.005
118BNT	N	118	0.632	-0.281	0.501	518BNT	N	518	0.632	-0.281	3.005
119BNT	B	119	0.658	-0.214	0.626	519BNT	B	519	0.658	-0.214	3.131
120BNT	N	120	0.688	-0.072	0.626	520BNT	N	520	0.688	-0.072	3.131
121BNT	B	121	0.691	0	0.751	521BNT	B	521	0.691	0	3.256
122BNT	N	122	0.676	0.144	0.751	522BNT	N	522	0.676	0.144	3.256
123BNT	B	123	0.658	0.214	0.877	523BNT	B	523	0.658	0.214	3.381
124BNT	N	124	0.599	0.346	0.877	524BNT	N	524	0.599	0.346	3.381
125BNT	B	125	0.559	0.406	0.751	525BNT	B	525	0.559	0.406	3.256
126BNT	N	126	0.463	0.514	0.751	526BNT	N	526	0.463	0.514	3.256
127BNT	B	127	0.406	0.559	0.877	527BNT	B	527	0.406	0.559	3.381
128BNT	N	128	0.281	0.632	0.877	528BNT	N	528	0.281	0.632	3.381
129BNT	B	129	0.214	0.658	0.751	529BNT	B	529	0.214	0.658	3.256
130BNT	N	130	0.072	0.688	0.751	530BNT	N	530	0.072	0.688	3.256
131BNT	B	131	0	0.691	0.877	531BNT	B	531	0	0.691	3.381
132BNT	N	132	-0.144	0.676	0.877	532BNT	N	532	-0.144	0.676	3.381
133BNT	B	133	-0.214	0.658	0.751	533BNT	B	533	-0.214	0.658	3.256
134BNT	N	134	-0.346	0.599	0.751	534BNT	N	534	-0.346	0.599	3.256
135BNT	B	135	-0.406	0.559	0.877	535BNT	B	535	-0.406	0.559	3.381
136BNT	N	136	-0.514	0.463	0.877	536BNT	N	536	-0.514	0.463	3.381
137BNT	B	137	-0.559	0.406	0.751	537BNT	B	537	-0.559	0.406	3.256

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

138BNT	N	138	-0.632	0.281	0.751	538BNT	N	538	-0.632	0.281	3.256
139BNT	B	139	-0.658	0.214	0.877	539BNT	B	539	-0.658	0.214	3.381
140BNT	N	140	-0.688	0.072	0.877	540BNT	N	540	-0.688	0.072	3.381
141BNT	B	141	-0.691	0	0.751	541BNT	B	541	-0.691	0	3.256
142BNT	N	142	-0.676	-0.144	0.751	542BNT	N	542	-0.676	-0.144	3.256
143BNT	B	143	-0.658	-0.214	0.877	543BNT	B	543	-0.658	-0.214	3.381
144BNT	N	144	-0.599	-0.346	0.877	544BNT	N	544	-0.599	-0.346	3.381
145BNT	B	145	-0.559	-0.406	0.751	545BNT	B	545	-0.559	-0.406	3.256
146BNT	N	146	-0.463	-0.514	0.751	546BNT	N	546	-0.463	-0.514	3.256
147BNT	B	147	-0.406	-0.559	0.877	547BNT	B	547	-0.406	-0.559	3.381
148BNT	N	148	-0.281	-0.632	0.877	548BNT	N	548	-0.281	-0.632	3.381
149BNT	B	149	-0.214	-0.658	0.751	549BNT	B	549	-0.214	-0.658	3.256
150BNT	N	150	-0.072	-0.688	0.751	550BNT	N	550	-0.072	-0.688	3.256
151BNT	B	151	0	-0.691	0.877	551BNT	B	551	0	-0.691	3.381
152BNT	N	152	0.144	-0.676	0.877	552BNT	N	552	0.144	-0.676	3.381
153BNT	B	153	0.214	-0.658	0.751	553BNT	B	553	0.214	-0.658	3.256
154BNT	N	154	0.346	-0.599	0.751	554BNT	N	554	0.346	-0.599	3.256
155BNT	B	155	0.406	-0.559	0.877	555BNT	B	555	0.406	-0.559	3.381
156BNT	N	156	0.514	-0.463	0.877	556BNT	N	556	0.514	-0.463	3.381
157BNT	B	157	0.559	-0.406	0.751	557BNT	B	557	0.559	-0.406	3.256
158BNT	N	158	0.632	-0.281	0.751	558BNT	N	558	0.632	-0.281	3.256
159BNT	B	159	0.658	-0.214	0.877	559BNT	B	559	0.658	-0.214	3.381
160BNT	N	160	0.688	-0.072	0.877	560BNT	N	560	0.688	-0.072	3.381
161BNT	B	161	0.691	0	1.002	561BNT	B	561	0.691	0	3.506
162BNT	N	162	0.676	0.144	1.002	562BNT	N	562	0.676	0.144	3.506
163BNT	B	163	0.658	0.214	1.127	563BNT	B	563	0.658	0.214	3.632
164BNT	N	164	0.599	0.346	1.127	564BNT	N	564	0.599	0.346	3.632
165BNT	B	165	0.559	0.406	1.002	565BNT	B	565	0.559	0.406	3.506
166BNT	N	166	0.463	0.514	1.002	566BNT	N	566	0.463	0.514	3.506
167BNT	B	167	0.406	0.559	1.127	567BNT	B	567	0.406	0.559	3.632
168BNT	N	168	0.281	0.632	1.127	568BNT	N	568	0.281	0.632	3.632
169BNT	B	169	0.214	0.658	1.002	569BNT	B	569	0.214	0.658	3.506
170BNT	N	170	0.072	0.688	1.002	570BNT	N	570	0.072	0.688	3.506
171BNT	B	171	0	0.691	1.127	571BNT	B	571	0	0.691	3.632
172BNT	N	172	-0.144	0.676	1.127	572BNT	N	572	-0.144	0.676	3.632
173BNT	B	173	-0.214	0.658	1.002	573BNT	B	573	-0.214	0.658	3.506
174BNT	N	174	-0.346	0.599	1.002	574BNT	N	574	-0.346	0.599	3.506
175BNT	B	175	-0.406	0.559	1.127	575BNT	B	575	-0.406	0.559	3.632
176BNT	N	176	-0.514	0.463	1.127	576BNT	N	576	-0.514	0.463	3.632

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

177BNT	B	177	-0.559	0.406	1.002	577BNT	B	577	-0.559	0.406	3.506
178BNT	N	178	-0.632	0.281	1.002	578BNT	N	578	-0.632	0.281	3.506
179BNT	B	179	-0.658	0.214	1.127	579BNT	B	579	-0.658	0.214	3.632
180BNT	N	180	-0.688	0.072	1.127	580BNT	N	580	-0.688	0.072	3.632
181BNT	B	181	-0.691	0	1.002	581BNT	B	581	-0.691	0	3.506
182BNT	N	182	-0.676	-0.144	1.002	582BNT	N	582	-0.676	-0.144	3.506
183BNT	B	183	-0.658	-0.214	1.127	583BNT	B	583	-0.658	-0.214	3.632
184BNT	N	184	-0.599	-0.346	1.127	584BNT	N	584	-0.599	-0.346	3.632
185BNT	B	185	-0.559	-0.406	1.002	585BNT	B	585	-0.559	-0.406	3.506
186BNT	N	186	-0.463	-0.514	1.002	586BNT	N	586	-0.463	-0.514	3.506
187BNT	B	187	-0.406	-0.559	1.127	587BNT	B	587	-0.406	-0.559	3.632
188BNT	N	188	-0.281	-0.632	1.127	588BNT	N	588	-0.281	-0.632	3.632
189BNT	B	189	-0.214	-0.658	1.002	589BNT	B	589	-0.214	-0.658	3.506
190BNT	N	190	-0.072	-0.688	1.002	590BNT	N	590	-0.072	-0.688	3.506
191BNT	B	191	0	-0.691	1.127	591BNT	B	591	0	-0.691	3.632
192BNT	N	192	0.144	-0.676	1.127	592BNT	N	592	0.144	-0.676	3.632
193BNT	B	193	0.214	-0.658	1.002	593BNT	B	593	0.214	-0.658	3.506
194BNT	N	194	0.346	-0.599	1.002	594BNT	N	594	0.346	-0.599	3.506
195BNT	B	195	0.406	-0.559	1.127	595BNT	B	595	0.406	-0.559	3.632
196BNT	N	196	0.514	-0.463	1.127	596BNT	N	596	0.514	-0.463	3.632
197BNT	B	197	0.559	-0.406	1.002	597BNT	B	597	0.559	-0.406	3.506
198BNT	N	198	0.632	-0.281	1.002	598BNT	N	598	0.632	-0.281	3.506
199BNT	B	199	0.658	-0.214	1.127	599BNT	B	599	0.658	-0.214	3.632
200BNT	N	200	0.688	-0.072	1.127	600BNT	N	600	0.688	-0.072	3.632
201BNT	B	201	0.691	0	1.252	601BNT	B	601	0.691	0	3.757
202BNT	N	202	0.676	0.144	1.252	602BNT	N	602	0.676	0.144	3.757
203BNT	B	203	0.658	0.214	1.377	603BNT	B	603	0.658	0.214	3.882
204BNT	N	204	0.599	0.346	1.377	604BNT	N	604	0.599	0.346	3.882
205BNT	B	205	0.559	0.406	1.252	605BNT	B	605	0.559	0.406	3.757
206BNT	N	206	0.463	0.514	1.252	606BNT	N	606	0.463	0.514	3.757
207BNT	B	207	0.406	0.559	1.377	607BNT	B	607	0.406	0.559	3.882
208BNT	N	208	0.281	0.632	1.377	608BNT	N	608	0.281	0.632	3.882
209BNT	B	209	0.214	0.658	1.252	609BNT	B	609	0.214	0.658	3.757
210BNT	N	210	0.072	0.688	1.252	610BNT	N	610	0.072	0.688	3.757
211BNT	B	211	0	0.691	1.377	611BNT	B	611	0	0.691	3.882
212BNT	N	212	-0.144	0.676	1.377	612BNT	N	612	-0.144	0.676	3.882
213BNT	B	213	-0.214	0.658	1.252	613BNT	B	613	-0.214	0.658	3.757
214BNT	N	214	-0.346	0.599	1.252	614BNT	N	614	-0.346	0.599	3.757
215BNT	B	215	-0.406	0.559	1.377	615BNT	B	615	-0.406	0.559	3.882

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

216BNT	N	216	-0.514	0.463	1.377	616BNT	N	616	-0.514	0.463	3.882
217BNT	B	217	-0.559	0.406	1.252	617BNT	B	617	-0.559	0.406	3.757
218BNT	N	218	-0.632	0.281	1.252	618BNT	N	618	-0.632	0.281	3.757
219BNT	B	219	-0.658	0.214	1.377	619BNT	B	619	-0.658	0.214	3.882
220BNT	N	220	-0.688	0.072	1.377	620BNT	N	620	-0.688	0.072	3.882
221BNT	B	221	-0.691	0	1.252	621BNT	B	621	-0.691	0	3.757
222BNT	N	222	-0.676	-0.144	1.252	622BNT	N	622	-0.676	-0.144	3.757
223BNT	B	223	-0.658	-0.214	1.377	623BNT	B	623	-0.658	-0.214	3.882
224BNT	N	224	-0.599	-0.346	1.377	624BNT	N	624	-0.599	-0.346	3.882
225BNT	B	225	-0.559	-0.406	1.252	625BNT	B	625	-0.559	-0.406	3.757
226BNT	N	226	-0.463	-0.514	1.252	626BNT	N	626	-0.463	-0.514	3.757
227BNT	B	227	-0.406	-0.559	1.377	627BNT	B	627	-0.406	-0.559	3.882
228BNT	N	228	-0.281	-0.632	1.377	628BNT	N	628	-0.281	-0.632	3.882
229BNT	B	229	-0.214	-0.658	1.252	629BNT	B	629	-0.214	-0.658	3.757
230BNT	N	230	-0.072	-0.688	1.252	630BNT	N	630	-0.072	-0.688	3.757
231BNT	B	231	0	-0.691	1.377	631BNT	B	631	0	-0.691	3.882
232BNT	N	232	0.144	-0.676	1.377	632BNT	N	632	0.144	-0.676	3.882
233BNT	B	233	0.214	-0.658	1.252	633BNT	B	633	0.214	-0.658	3.757
234BNT	N	234	0.346	-0.599	1.252	634BNT	N	634	0.346	-0.599	3.757
235BNT	B	235	0.406	-0.559	1.377	635BNT	B	635	0.406	-0.559	3.882
236BNT	N	236	0.514	-0.463	1.377	636BNT	N	636	0.514	-0.463	3.882
237BNT	B	237	0.559	-0.406	1.252	637BNT	B	637	0.559	-0.406	3.757
238BNT	N	238	0.632	-0.281	1.252	638BNT	N	638	0.632	-0.281	3.757
239BNT	B	239	0.658	-0.214	1.377	639BNT	B	639	0.658	-0.214	3.882
240BNT	N	240	0.688	-0.072	1.377	640BNT	N	640	0.688	-0.072	3.882
241BNT	B	241	0.691	0	1.503	641BNT	B	641	0.691	0	4.007
242BNT	N	242	0.676	0.144	1.503	642BNT	N	642	0.676	0.144	4.007
243BNT	B	243	0.658	0.214	1.628	643BNT	B	643	0.658	0.214	4.133
244BNT	N	244	0.599	0.346	1.628	644BNT	N	644	0.599	0.346	4.133
245BNT	B	245	0.559	0.406	1.503	645BNT	B	645	0.559	0.406	4.007
246BNT	N	246	0.463	0.514	1.503	646BNT	N	646	0.463	0.514	4.007
247BNT	B	247	0.406	0.559	1.628	647BNT	B	647	0.406	0.559	4.133
248BNT	N	248	0.281	0.632	1.628	648BNT	N	648	0.281	0.632	4.133
249BNT	B	249	0.214	0.658	1.503	649BNT	B	649	0.214	0.658	4.007
250BNT	N	250	0.072	0.688	1.503	650BNT	N	650	0.072	0.688	4.007
251BNT	B	251	0	0.691	1.628	651BNT	B	651	0	0.691	4.133
252BNT	N	252	-0.144	0.676	1.628	652BNT	N	652	-0.144	0.676	4.133
253BNT	B	253	-0.214	0.658	1.503	653BNT	B	653	-0.214	0.658	4.007
254BNT	N	254	-0.346	0.599	1.503	654BNT	N	654	-0.346	0.599	4.007

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

255BNT	B	255	-0.406	0.559	1.628	655BNT	B	655	-0.406	0.559	4.133
256BNT	N	256	-0.514	0.463	1.628	656BNT	N	656	-0.514	0.463	4.133
257BNT	B	257	-0.559	0.406	1.503	657BNT	B	657	-0.559	0.406	4.007
258BNT	N	258	-0.632	0.281	1.503	658BNT	N	658	-0.632	0.281	4.007
259BNT	B	259	-0.658	0.214	1.628	659BNT	B	659	-0.658	0.214	4.133
260BNT	N	260	-0.688	0.072	1.628	660BNT	N	660	-0.688	0.072	4.133
261BNT	B	261	-0.691	0	1.503	661BNT	B	661	-0.691	0	4.007
262BNT	N	262	-0.676	-0.144	1.503	662BNT	N	662	-0.676	-0.144	4.007
263BNT	B	263	-0.658	-0.214	1.628	663BNT	B	663	-0.658	-0.214	4.133
264BNT	N	264	-0.599	-0.346	1.628	664BNT	N	664	-0.599	-0.346	4.133
265BNT	B	265	-0.559	-0.406	1.503	665BNT	B	665	-0.559	-0.406	4.007
266BNT	N	266	-0.463	-0.514	1.503	666BNT	N	666	-0.463	-0.514	4.007
267BNT	B	267	-0.406	-0.559	1.628	667BNT	B	667	-0.406	-0.559	4.133
268BNT	N	268	-0.281	-0.632	1.628	668BNT	N	668	-0.281	-0.632	4.133
269BNT	B	269	-0.214	-0.658	1.503	669BNT	B	669	-0.214	-0.658	4.007
270BNT	N	270	-0.072	-0.688	1.503	670BNT	N	670	-0.072	-0.688	4.007
271BNT	B	271	0	-0.691	1.628	671BNT	B	671	0	-0.691	4.133
272BNT	N	272	0.144	-0.676	1.628	672BNT	N	672	0.144	-0.676	4.133
273BNT	B	273	0.214	-0.658	1.503	673BNT	B	673	0.214	-0.658	4.007
274BNT	N	274	0.346	-0.599	1.503	674BNT	N	674	0.346	-0.599	4.007
275BNT	B	275	0.406	-0.559	1.628	675BNT	B	675	0.406	-0.559	4.133
276BNT	N	276	0.514	-0.463	1.628	676BNT	N	676	0.514	-0.463	4.133
277BNT	B	277	0.559	-0.406	1.503	677BNT	B	677	0.559	-0.406	4.007
278BNT	N	278	0.632	-0.281	1.503	678BNT	N	678	0.632	-0.281	4.007
279BNT	B	279	0.658	-0.214	1.628	679BNT	B	679	0.658	-0.214	4.133
280BNT	N	280	0.688	-0.072	1.628	680BNT	N	680	0.688	-0.072	4.133
281BNT	B	281	0.691	0	1.753	681BNT	B	681	0.691	0	4.258
282BNT	N	282	0.676	0.144	1.753	682BNT	N	682	0.676	0.144	4.258
283BNT	B	283	0.658	0.214	1.878	683BNT	B	683	0.658	0.214	4.383
284BNT	N	284	0.599	0.346	1.878	684BNT	N	684	0.599	0.346	4.383
285BNT	B	285	0.559	0.406	1.753	685BNT	B	685	0.559	0.406	4.258
286BNT	N	286	0.463	0.514	1.753	686BNT	N	686	0.463	0.514	4.258
287BNT	B	287	0.406	0.559	1.878	687BNT	B	687	0.406	0.559	4.383
288BNT	N	288	0.281	0.632	1.878	688BNT	N	688	0.281	0.632	4.383
289BNT	B	289	0.214	0.658	1.753	689BNT	B	689	0.214	0.658	4.258
290BNT	N	290	0.072	0.688	1.753	690BNT	N	690	0.072	0.688	4.258
291BNT	B	291	0	0.691	1.878	691BNT	B	691	0	0.691	4.383
292BNT	N	292	-0.144	0.676	1.878	692BNT	N	692	-0.144	0.676	4.383
293BNT	B	293	-0.214	0.658	1.753	693BNT	B	693	-0.214	0.658	4.258

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

294BNT	N	294	-0.346	0.599	1.753	694BNT	N	694	-0.346	0.599	4.258
295BNT	B	295	-0.406	0.559	1.878	695BNT	B	695	-0.406	0.559	4.383
296BNT	N	296	-0.514	0.463	1.878	696BNT	N	696	-0.514	0.463	4.383
297BNT	B	297	-0.559	0.406	1.753	697BNT	B	697	-0.559	0.406	4.258
298BNT	N	298	-0.632	0.281	1.753	698BNT	N	698	-0.632	0.281	4.258
299BNT	B	299	-0.658	0.214	1.878	699BNT	B	699	-0.658	0.214	4.383
300BNT	N	300	-0.688	0.072	1.878	700BNT	N	700	-0.688	0.072	4.383
301BNT	B	301	-0.691	0	1.753	701BNT	B	701	-0.691	0	4.258
302BNT	N	302	-0.676	-0.144	1.753	702BNT	N	702	-0.676	-0.144	4.258
303BNT	B	303	-0.658	-0.214	1.878	703BNT	B	703	-0.658	-0.214	4.383
304BNT	N	304	-0.599	-0.346	1.878	704BNT	N	704	-0.599	-0.346	4.383
305BNT	B	305	-0.559	-0.406	1.753	705BNT	B	705	-0.559	-0.406	4.258
306BNT	N	306	-0.463	-0.514	1.753	706BNT	N	706	-0.463	-0.514	4.258
307BNT	B	307	-0.406	-0.559	1.878	707BNT	B	707	-0.406	-0.559	4.383
308BNT	N	308	-0.281	-0.632	1.878	708BNT	N	708	-0.281	-0.632	4.383
309BNT	B	309	-0.214	-0.658	1.753	709BNT	B	709	-0.214	-0.658	4.258
310BNT	N	310	-0.072	-0.688	1.753	710BNT	N	710	-0.072	-0.688	4.258
311BNT	B	311	0	-0.691	1.878	711BNT	B	711	0	-0.691	4.383
312BNT	N	312	0.144	-0.676	1.878	712BNT	N	712	0.144	-0.676	4.383
313BNT	B	313	0.214	-0.658	1.753	713BNT	B	713	0.214	-0.658	4.258
314BNT	N	314	0.346	-0.599	1.753	714BNT	N	714	0.346	-0.599	4.258
315BNT	B	315	0.406	-0.559	1.878	715BNT	B	715	0.406	-0.559	4.383
316BNT	N	316	0.514	-0.463	1.878	716BNT	N	716	0.514	-0.463	4.383
317BNT	B	317	0.559	-0.406	1.753	717BNT	B	717	0.559	-0.406	4.258
318BNT	N	318	0.632	-0.281	1.753	718BNT	N	718	0.632	-0.281	4.258
319BNT	B	319	0.658	-0.214	1.878	719BNT	B	719	0.658	-0.214	4.383
320BNT	N	320	0.688	-0.072	1.878	720BNT	N	720	0.688	-0.072	4.383
321BNT	B	321	0.691	0	2.004	721BNT	B	721	0.691	0	4.508
322BNT	N	322	0.676	0.144	2.004	722BNT	N	722	0.676	0.144	4.508
323BNT	B	323	0.658	0.214	2.129	723BNT	B	723	0.658	0.214	4.633
324BNT	N	324	0.599	0.346	2.129	724BNT	N	724	0.599	0.346	4.633
325BNT	B	325	0.559	0.406	2.004	725BNT	B	725	0.559	0.406	4.508
326BNT	N	326	0.463	0.514	2.004	726BNT	N	726	0.463	0.514	4.508
327BNT	B	327	0.406	0.559	2.129	727BNT	B	727	0.406	0.559	4.633
328BNT	N	328	0.281	0.632	2.129	728BNT	N	728	0.281	0.632	4.633
329BNT	B	329	0.214	0.658	2.004	729BNT	B	729	0.214	0.658	4.508
330BNT	N	330	0.072	0.688	2.004	730BNT	N	730	0.072	0.688	4.508
331BNT	B	331	0	0.691	2.129	731BNT	B	731	0	0.691	4.633
332BNT	N	332	-0.144	0.676	2.129	732BNT	N	732	-0.144	0.676	4.633

Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

333BNT	B	333	-0.214	0.658	2.004	733BNT	B	733	-0.214	0.658	4.508
334BNT	N	334	-0.346	0.599	2.004	734BNT	N	734	-0.346	0.599	4.508
335BNT	B	335	-0.406	0.559	2.129	735BNT	B	735	-0.406	0.559	4.633
336BNT	N	336	-0.514	0.463	2.129	736BNT	N	736	-0.514	0.463	4.633
337BNT	B	337	-0.559	0.406	2.004	737BNT	B	737	-0.559	0.406	4.508
338BNT	N	338	-0.632	0.281	2.004	738BNT	N	738	-0.632	0.281	4.508
339BNT	B	339	-0.658	0.214	2.129	739BNT	B	739	-0.658	0.214	4.633
340BNT	N	340	-0.688	0.072	2.129	740BNT	N	740	-0.688	0.072	4.633
341BNT	B	341	-0.691	0	2.004	741BNT	B	741	-0.691	0	4.508
342BNT	N	342	-0.676	-0.144	2.004	742BNT	N	742	-0.676	-0.144	4.508
343BNT	B	343	-0.658	-0.214	2.129	743BNT	B	743	-0.658	-0.214	4.633
344BNT	N	344	-0.599	-0.346	2.129	744BNT	N	744	-0.599	-0.346	4.633
345BNT	B	345	-0.559	-0.406	2.004	745BNT	B	745	-0.559	-0.406	4.508
346BNT	N	346	-0.463	-0.514	2.004	746BNT	N	746	-0.463	-0.514	4.508
347BNT	B	347	-0.406	-0.559	2.129	747BNT	B	747	-0.406	-0.559	4.633
348BNT	N	348	-0.281	-0.632	2.129	748BNT	N	748	-0.281	-0.632	4.633
349BNT	B	349	-0.214	-0.658	2.004	749BNT	B	749	-0.214	-0.658	4.508
350BNT	N	350	-0.072	-0.688	2.004	750BNT	N	750	-0.072	-0.688	4.508
351BNT	B	351	0	-0.691	2.129	751BNT	B	751	0	-0.691	4.633
352BNT	N	352	0.144	-0.676	2.129	752BNT	N	752	0.144	-0.676	4.633
353BNT	B	353	0.214	-0.658	2.004	753BNT	B	753	0.214	-0.658	4.508
354BNT	N	354	0.346	-0.599	2.004	754BNT	N	754	0.346	-0.599	4.508
355BNT	B	355	0.406	-0.559	2.129	755BNT	B	755	0.406	-0.559	4.633
356BNT	N	356	0.514	-0.463	2.129	756BNT	N	756	0.514	-0.463	4.633
357BNT	B	357	0.559	-0.406	2.004	757BNT	B	757	0.559	-0.406	4.508
358BNT	N	358	0.632	-0.281	2.004	758BNT	N	758	0.632	-0.281	4.508
359BNT	B	359	0.658	-0.214	2.129	759BNT	B	759	0.658	-0.214	4.633
360BNT	N	360	0.688	-0.072	2.129	760BNT	N	760	0.688	-0.072	4.633
361BNT	B	361	0.691	0	2.254	761BNT	B	761	0.691	0	4.759
362BNT	N	362	0.676	0.144	2.254	762BNT	N	762	0.676	0.144	4.759
363BNT	B	363	0.658	0.214	2.379	763BNT	B	763	0.658	0.214	4.884
364BNT	N	364	0.599	0.346	2.379	764BNT	N	764	0.599	0.346	4.884
365BNT	B	365	0.559	0.406	2.254	765BNT	B	765	0.559	0.406	4.759
366BNT	N	366	0.463	0.514	2.254	766BNT	N	766	0.463	0.514	4.759
367BNT	B	367	0.406	0.559	2.379	767BNT	B	767	0.406	0.559	4.884
368BNT	N	368	0.281	0.632	2.379	768BNT	N	768	0.281	0.632	4.884
369BNT	B	369	0.214	0.658	2.254	769BNT	B	769	0.214	0.658	4.759
370BNT	N	370	0.072	0.688	2.254	770BNT	N	770	0.072	0.688	4.759
371BNT	B	371	0	0.691	2.379	771BNT	B	771	0	0.691	4.884

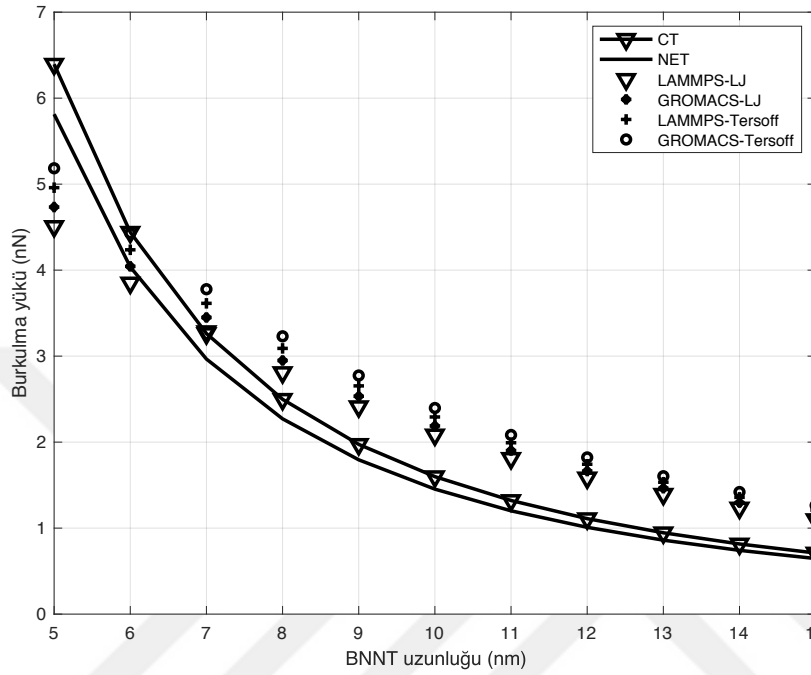
Devamı arkada

Çizelge 3.3'ün devamı

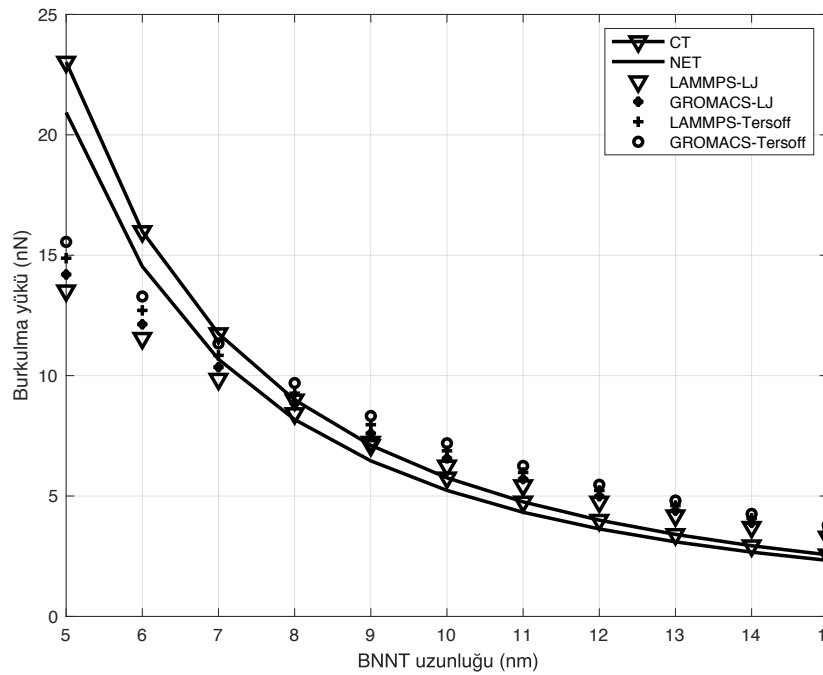
372BNT	N	372	-0.144	0.676	2.379	772BNT	N	772	-0.144	0.676	4.884
373BNT	B	373	-0.214	0.658	2.254	773BNT	B	773	-0.214	0.658	4.759
374BNT	N	374	-0.346	0.599	2.254	774BNT	N	774	-0.346	0.599	4.759
375BNT	B	375	-0.406	0.559	2.379	775BNT	B	775	-0.406	0.559	4.884
376BNT	N	376	-0.514	0.463	2.379	776BNT	N	776	-0.514	0.463	4.884
377BNT	B	377	-0.559	0.406	2.254	777BNT	B	777	-0.559	0.406	4.759
378BNT	N	378	-0.632	0.281	2.254	778BNT	N	778	-0.632	0.281	4.759
379BNT	B	379	-0.658	0.214	2.379	779BNT	B	779	-0.658	0.214	4.884
380BNT	N	380	-0.688	0.072	2.379	780BNT	N	780	-0.688	0.072	4.884
381BNT	B	381	-0.691	0	2.254	781BNT	B	781	-0.691	0	4.759
382BNT	N	382	-0.676	-0.144	2.254	782BNT	N	782	-0.676	-0.144	4.759
383BNT	B	383	-0.658	-0.214	2.379	783BNT	B	783	-0.658	-0.214	4.884
384BNT	N	384	-0.599	-0.346	2.379	784BNT	N	784	-0.599	-0.346	4.884
385BNT	B	385	-0.559	-0.406	2.254	785BNT	B	785	-0.559	-0.406	4.759
386BNT	N	386	-0.463	-0.514	2.254	786BNT	N	786	-0.463	-0.514	4.759
387BNT	B	387	-0.406	-0.559	2.379	787BNT	B	787	-0.406	-0.559	4.884
388BNT	N	388	-0.281	-0.632	2.379	788BNT	N	788	-0.281	-0.632	4.884
389BNT	B	389	-0.214	-0.658	2.254	789BNT	B	789	-0.214	-0.658	4.759
390BNT	N	390	-0.072	-0.688	2.254	790BNT	N	790	-0.072	-0.688	4.759
391BNT	B	391	0	-0.691	2.379	791BNT	B	791	0	-0.691	4.884
392BNT	N	392	0.144	-0.676	2.379	792BNT	N	792	0.144	-0.676	4.884
393BNT	B	393	0.214	-0.658	2.254	793BNT	B	793	0.214	-0.658	4.759
394BNT	N	394	0.346	-0.599	2.254	794BNT	N	794	0.346	-0.599	4.759
395BNT	B	395	0.406	-0.559	2.379	795BNT	B	795	0.406	-0.559	4.884
396BNT	N	396	0.514	-0.463	2.379	796BNT	N	796	0.514	-0.463	4.884
397BNT	B	397	0.559	-0.406	2.254	797BNT	B	797	0.559	-0.406	4.759
398BNT	N	398	0.632	-0.281	2.254	798BNT	N	798	0.632	-0.281	4.759
399BNT	B	399	0.658	-0.214	2.379	799BNT	B	799	0.658	-0.214	4.884
400BNT	N	400	0.688	-0.072	2.379	800BNT	N	800	0.688	-0.072	4.884

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

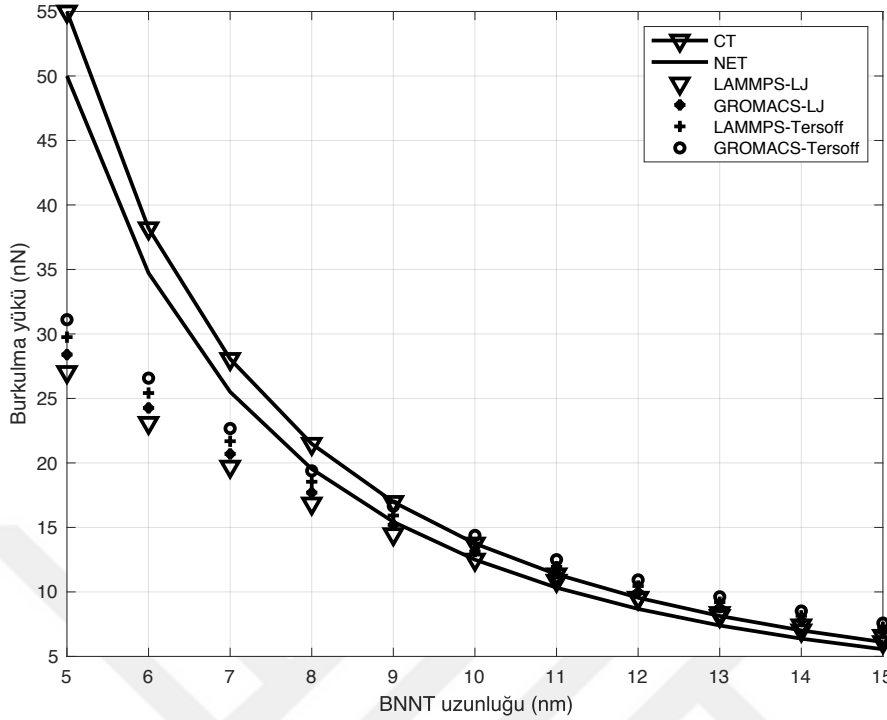
Bu bölümde bir önceki bölümde elde edilen titreşim ve burkulma denklemlerini kullanarak ve moleküler dinamik yöntemiyle elde edilen verilerden çizdirilen grafikler ve çizelgeler sunulmuştur.



Şekil 4.1. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CC)



Şekil 4.2. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=2)

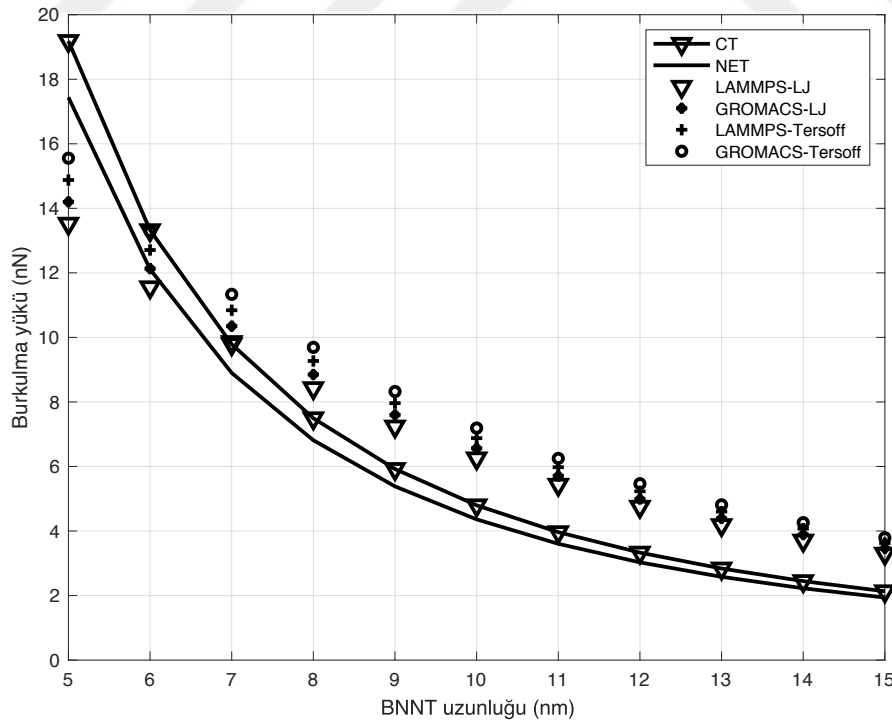


Şekil 4.3. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, n=3)

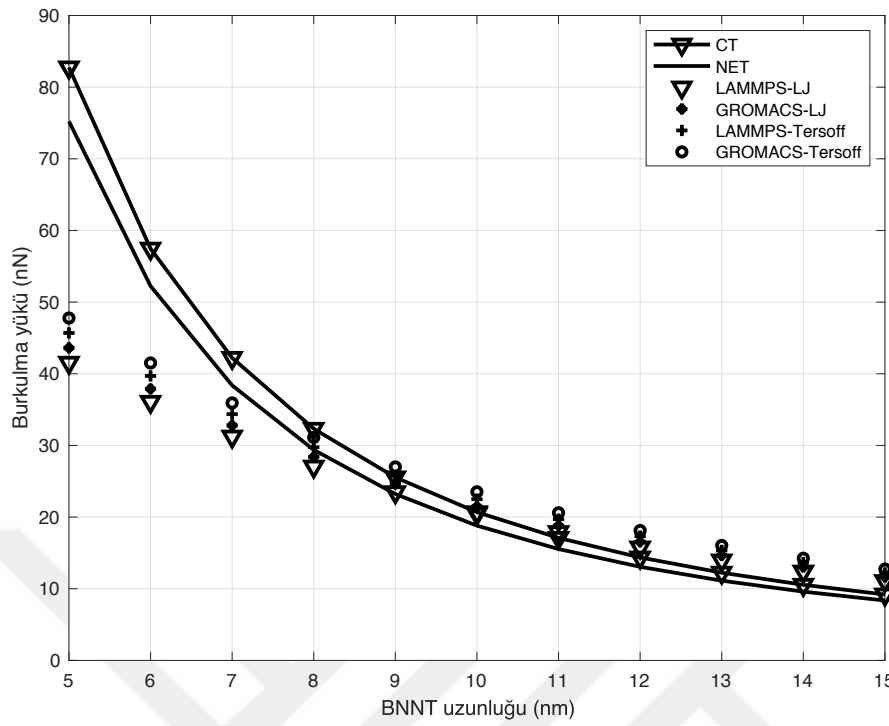
Bu bölümde çizilen grafiklerde CT klasik burkulma teorisi kullanılarak, NET yerel olmayan elastisite teorisi kullanılarak, LAMMPS-LJ Lennard Jones potansiyeliyle LAMMPS paketi kullanılarak, GROMACS-LJ Lennard Jones potansiyeliyle GROMACS paketi kullanılarak, LAMMPS-Tersoff Tersoff potansiyeliyle LAMMPS paketi kullanılarak, GROMACS-Tersoff Tersoff potansiyeliyle GROMACS paketi kullanılarak elde edilen sonuçları temsil etmektedir. İncelenen nanotüplerin uzunluğu 5 nm'den başlayarak her bir nanometre için 15 nanometreye kadar analizler yapılarak elde edilen sonuçlar grafiklere ve çizelgelere işlenmiştir. Matematiksel model kullanılan klasik ve yerel olmayan elastisite teorisi analizleri MATLAB paket programı kullanılarak yapılmıştır.

Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3'te her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınsan aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.1'de matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp için sonuçlar incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan 5 nm sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüplerin incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %32

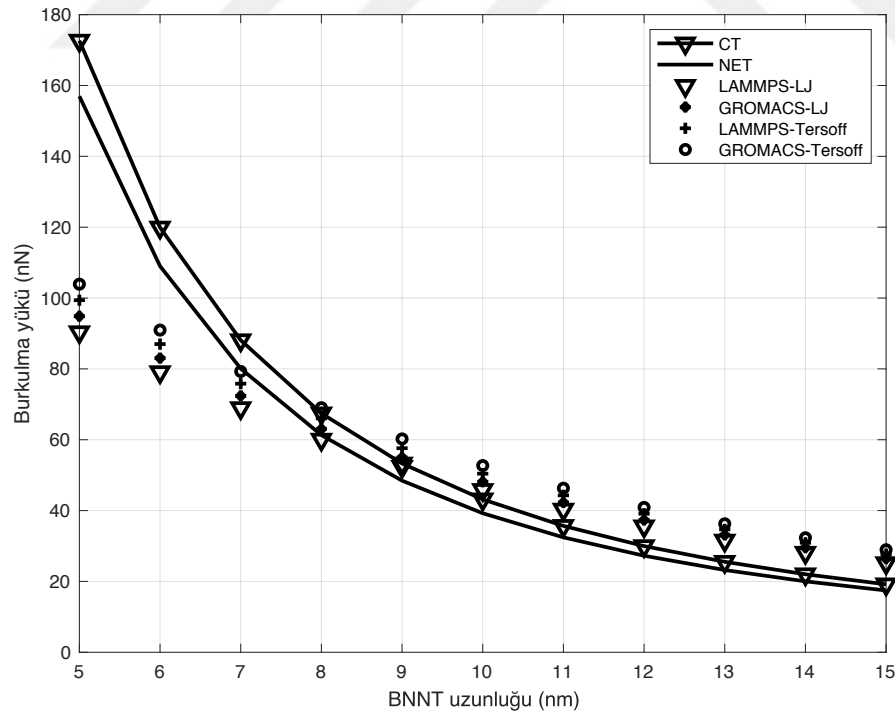
daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.2’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 8 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 8 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 15 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 21 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 23 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 8 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. 8 nm’den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 8 nm’den küçük olan nanotüpler kadar fazla olmadığı görülmüştür. Şekil 4.3’te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 10 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %7 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür.



Şekil 4.4. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CC)

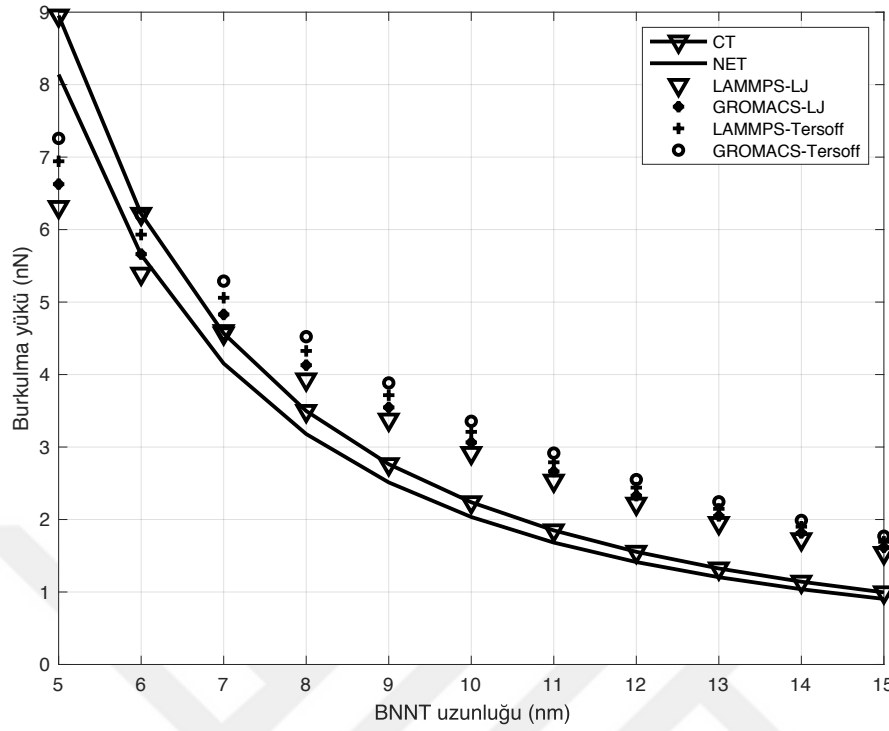


Şekil 4.5. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=2)

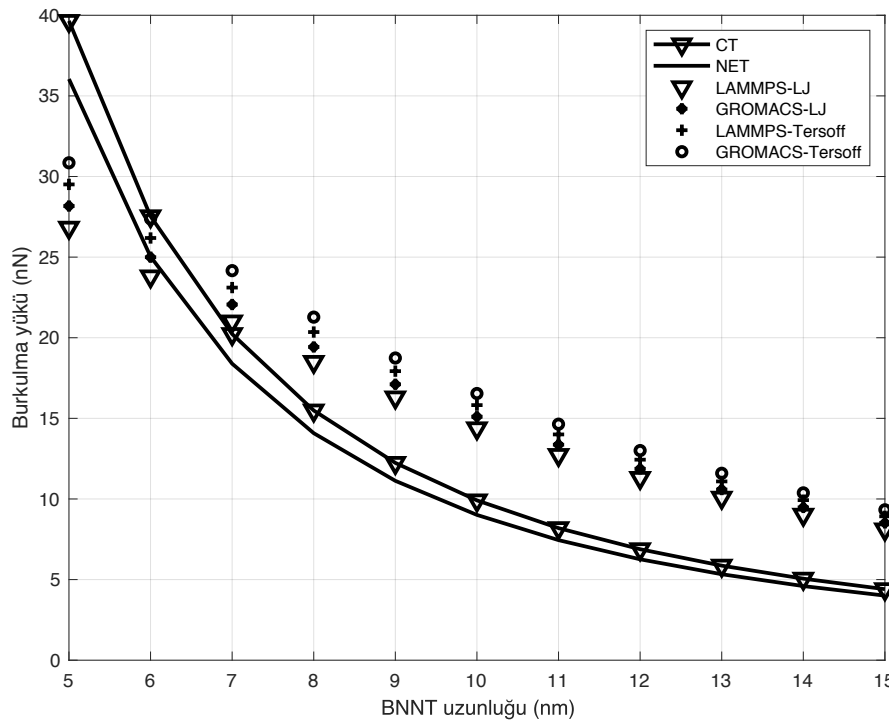


Şekil 4.6. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=3)

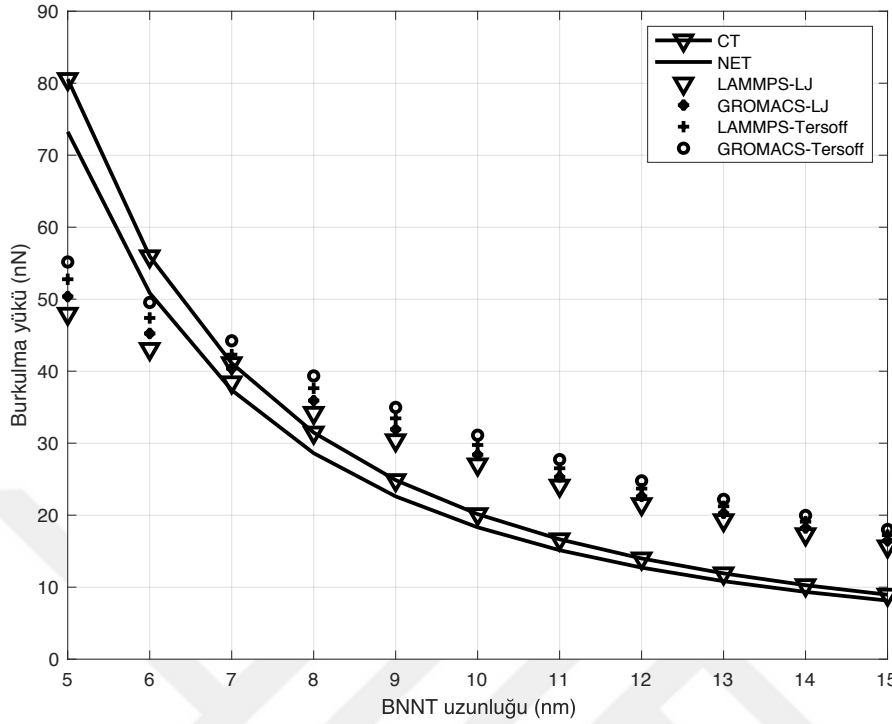
Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6’da her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (10, 10) 800 atomlu 5 nm uzunluğundan 2400 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.4’te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan 5 nm sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %23 daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.5’te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 9 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 9 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 45 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 75 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 81 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 9 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. 9 nm’den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 9 nm’den küçük olan nanotüpler kadar fazla olmadığı görülmüştür. Şekil 4.6’da üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 8 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 8 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %18 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür.



Şekil 4.7. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CC)



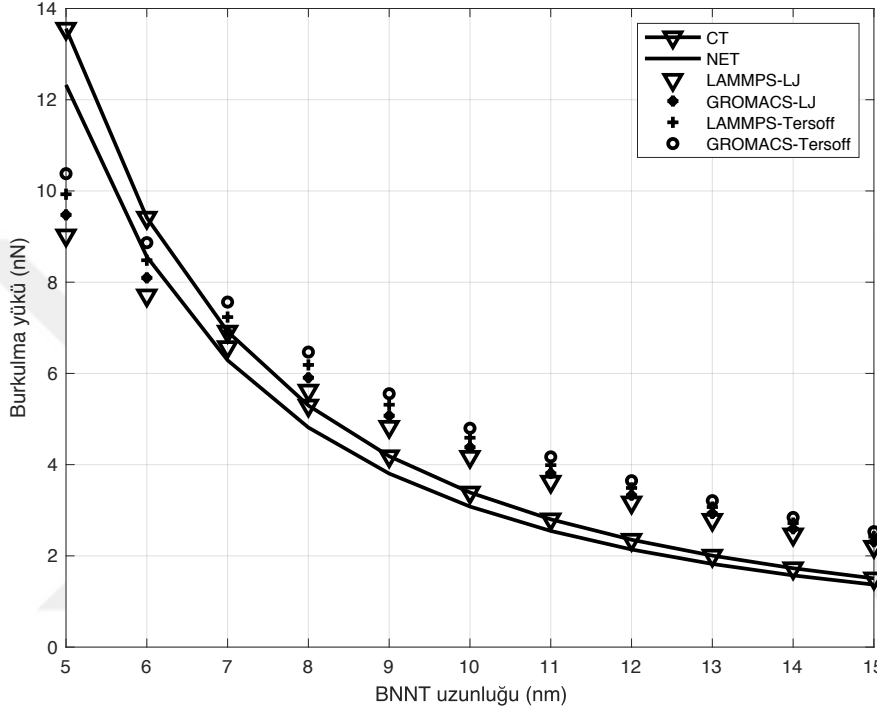
Şekil 4.8. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=2)



Şekil 4.9. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, n=3)

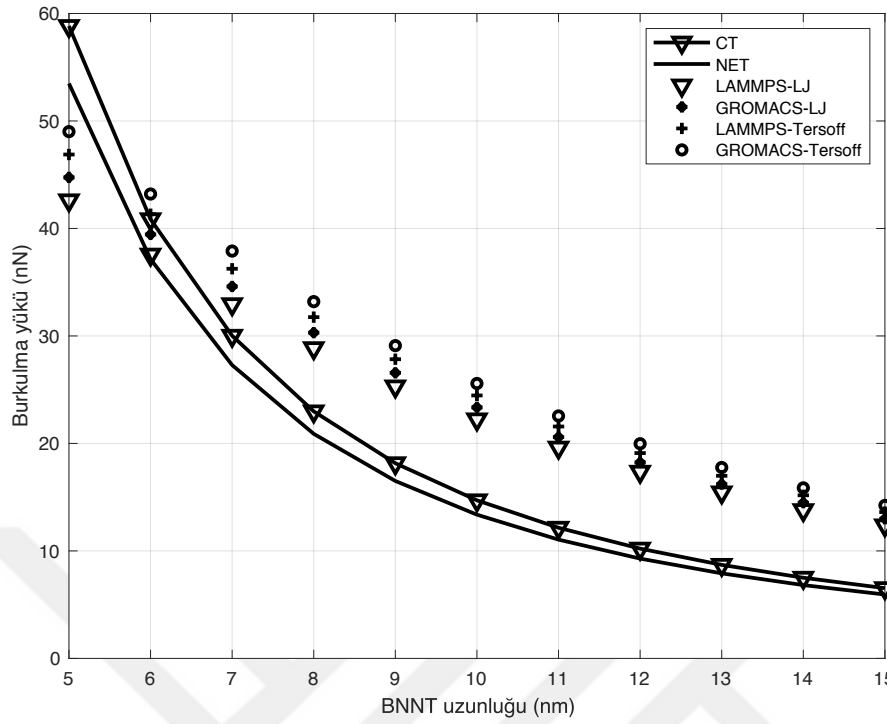
Şekil 4.7, Şekil 4.8 ve Şekil 4.9’da her iki uçundan ankastre mesnetlenmiş 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrid nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Çizdirilen grafiklerden görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınsa aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.13’te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 13 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. Şekil 4.14’te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinde olduğu gibi ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 13 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 13 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 4.2 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 9 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 10.1 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 13 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla paralel olduğu görülmüştür. Şekil 4.9’da üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman

moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 7 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 7 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %50 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür.

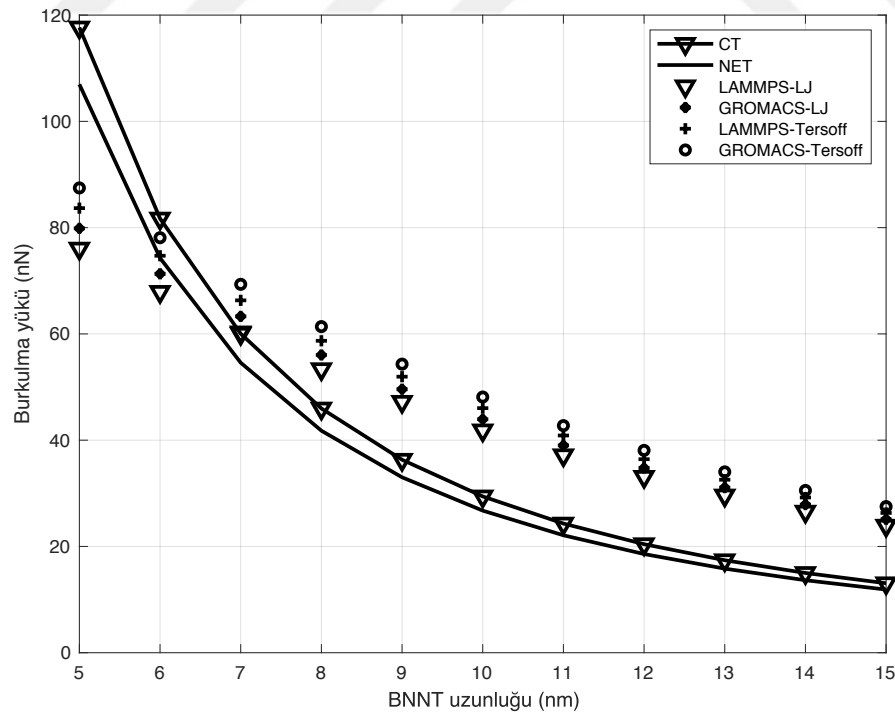


Şekil 4.10. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CC)

Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12’de her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (12, 0) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.10’da matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 7 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan 5 ve 6 nm sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 7 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %31 daha büyük olduğu görülmüştür.

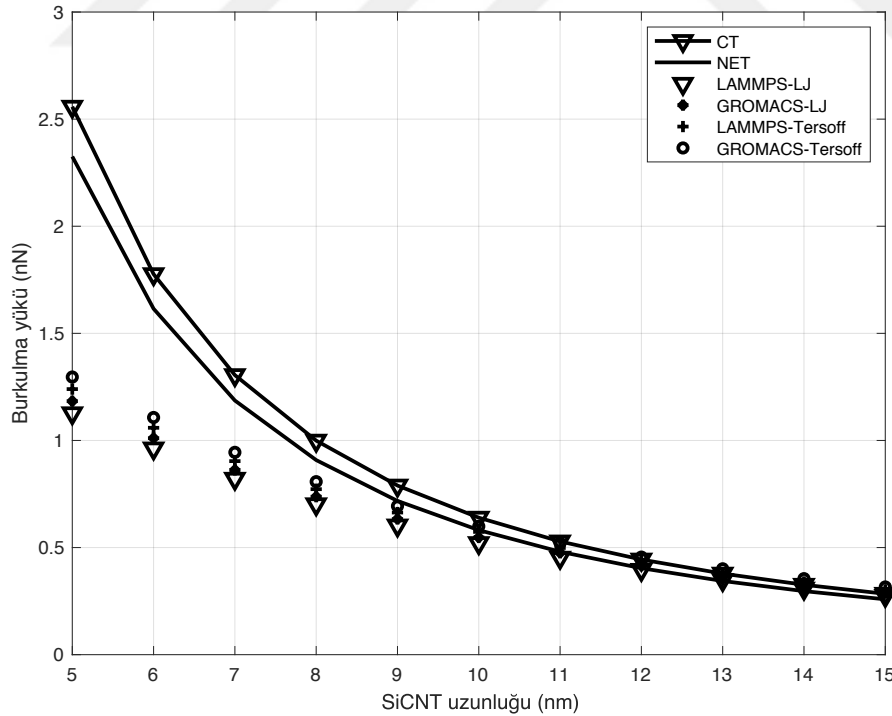


Şekil 4.11. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=2)

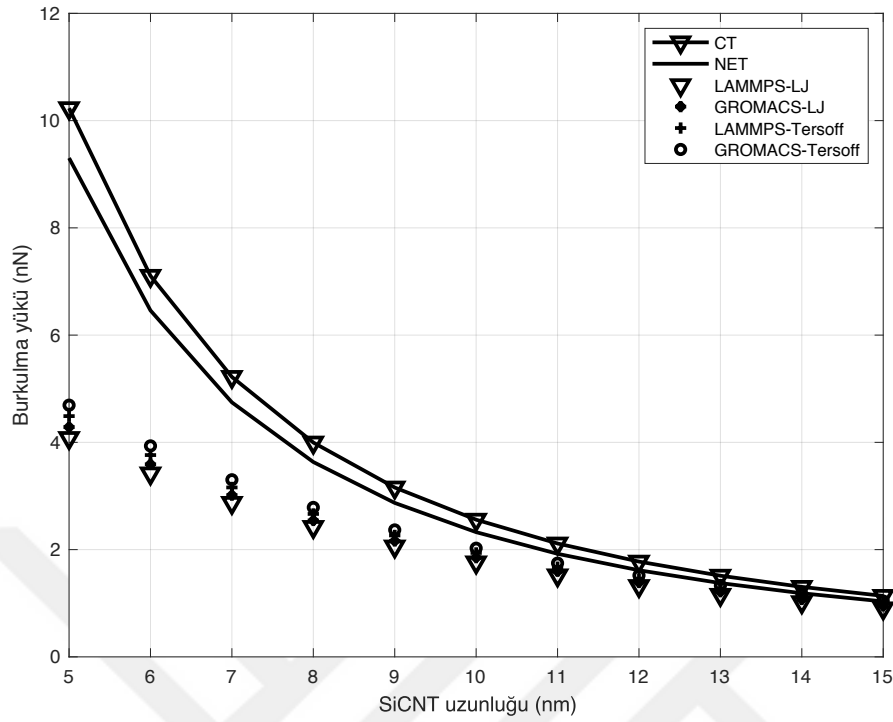


Şekil 4.12. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=3)

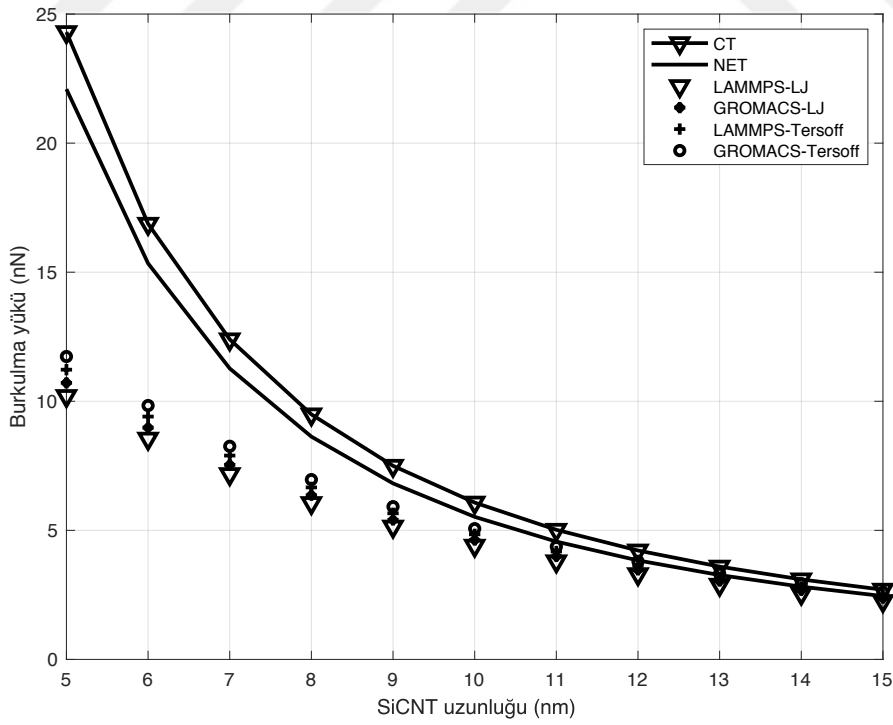
Şekil 4.11’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 45 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 53 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 59 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. 6 nm’den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm’den küçük olan nanotüplerden fazla olduğu görülmüştür. Şekil 4.12’de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 6 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 6 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %48 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. Bu durum (12, 0) kiraliteye sahip nanotüp için daha da belirgin hale gelmiştir.



Şekil 4.13. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CC)

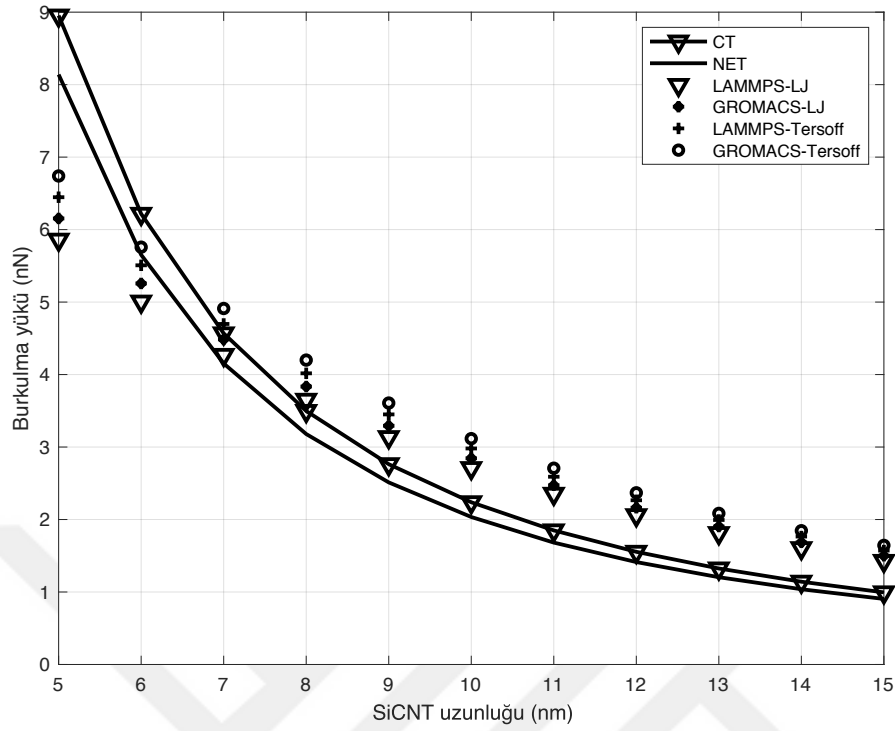


Şekil 4.14. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, $n=2$)

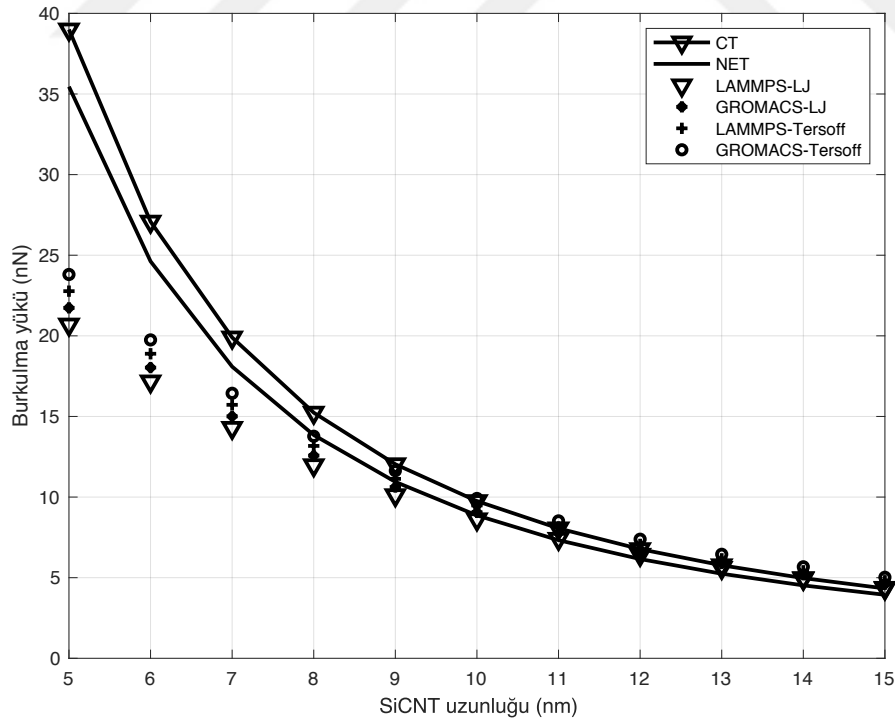


Şekil 4.15. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CC, $n=3$)

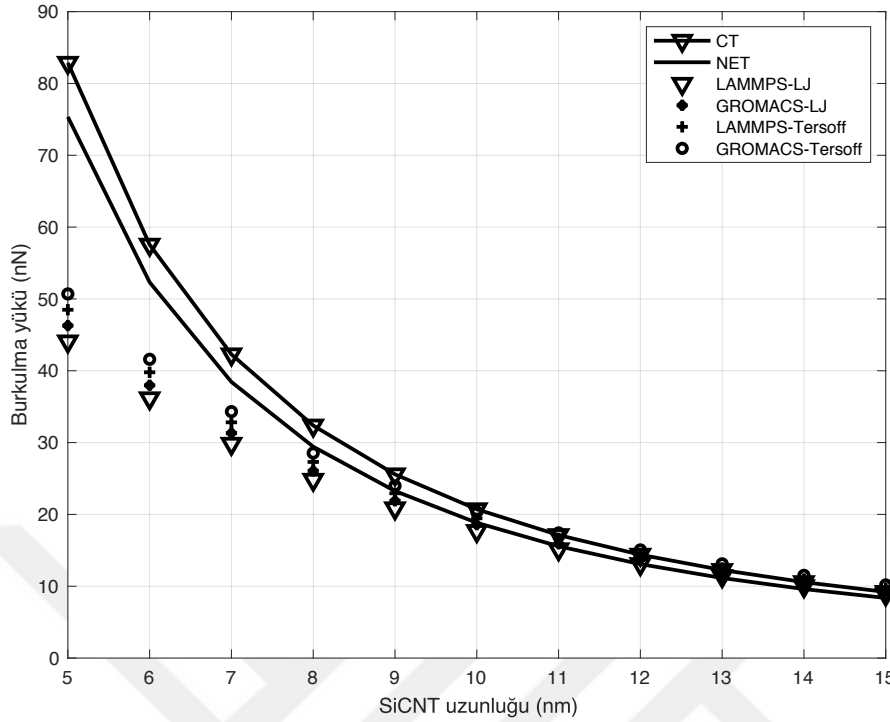
Şekil 4.13, Şekil 4.14 ve Şekil 4.15'te her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (5, 5) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakinken aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.13'te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 11 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 11 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarıyla paralel olduğu görülmüştür. Şekil 4.14'te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 13 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 13 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 4.5 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 8.6 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 10.1 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 13 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 13 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 13 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.15'te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 13 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 13 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %1 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 13 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.16. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CC)



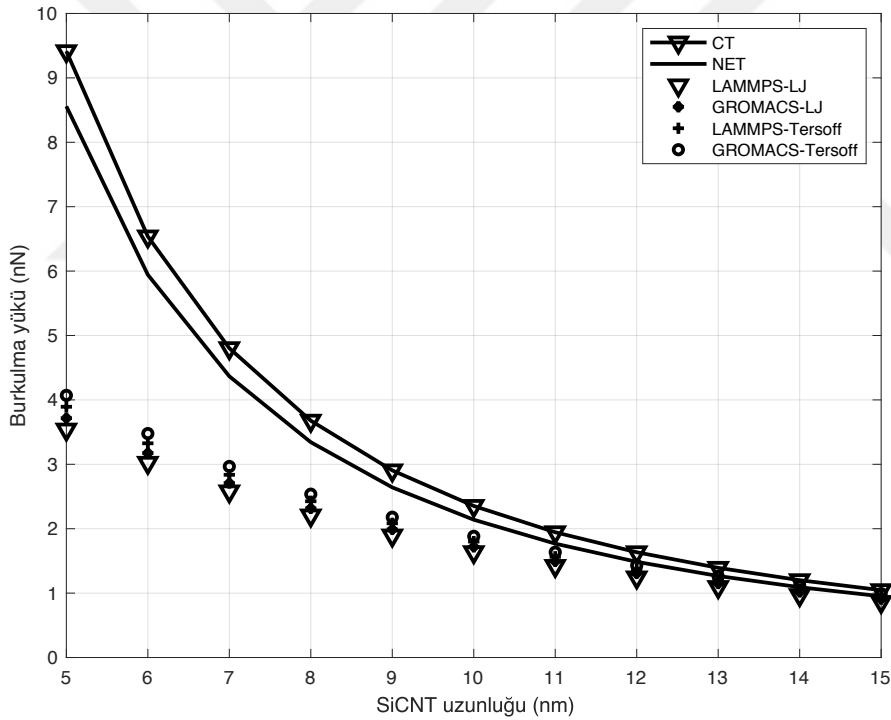
Şekil 4.17. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=2)



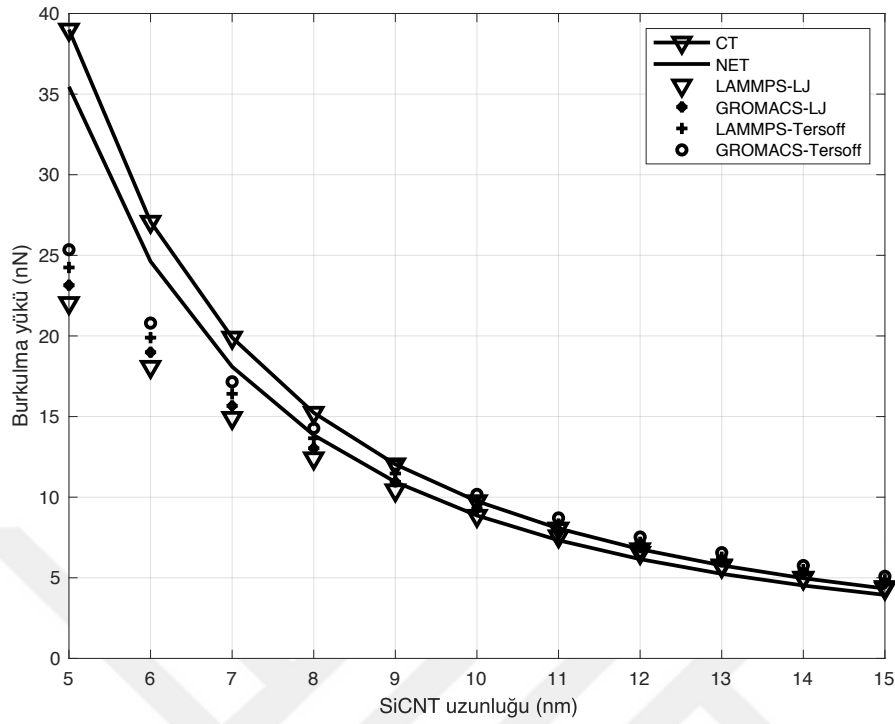
Şekil 4.18. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CC, n=3)

Şekil 4.16, Şekil 4.17 ve Şekil 4.18'de 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınsa aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.16'da matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 7 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 7 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.17'de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 10 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 10 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 22 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 35 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 39 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 10 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların

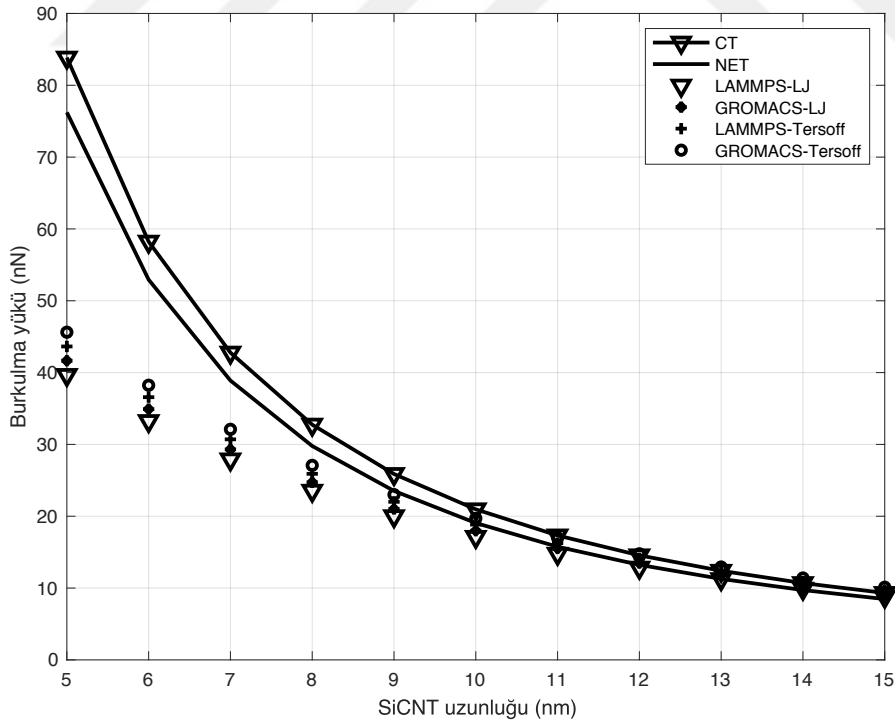
matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 10 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 10 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.15'te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 10 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %1.1 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 10 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.19. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CC)

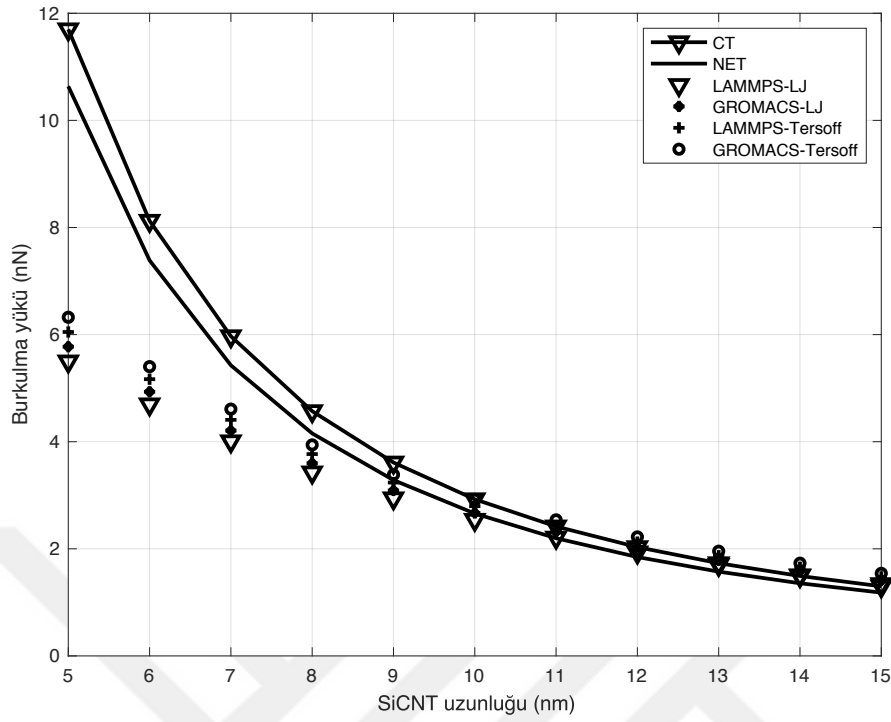


Şekil 4.20. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, $n=2$)

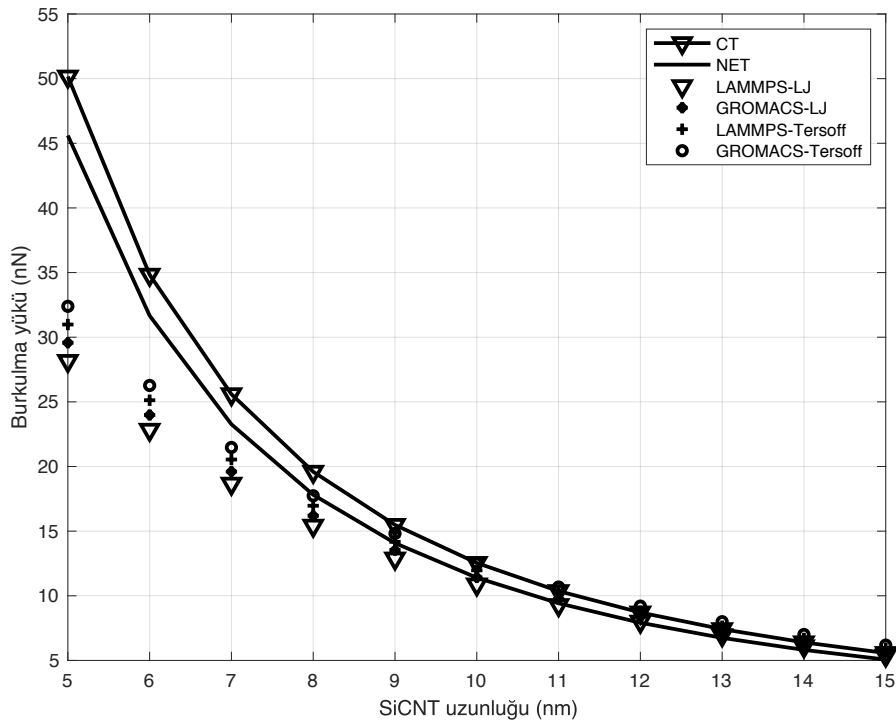


Şekil 4.21. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CC, $n=3$)

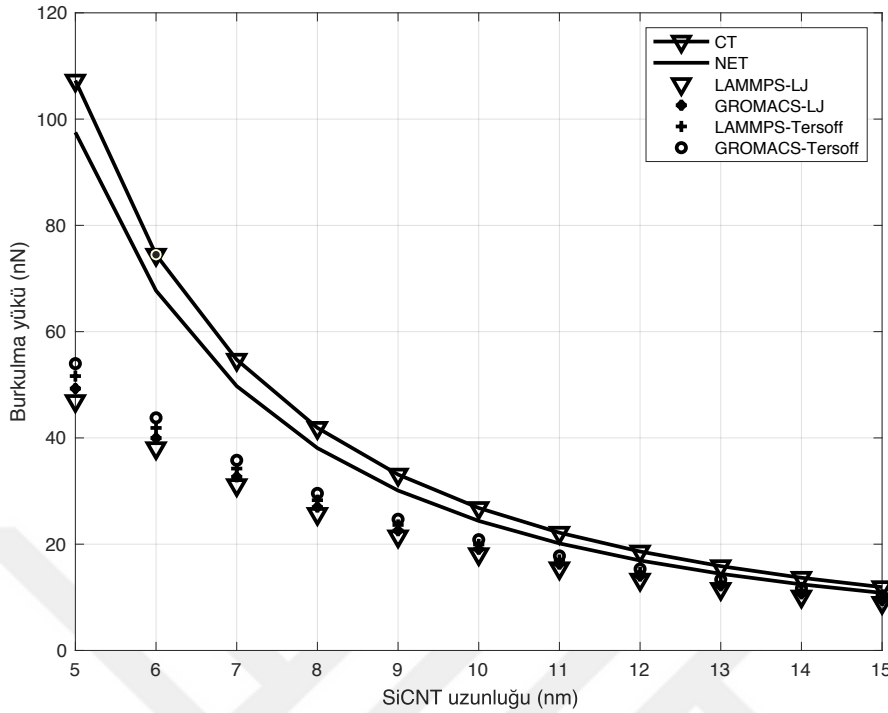
Şekil 4.19, Şekil 4.20 ve Şekil 4.21’de (10, 10) 800 atomlu 5 nm uzunluğundan 2400 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakinken aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.19’da matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 14 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 14 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.20’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 9 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 9 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 24 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 35.1 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 39.2 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 9 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 9 nm’den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 10 nm’den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.21’de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 10 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %0.9 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT’nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 10 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.22. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CC)



Şekil 4.23. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=2)



Şekil 4.24. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CC, n=3)

Şekil 4.22, Şekil 4.23 ve Şekil 4.24'te (12, 0) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.22'de matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 10 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 10 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından az farkla daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.23'te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 9 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 9 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 30 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 45 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 50 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 9 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu

görülmüştür. 9 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 9 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.24'te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki mod şeklinden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 14 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 9 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür.

Çizelge 4.1. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=5 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
CT	1.38218	1.86297	1.74399	2.32198
NET EB	1.34687	1.82034	1.71923	2.29027
NET R	1.19732	1.62639	1.38234	1.88320
LAMMPS-LJ	1.19314	1.62090	1.37877	1.88366
GROMACS-LJ	1.18697	1.61941	1.37120	1.88012
LAMMPS-Tersoff	1.21102	1.6552	1.76998	2.34976
GROMACS-Tersoff	1.20520	1.64106	1.76029	2.34103

Çizelge 4.2. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=5 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
CT	1.79742	2.07208	1.96528	2.75328
NET EB	1.75280	2.04837	1.93329	2.71688
NET R	1.50921	2.01815	1.53198	2.19220
LAMMPS-LJ	1.51450	2.02141	1.53209	2.19425
GROMACS-LJ	1.50472	2.01522	1.52987	2.19018
LAMMPS-Tersoff	1.52855	2.0319	1.53999	2.2086
GROMACS-Tersoff	1.51949	2.02512	1.53209	2.19529

Çizelge 4.3. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=6 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	1.16883	1.64561	1.52944	2.09691
<i>NET EB</i>	1.11340	1.58921	1.49023	2.12049
<i>NET R</i>	0.92222	1.41592	1.11392	1.60452
<i>LAMMPS-LJ</i>	0.92552	1.41993	1.12005	1.61119
<i>GROMACS-LJ</i>	0.92013	1.41592	1.11192	1.60199
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	0.94202	1.43931	1.14021	1.62985
<i>GROMACS-Tersoff</i>	0.93921	1.43215	1.13417	1.6221

Çizelge 4.4. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=6 nm)

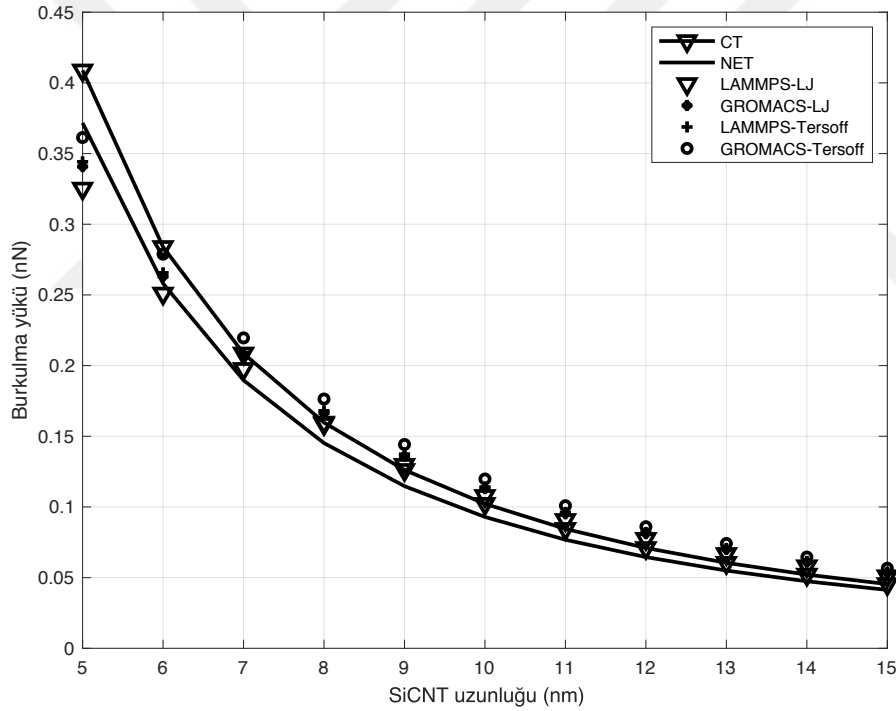
	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	1.57521	1.85932	1.74014	2.5395
<i>NET EB</i>	1.50120	1.80347	1.72109	2.47019
<i>NET R</i>	1.24642	1.78656	1.37861	2.01215
<i>LAMMPS-LJ</i>	1.24098	1.77909	1.36913	2.00293
<i>GROMACS-LJ</i>	1.23852	1.7742	1.361	2.00051
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	1.25583	1.79002	1.39019	2.01732
<i>GROMACS-Tersoff</i>	1.24874	1.78899	1.38955	2.01691

Çizelge 4.5. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş SiCNT'ye ait temel frekanslar (THz) (L=10 nm)

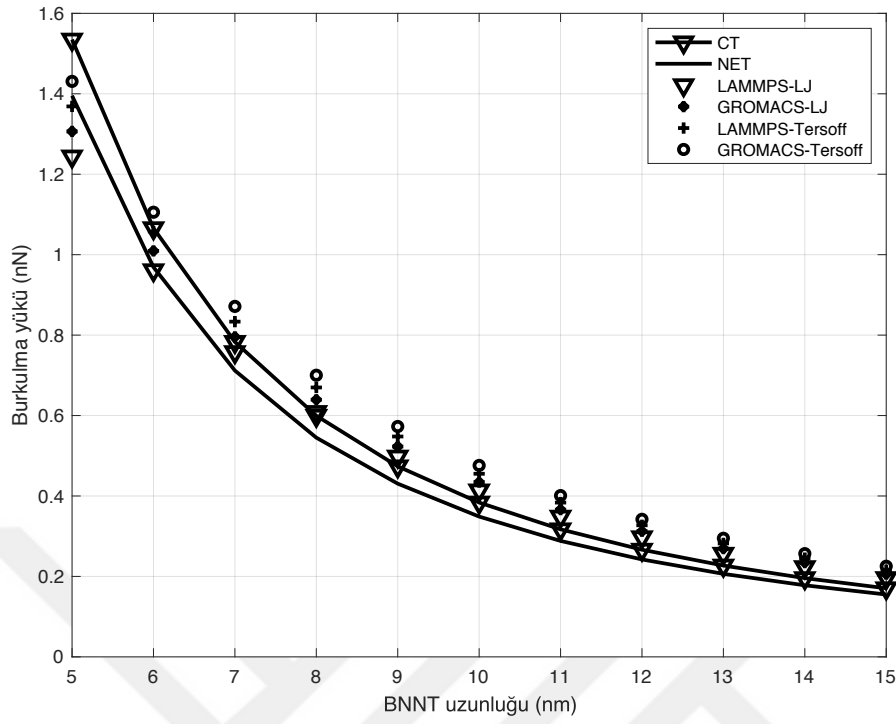
	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	0.31759	0.80437	0.7182	1.35667
<i>NET EB</i>	0.25106	0.75133	0.6883	1.32489
<i>NET R</i>	0.27551	0.76753	0.71255	1.33742
<i>LAMMPS-LJ</i>	0.26981	0.76294	0.69694	1.32899
<i>GROMACS-LJ</i>	0.26812	0.76183	0.69592	1.32712
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	0.28125	0.77209	0.72808	1.34986
<i>GROMACS-Tersoff</i>	0.27934	0.77100	0.72502	1.34762

Çizelge 4.6. Farklı teoriler ve yöntemlerle her iki ucu ankastre mesnetlenmiş BNNT'ye ait temel frekanslar (THz) ($L=10$ nm)

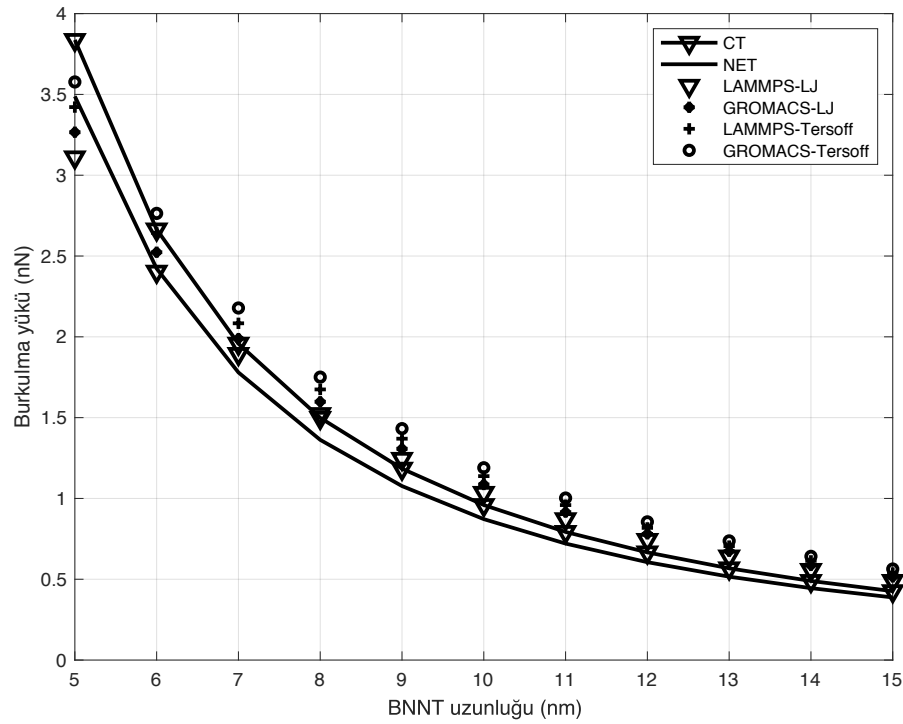
	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
CT	0.81309	1.08406	0.9289	1.73826
NET EB	0.77290	1.04467	0.90996	1.70199
NET R	0.78492	1.07925	0.91728	1.71755
LAMMPS-LJ	0.77912	1.06109	0.91249	1.71198
GROMACS-LJ	0.77861	1.06012	0.91176	1.71027
LAMMPS-Tersoff	0.79072	1.09741	0.92207	1.72312
GROMACS-Tersoff	0.78809	1.09210	0.91981	1.71987



Şekil 4.25. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CF)

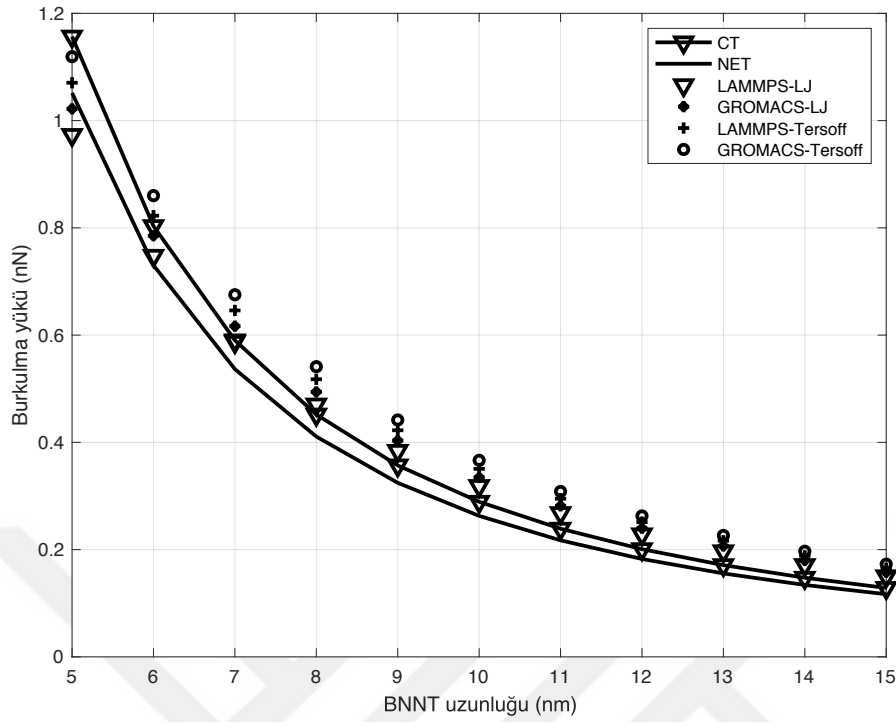


Şekil 4.26. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=2)

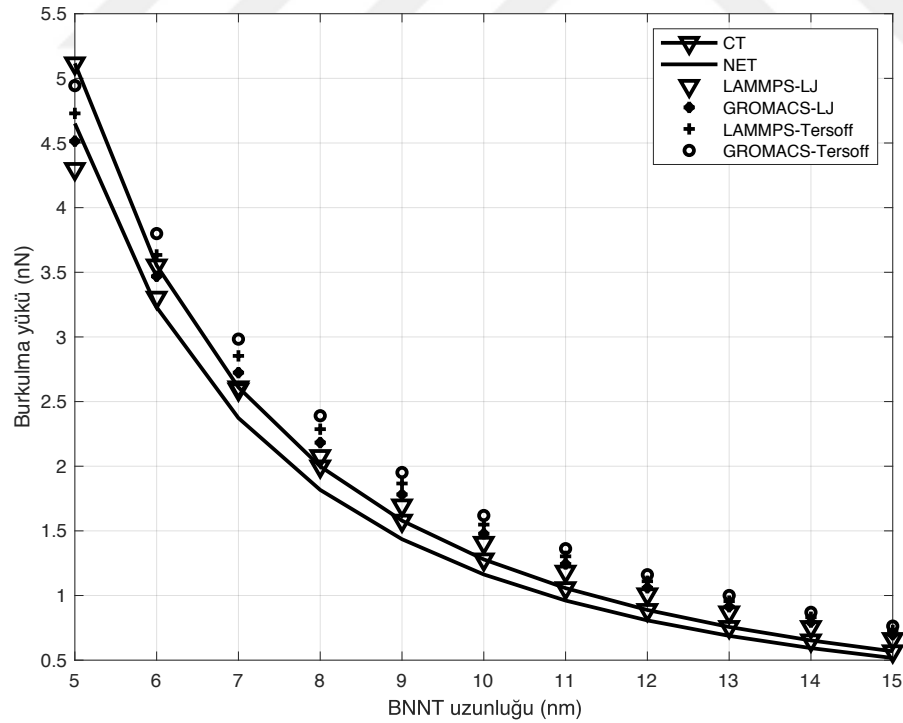


Şekil 4.27. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=3)

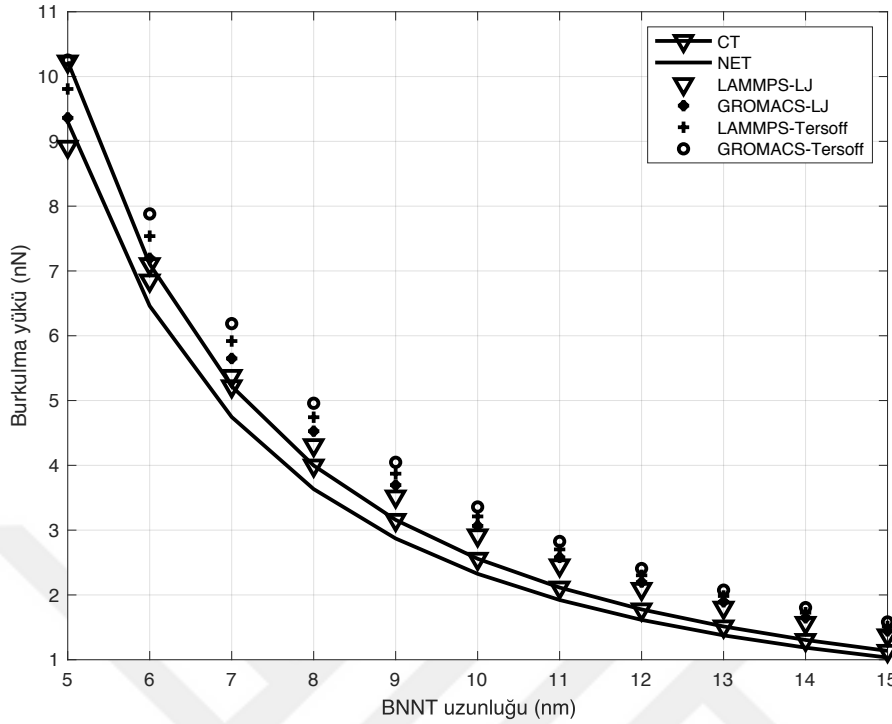
Şekil 4.25, Şekil 4.26 ve Şekil 4.27’de bir ucundan ankastre mesnetlenmiş, diğer ucu serbest olan 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakinken aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.25’te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 7 nm uzunluğunda nanotüp için sonuçlar incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan 5 nm sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 7 nm’den daha uzun olan nanotüplerin incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %12 daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.26’da ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 1.3 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 1.4 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 1.5 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. 6 nm’den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm’den küçük olan nanotüpler kadar fazla olmadığı görülmüştür. Şekil 4.27’de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 10 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %5 daha büyük çıkmıştır. Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’te gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.28. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CF)



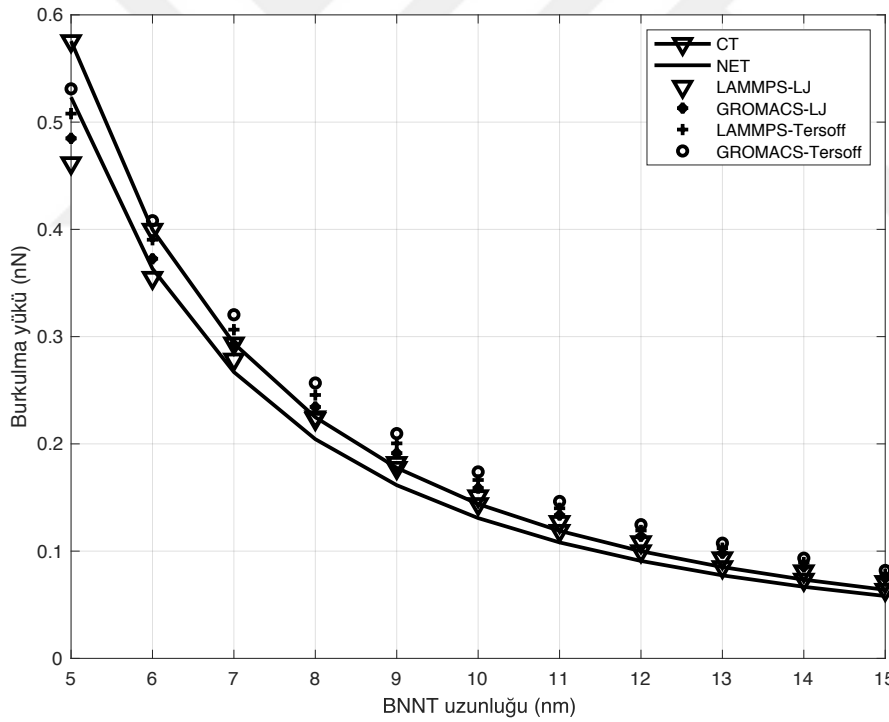
Şekil 4.29. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=2)



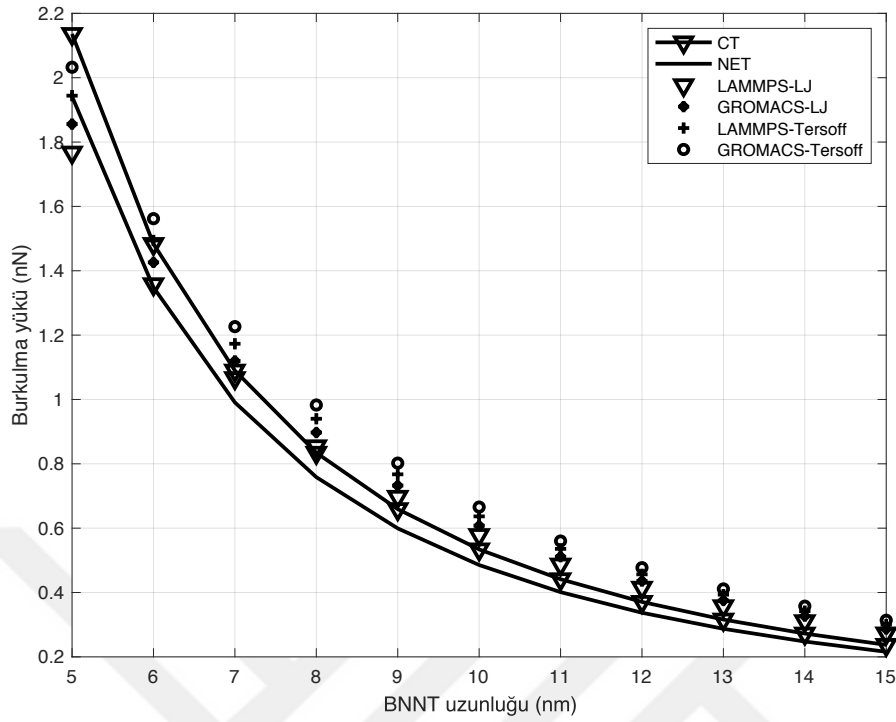
Şekil 4.30. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=3)

Şekil 4.28, Şekil 4.29 ve Şekil 4.30'da her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (10, 10) 800 atomlu 5 nm uzunluğundan 2400 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.28'de matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan 5 nm sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %11 daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.29'da ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerine benzer olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 4.6 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 4.6 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 5.1 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen

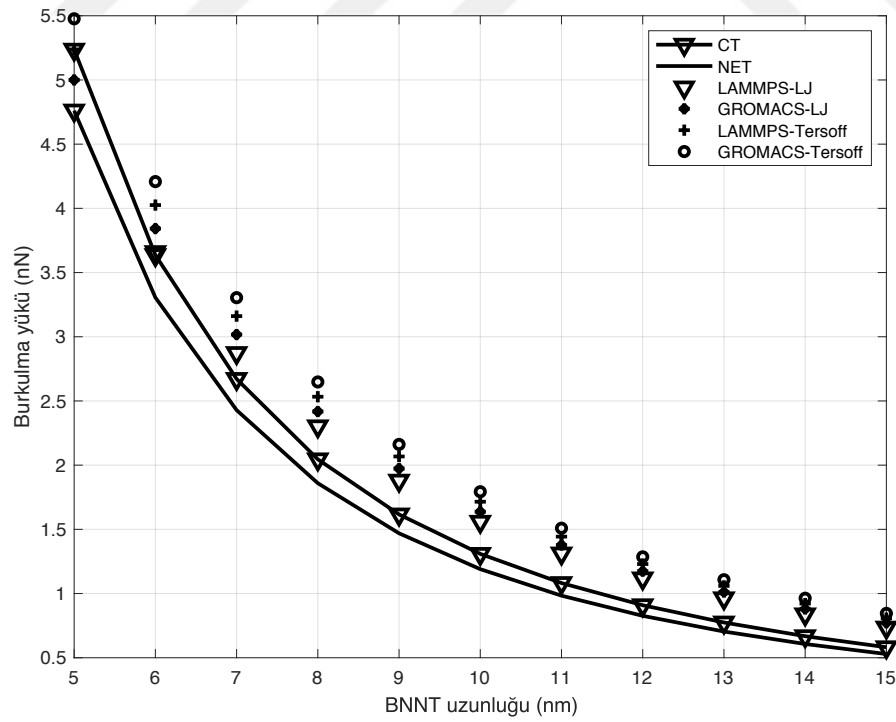
sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm'den küçük olan nanotüpler sonuçlarından daha fazla olduğu görülmüştür. Şekil 4.27'de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 5 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 5 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %22 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6'da gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.31. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CF)

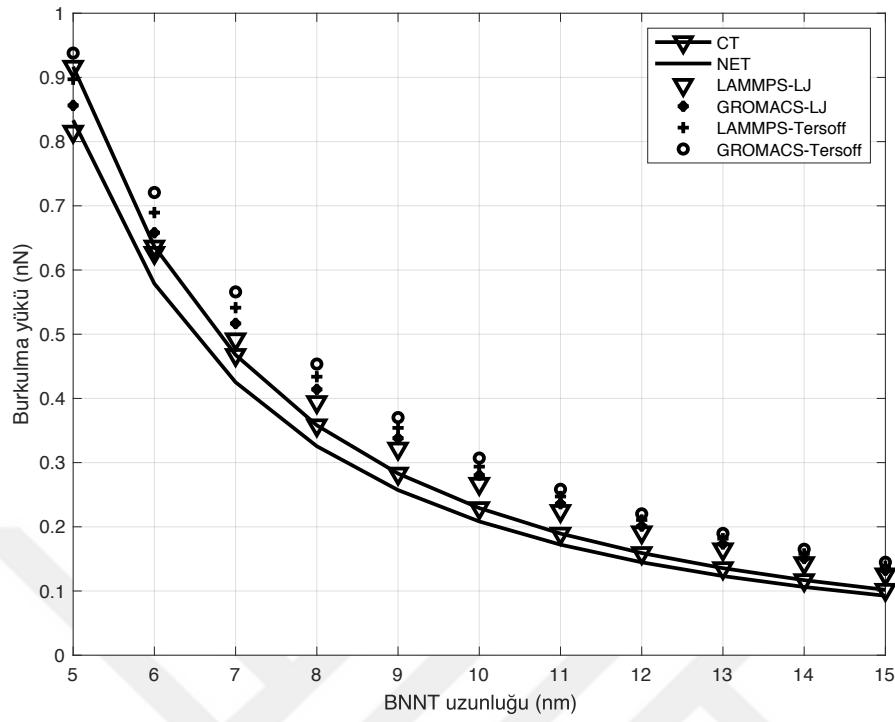


Şekil 4.32. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)

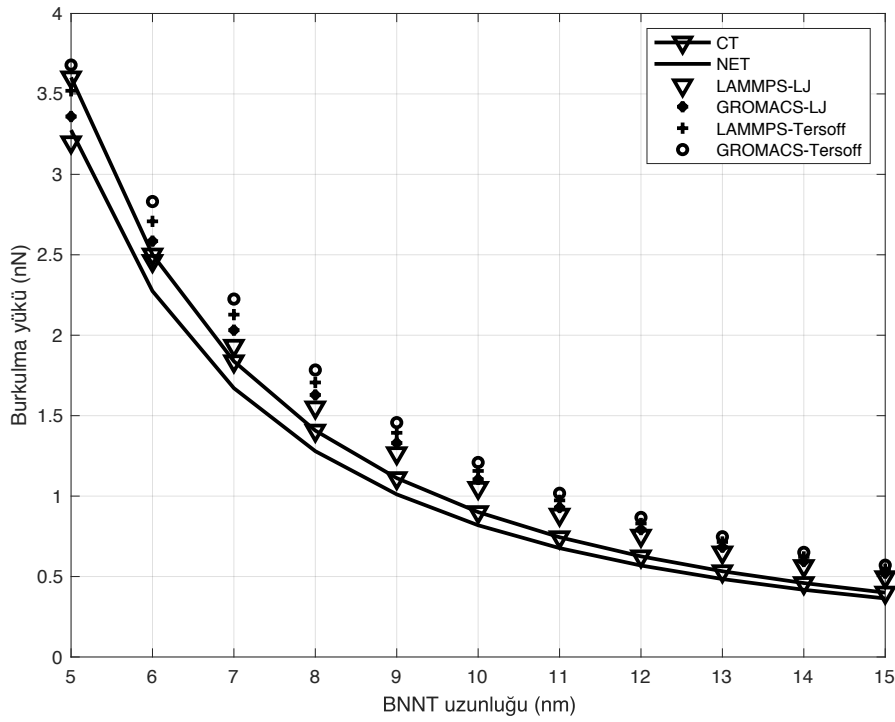


Şekil 4.33. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)

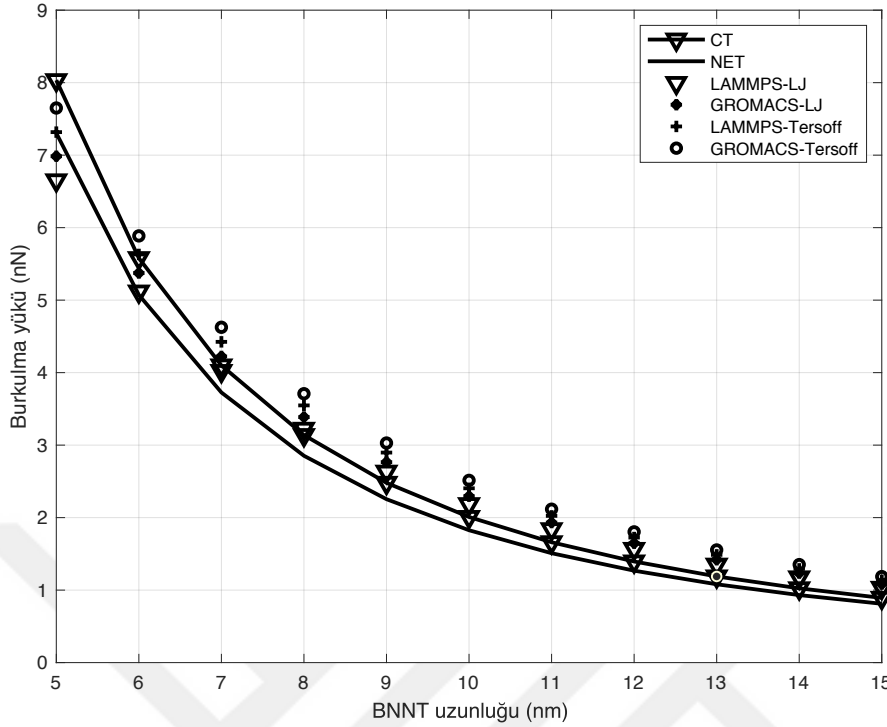
Şekil 4.31, Şekil 4.32 ve Şekil 4.33'te her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Çizdirilen grafiklerden görüldüğü gibi klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.13'te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa olan burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. Şekil 4.32'de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinde olduğu gibi ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 1.9 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 1.9 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 2.1 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla paralel olduğu görülmüştür. Şekil 4.33'te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki şekilden farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 5 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 5 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %25 daha büyük çıkmıştır. Uzun olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. Şekil 4.7, Şekil 4.8 ve Şekil 4.9'da gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.34. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CF)



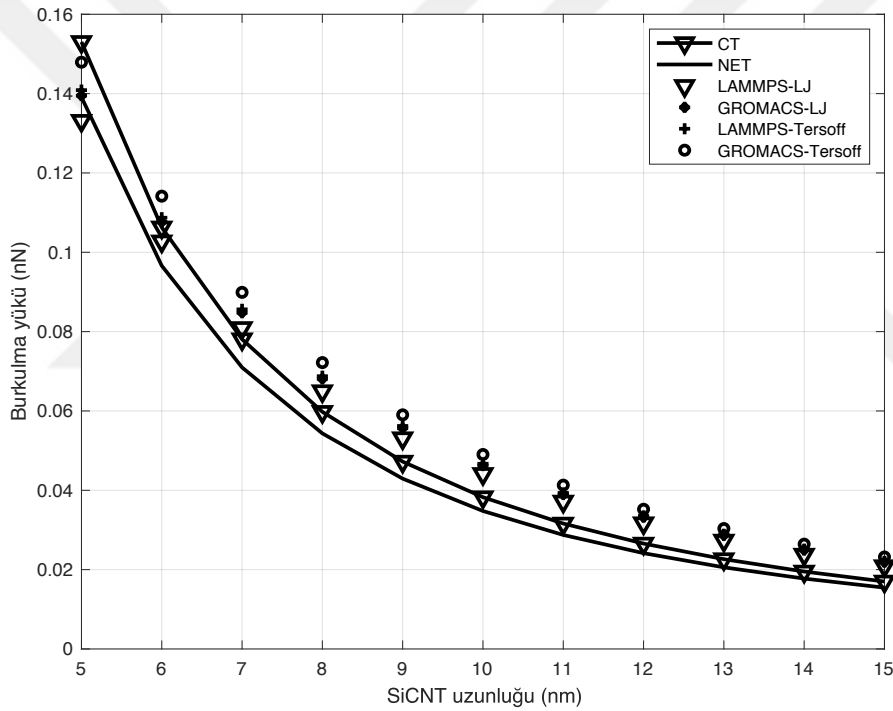
Şekil 4.35. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)



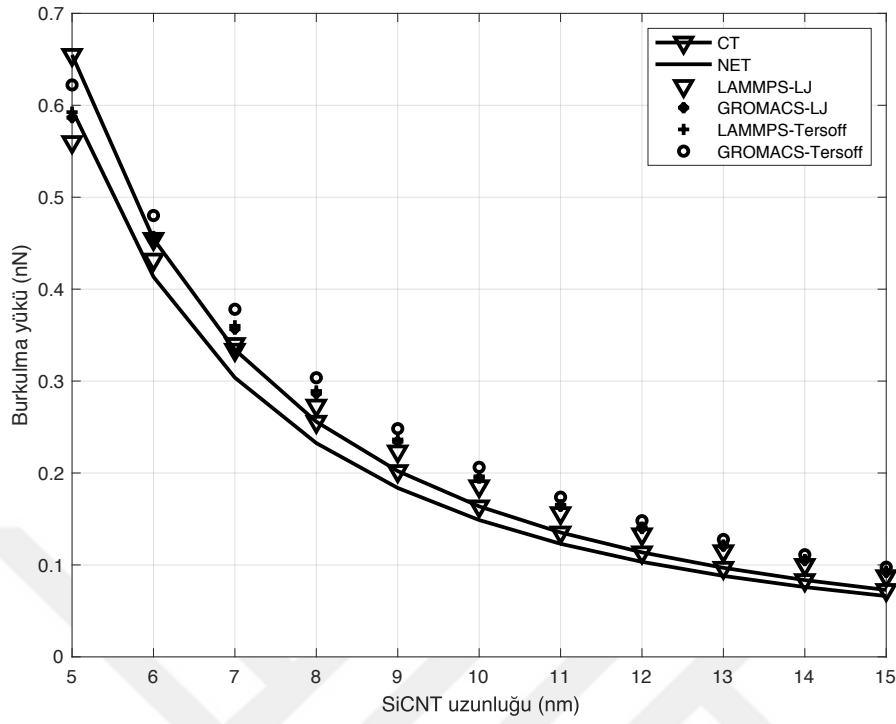
Şekil 4.36. Farklı teoriler ve yöntemlerle BNNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)

Şekil 4.34, Şekil 4.35 ve Şekil 4.36'da her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (12, 0) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar bor nitrür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.34'te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 5 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. 5 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından ortalama %26 daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.35'te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yükleri sonuçlarıyla benzer olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 5 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 5 nm'den daha uzun nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 3.5 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 3.4 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 3.6 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 5 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan biraz daha büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.36'da üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moddaki durumdan farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman

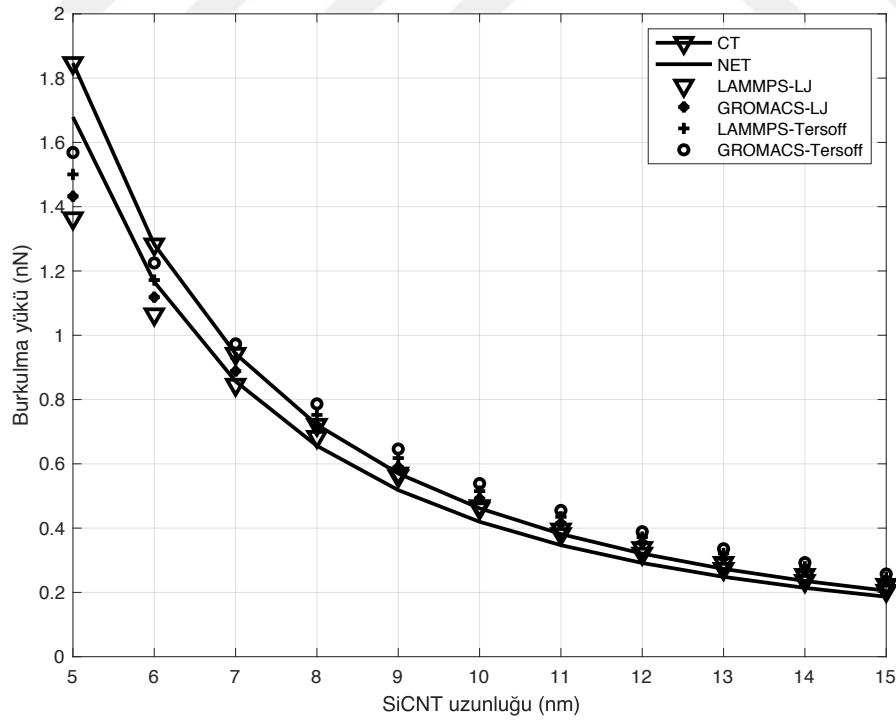
moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi yaklaşık 6 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama % 9 daha büyük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. Bu durum (12, 0) kiraliteye sahip nanotüp için daha da belirgin hale gelmiştir. Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12'de gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.37. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) kritik burkulma yükleri (CF)

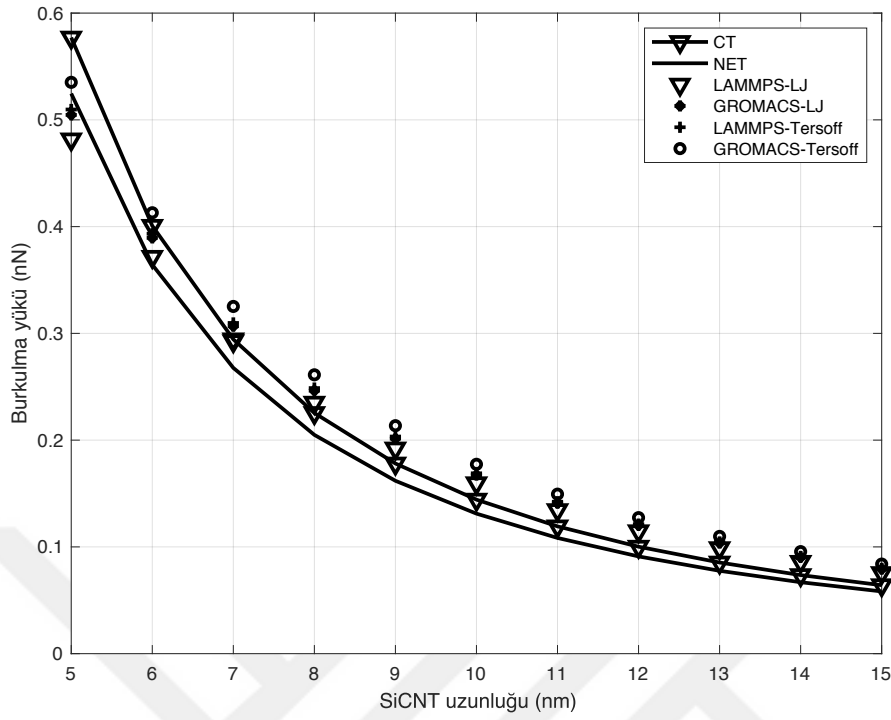


Şekil 4.38. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=2)

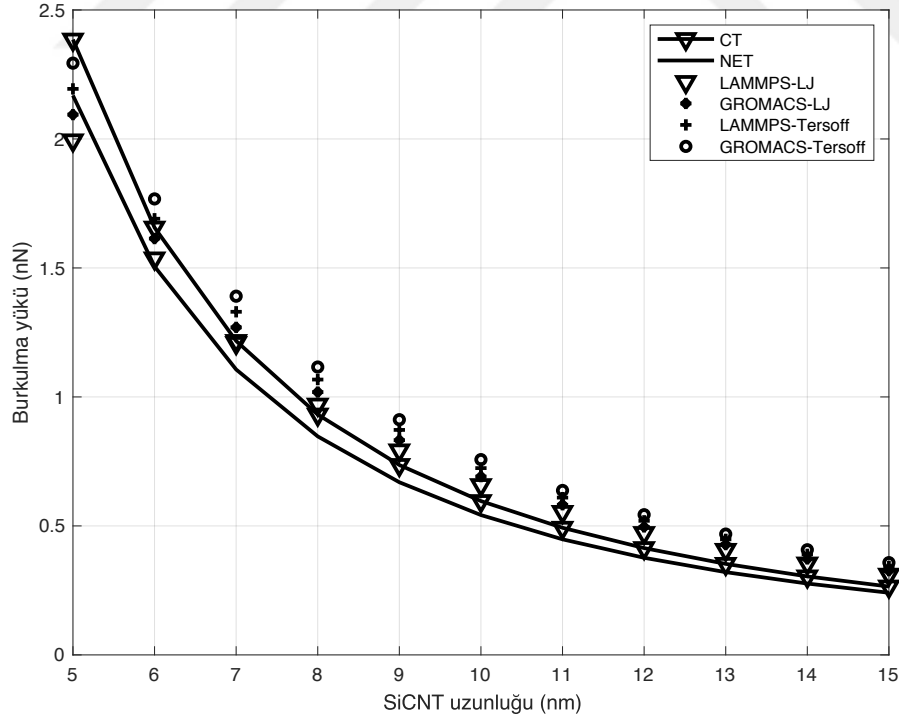


Şekil 4.39. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (5, 5) burkulma yükleri (CF, n=3)

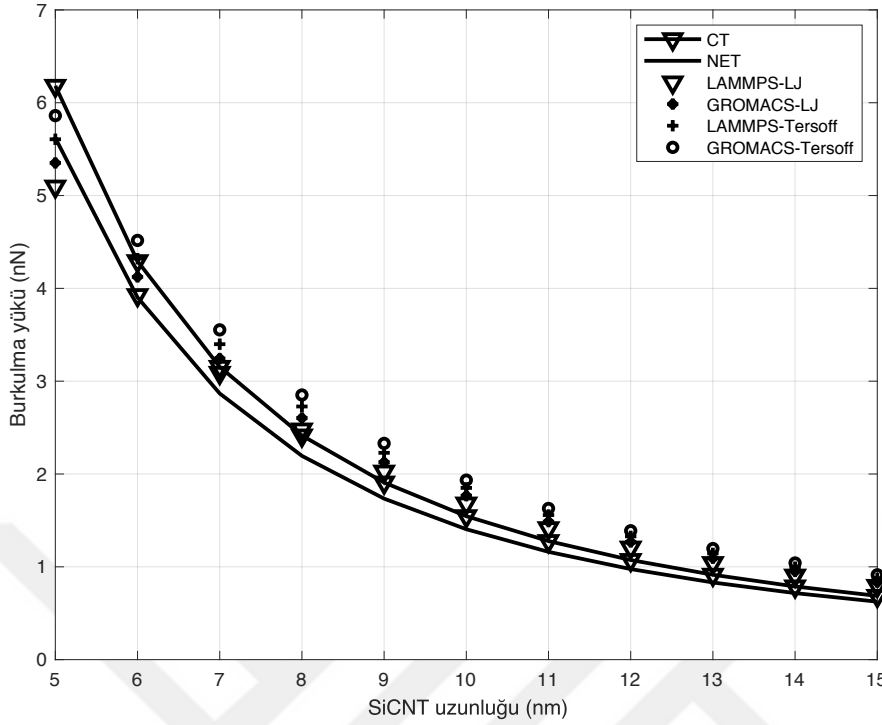
Şekil 4.37, Şekil 4.38 ve Şekil 4.39’da her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş (5, 5) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakinken aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.37’de matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 5 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 5 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarıyla paralel olduğu görülmüştür. Şekil 4.38’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinden farklı olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 0.6 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 0.6 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 0.65 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. Şekil 4.39’da üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moddan farklı olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 7 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 7 nm’den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %3 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT’nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 7 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür. Şekil 4.13, Şekil 4.14 ve Şekil 4.15’te gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.40. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) kritik burkulma yükleri (CF)



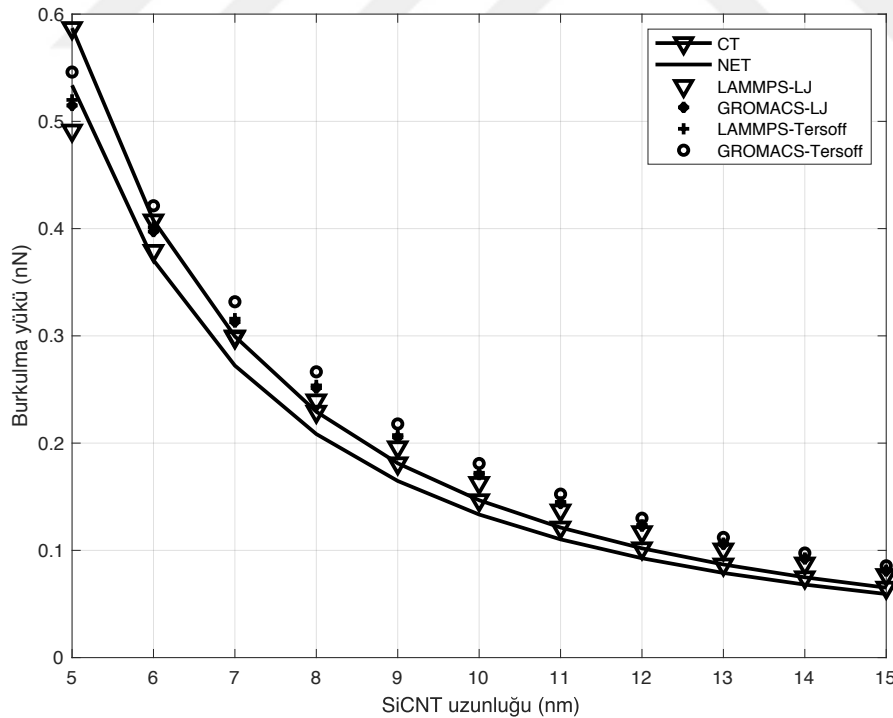
Şekil 4.41. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=2)



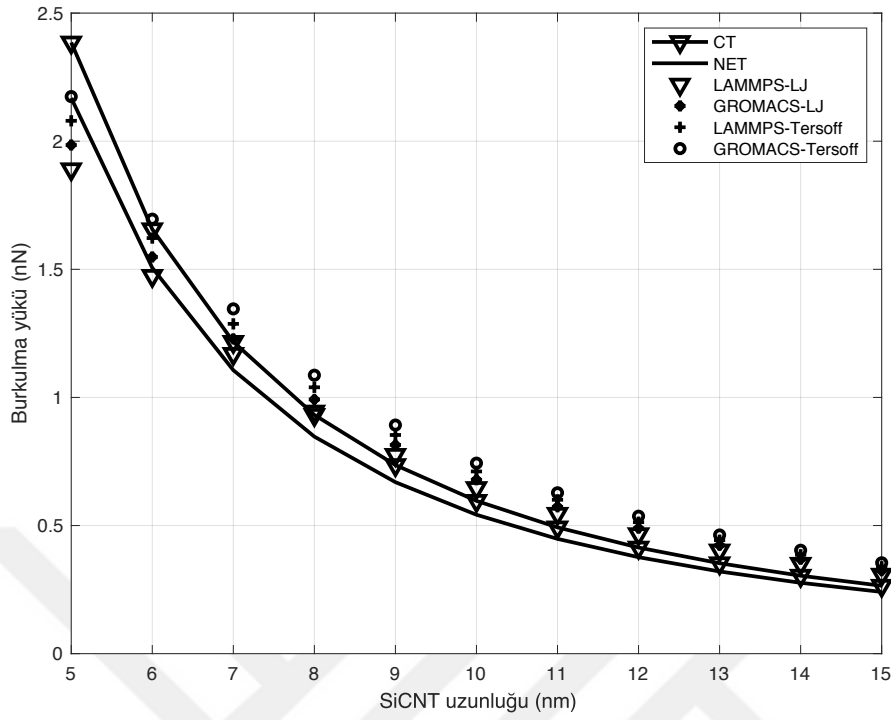
Şekil 4.42. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 10) burkulma yükleri (CF, n=3)

Şekil 4.40, Şekil 4.41 ve Şekil 4.42’de 400 atomlu (5, 5) kiraliteye sahip 5 nm uzunluğundan 1200 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.40’da matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.41’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerinde olduğu gibi ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 0.53 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 0.53 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 0.59 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle

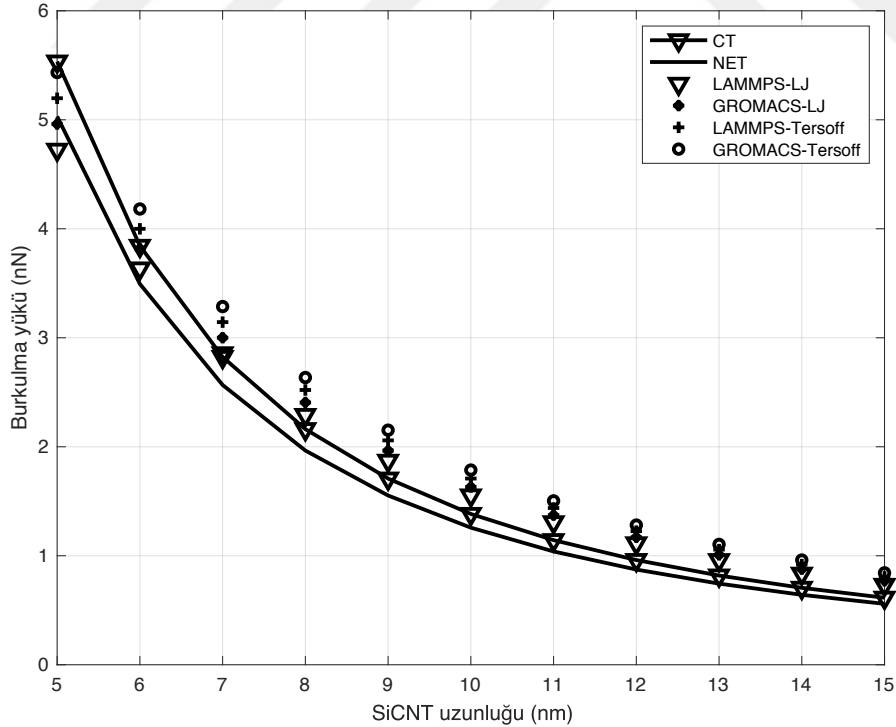
elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.42'de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 6 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %3 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 6 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür. Şekil 4.16, Şekil 4.17 ve Şekil 4.18'de gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.43. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) kritik burkulma yükleri (CF)

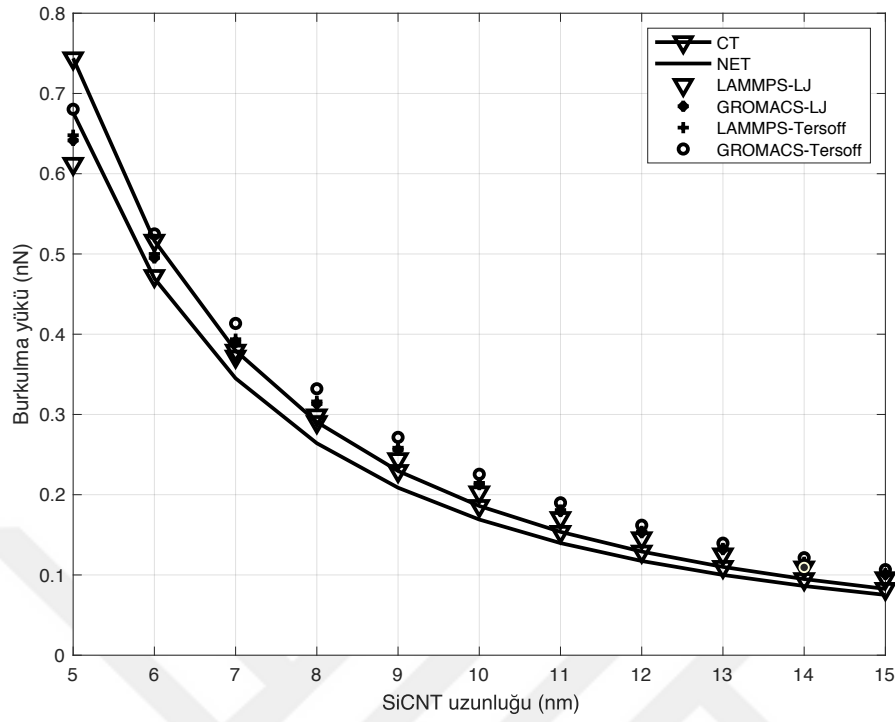


Şekil 4.44. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)

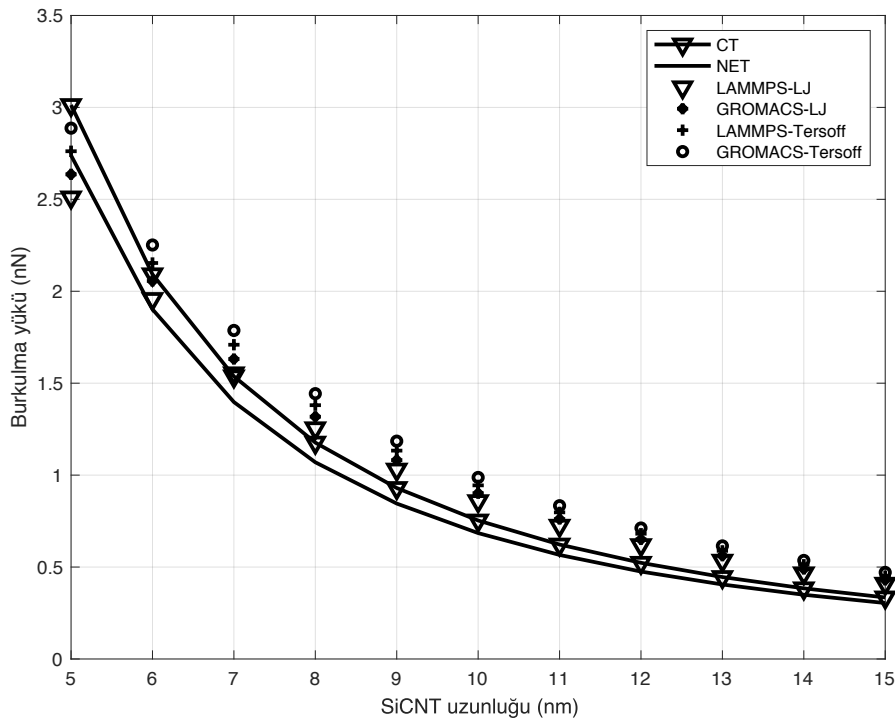


Şekil 4.45. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (10, 0) burkulma yükleri (CF, n=3)

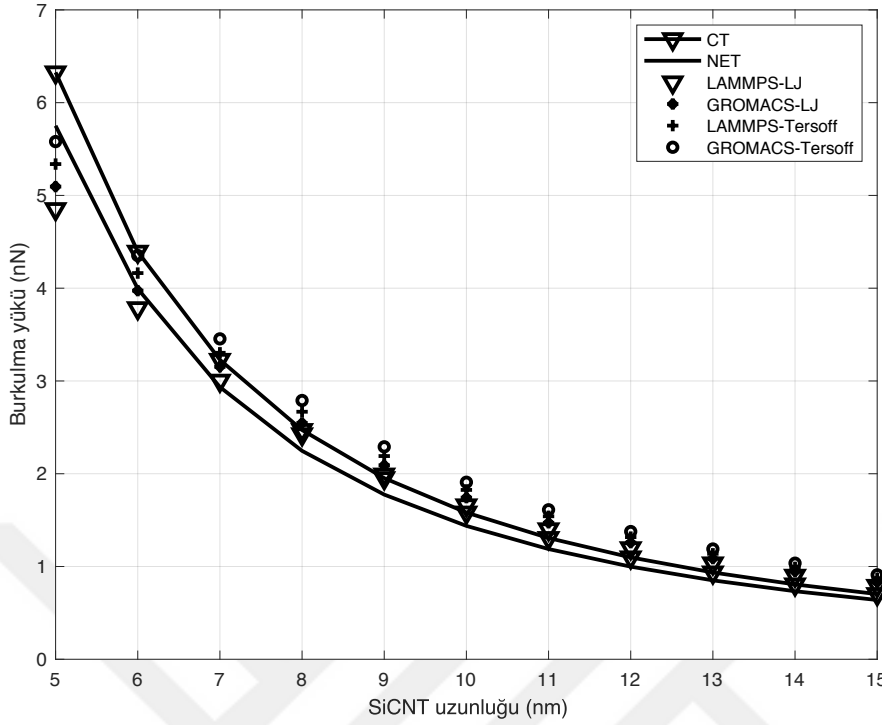
Şekil 4.43, Şekil 4.44 ve Şekil 4.45'te (10, 10) 800 atomlu 5 nm uzunluğundan 2400 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakinken aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.43'te matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.44'te ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerine benzer olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm'den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 2.1 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 2.1 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 2.4 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm'den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.45'te üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama %3 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 6 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür. Şekil 4.19, Şekil 4.20 ve Şekil 4.21'de gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.46. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) kritik burkulma yükleri (CF)



Şekil 4.47. Farklı teoriler ve yöntemlerle SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, n=2)



Şekil 4.48. Farklı teoriler ve yöntemlerle zikzak SiCNT (12, 0) burkulma yükleri (CF, $n=3$)

Şekil 4.46, Şekil 4.47 ve Şekil 4.48’de (12, 0) kiraliteye sahip 576 atomlu 5 nm uzunluğundan 1728 atomlu 15 nm uzunluğuna kadar silisyum karbür nanotüplerin burkulma analiz sonuçları gösterilmiştir. Şekillerden açıkça görüldüğü gibi matematiksel model kullanılan klasik ve boyut etkili teori sonuçları birbirine bütün uzunluklar boyunca yakınen aynı durum moleküler dinamik analiz sonuçları için de geçerli olmuştur. Kritik burkulma yüklerinin gösterildiği Şekil 4.46’da matematiksel model ile elde edilen sonuçların, 6 nm uzunluğunda nanotüp incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla birbirine çok yakın olduğu görülmektedir. Bu uzunluktan daha kısa nanotüpler incelenen burkulma analizi sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından küçük olduğu görülmüştür. 6 nm’den daha uzun olan nanotüpler incelendiği durumda ise moleküler dinamik simülasyonları sonucunda elde edilen kritik burkulma yüklerinin hem boyut etkisiz hem boyut etkili matematiksel model kullanılarak yapılan analiz sonuçlarından büyük olduğu görülmüştür. Şekil 4.47’de ikinci mod için burkulma davranışları incelenmiştir. Kritik burkulma yüklerine benzer olarak ikinci mod incelendiğinde matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının yaklaşık 6 nm nanotüp uzunluğunda birleştikleri sonucuna ulaşılmıştır. 6 nm’den daha kısa nanotüp uzunluklarında uzunluk azaldıkça elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik sonuçlarının da birbirinden uzaklaştığı görülmüştür. En kısa nanotüp uzunluğu olan 5 nm sonuçları incelendiği zaman moleküler dinamik analiz sonuçlarının 2.5 nN burkulma yükü civarında toplandığı görülmüştür. Bunun yanında 5 nm uzunluğunda nanotüp matematiksel olarak modellendiğinde boyut etkisi dikkate alındığında yaklaşık 2.5 nN, boyut etkisi göz ardı edildiğinde ise 3 nN burkulma yükleri elde edilmiştir. 6 nm’den daha uzun nanotüpler incelendiği zaman

moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür. 6 nm'den daha uzun nanotüplerde moleküler dinamik simülasyon sonuçlarıyla matematiksel model kullanılan analizdeki sonuçların arasındaki farkın 6 nm'den küçük olan nanotüplerden çok daha az olduğu görülmüştür. Şekil 4.48'de üçüncü mod burkulma analizleri sonuçları gösterilmiştir. İlk iki moda benzer olarak üçüncü mod incelendiği zaman moleküler dinamik simülasyonlarından elde edilen sonuçların matematiksel modellerle elde edilen sonuçlarla görüldüğü gibi yaklaşık 10 nm uzunluğunda eşitlendiği görülmüştür. 6 nm'den daha uzun olan nanotüplerin analiz sonuçlarında moleküler dinamik simülasyonu sonuçları matematiksel model sonuçlarından ortalama % 2.5 daha küçük çıkmıştır. Kısa olan nanotüplerde moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının matematiksel model sonuçlarından uzak çıkması mod sayısı arttıkça daha da fazla olduğu görülmüştür. SiCNT'nin incelendiği bu üç burkulma grafiği incelendiğinde nanotüp uzunluğu azaldıkça moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarından uzak olduğu görülmüştür. İncelenen nanotüp uzunluğu 6 nm ve daha fazla olduğunda ise moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçların boyut etkili ve etkisiz matematik model kullanılan analiz sonuçlarıyla uyum içinde olduğu görülmüştür. Şekil 4.22, Şekil 4.23 ve Şekil 4.24'te gösterilen aynı nanotüplerin her iki ucundan mesnetlendiği durumla karşılaştırıldığında bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüplerin incelendiği bu üç analiz sonucunda moleküler dinamik simülasyonlarıyla elde edilen sonuçların matematiksel model kullanılarak boyut etkisinin dikkate alındığı ve göz ardı edildiği durumlarda elde edilen sonuçlarla çok daha uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

Çizelge 4.7. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=5 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	111.743	141.793	134.356	170.481
<i>NET EB</i>	109.836	139.172	132.805	168.392
<i>NET R</i>	100.149	127.021	111.771	143.775
<i>LAMMPS-LJ</i>	99.9229	126.677	111.530	143.050
<i>GROMACS-LJ</i>	99.5473	126.529	111.057	142.863
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	101.625	128.807	135.985	172.210
<i>GROMACS-Tersoff</i>	100.683	127.972	135.326	171.420

Çizelge 4.8. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=5 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	137.696	154.862	148.188	197.437
<i>NET EB</i>	134.775	153.3405	146.175	195.165
<i>NET R</i>	119.270	151.421	121.120	162.312
<i>LAMMPS-LJ</i>	120.124	151.625	121.179	162.475
<i>GROMACS-LJ</i>	119.502	151.377	120.975	162.275
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	120.891	152.251	121.601	163.420
<i>GROMACS-Tersoff</i>	120.325	151.829	121.105	162.363

Çizelge 4.9. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=6 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	98.4092	128.208	120.947	156.413
<i>NET EB</i>	94.9455	124.683	118.495	157.888
<i>NET R</i>	82.9961	113.852	94.9771	125.604
<i>LAMMPS-LJ</i>	83.2042	114.126	95.3207	126.075
<i>GROMACS-LJ</i>	82.8669	113.853	94.8525	125.420
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	84.2212	115.375	96.6125	127.275
<i>GROMACS-Tersoff</i>	84.0635	114.875	96.2433	126.735

Çizelge 4.10. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=6 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	123.808	141.565	134.116	184.076
<i>NET EB</i>	119.187	138.072	132.926	179.745
<i>NET R</i>	103.275	137.072	111.525	151.117
<i>LAMMPS-LJ</i>	102.938	136.550	110.928	150.571
<i>GROMACS-LJ</i>	102.766	136.245	110.420	150.382
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	103.822	137.275	112.225	151.440
<i>GROMACS-Tersoff</i>	103.475	137.125	112.275	151.415

Çizelge 4.11. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest SiCNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=10 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	45.2067	75.6305	70.2452	110.149
<i>NET EB</i>	41.0485	72.3155	68.3462	108.167
<i>NET R</i>	42.5765	73.3187	69.8975	108.925
<i>LAMMPS-LJ</i>	42.2205	73.0537	68.9175	108.475
<i>GROMACS-LJ</i>	42.1150	72.9512	68.8521	108.315
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	42.9355	73.6123	70.8674	109.715
<i>GROMACS-Tersoff</i>	42.7162	73.5450	70.6712	109.609

Çizelge 4.12. Farklı teoriler ve yöntemlerle bir ucu ankastre mesnetlenmiş bir ucu serbest BNNT'ye ait temel frekanslar (GHz) (L=10 nm)

	Kiralite			
	(5, 5)	(10, 10)	(10, 0)	(12, 0)
<i>CT</i>	76.1755	93.1112	83.4137	133.998
<i>NET EB</i>	73.6635	90.6425	82.2325	131.717
<i>NET R</i>	74.4151	92.8112	82.6888	132.703
<i>LAMMPS-LJ</i>	74.0527	91.6755	82.3875	132.352
<i>GROMACS-LJ</i>	74.0212	91.6155	82.3425	132.248
<i>LAMMPS-Tersoff</i>	74.7775	93.9465	82.9865	133.055
<i>GROMACS-Tersoff</i>	74.6175	93.6175	82.8055	132.375

5. SONUÇLAR

Bu tez kapsamında nanometre ölçeğinde olan nanotüplerden karbon nanotüpten sonra en geniş kullanım alanına sahip olan silisen ve borofen bazlı silisyum karbür ve bor nitrür nanotüplerinin titreşim ve burkulma davranışları incelenmiştir. Burkulma ve titreşim analizlerini yapmak için hem matematiksel model oluşturup klasik ve boyut etkisi dahil edilen yerel olmayan elastisite kullanılarak hem de moleküler dinamik simülasyon yöntemleri kullanılarak 5 nanometre uzunluktan 15 nanometre uzunluğa kadar (5, 5), (10, 10) koltuk ve (10, 0), (12, 0) zikzak kiraliteye sahip silisyum karbür ve bor nitrür nanotüpler incelenmiştir. Titreşim ve burkulma analizleri iki farklı mesnetlenme durumu için yapılmıştır. Bu mesnetlenme koşulları sırasıyla her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş nanotüpler (Şekil 3.1) ve bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan nanotüpler (Şekil 3.3) olmuştur. Klasik sürekli mekanik modelinin kullanıldığı boyut etkisiz durumda Euler-Bernoulli kiriş teorisi, boyut etkisinin dikkate alındığı durumda ise yerel olmayan elastisite teorisi kullanılarak analizler yapılmıştır. Yerel olmayan elastisiteyle titreşim analizleri hem çubuk modeli hem kiriş modeli kullanılarak yapılmıştır. Materyal ve metod bölümünde bu teorilerde kullanılan denklemlerin detaylı olarak elde edilmesi adım adım gösterilmiştir. Moleküler dinamik simülasyonları için iki farklı analiz paketi olan LAMMPS ve GROMACS kullanılmıştır. Her iki moleküler dinamik simülasyonları için iki farklı potansiyel enerji hesaplama yöntemi kullanılmıştır. Bu iki farklı potansiyel nanotüplerin moleküler simülasyonu için en çok kullanılan ve doğru sonuçlar elde edilen Lennard-Jones ve Tersoff potansiyelleridir. Materyal ve metod bölümünde moleküler dinamik simülasyonlarında etkili olan kuvvetler detaylı şekilde gösterilmiş, çalışma mantığı anlatılmıştır. Ayrıca, hem LAMMPS hem de GROMACS için (10, 10) kiraliteye sahip 6 nm uzunluğunda, 800 atomlu bor nitrür nanotübün ayrı ayrı girdi dosyaları çizelgeler halinde sunulmuştur. Moleküler dinamik simülasyonlarında 1 femtosaniye zaman aralığı seçilerek gerçekçi sonuçlar elde edilmiştir. Yapılan analizlerde matematiksel model için kullanılan elastisite modülü değerleri her incelenen nanotüp kiralitesi ve uzunluğu için moleküler dinamik simülasyonu için hesaplanıp kullanılmıştır. Şekiller 4.1-24 arasında her iki tarafından mesnetlenmiş nanotüplere ait sonuçlar, Şekiller 4.25-48 arasında ise bir ucu ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest nanotüplere ait burkulma analiz sonuçları grafikler halinde çizilmiştir. İki mesnetlenme durumu karşılaştırıldığında her iki ucu ankastre mesnetlenmiş durumlarda elde edilen burkulma yüklerinin moleküler dinamik simülasyonu kullanıldığında elde edilen sonuçlardan bir ucu ankastre diğer ucu serbest olan durumlarla karşılaştırıldığında zaman daha uzak olduğu açıkça görülmüştür. Bu farkın sebebi ankastre mesnetlenmenin sürekli ortam mekaniğindeki karşılığının birebir moleküler dinamikte sağlanamamasıdır. Açıkça görüldüğü gibi mesnetlenmenin tek tarafta uygulandığı diğer ucun serbest olduğu nanotüplerde yapılan analizlerde moleküler dinamik simülasyonundan elde edilen sonuçların matematik model kullanılan klasik ve boyut etkili analizlerde elde edilen sonuçlarla paralel elde edilmiştir. Her iki ucun ankastre mesnetlendiği durumlarda genellikle seçilen nanotüp uzunluğu aralığında tek bir nanotüp uzunluğunda elde edilen matematiksel model ve moleküler dinamik simülasyonu sonuçlarının birbirine çok yakın elde edildiği, diğer durumlarda ortalama %1 ile %50 arasında fark olduğu görülmüştür. İncelenen burkulma mod sayısının da arttıkça sonuçların uzaklaştığı görülmüştür. Farklı kiraliteye ve geometrik özelliğe sahip nanotüplerin mekanik ve elektronik davranışlarının da değiştiği bilindiği için incelenen her örneğin analiz sonuçları arasındaki farkın değişiminin beklenen sonuç olmuştur.

Bor nitrür ve silisyum karbür nanotüplerin titreşim analizleri hem moleküler dinamik simülasyonları hem de matematik modelleri kullanılarak yapılmıştır. Matematik model kullanılarak boyut etkisi dikkate alındığında hem çubuk hem de kiriş modelleriyle beraber boyut etkisinin göz ardı edildiği durum olan klasik teoriler de incelenmiştir. Çizelgeler 4.1-4.6'da her iki ucundan ankastre mesnetlenmiş bor nitrür ve silisyum karbür nanotüpler için yapılan titreşim analizlerinin sonuçları (THz) çizelge halinde sunulmuştur. Çizelgeler 4.7-4.12'de bir ucundan ankastre mesnetlenmiş diğer ucu serbest olan bor nitrür ve silisyum karbür nanotüpler için yapılan titreşim analizlerinin sonuçları (GHz) çizelge halinde sunulmuştur. Genel sonuç olarak bu çizelgelerden açıkça görüldüğü gibi nanotüp uzunluğu arttıkça elde edilen frekans değerinin düşmüştür. Farklı kiraliteler karşılaştırıldığında ise en yüksek frekansların (12, 0) kiralitede, en düşük frekansların ise (5, 5) kiralitede elde edildiği görülmüştür. Matematiksel model ile moleküler dinamik simülasyonları karşılaştırıldığında ise moleküler dinamik simülasyonlarına en yakın sonuçların boyut etkili çubuk modelde elde edildiği görülmüştür. Aynı uzunlukta nanotüpler incelendiği zaman beklendiği gibi bor nitrür nanotüpe ait frekansların her zaman silisyum karbüre ait frekanslardan daha büyük olduğu görülmüştür.

6. KAYNAKLAR

- Ahmad, P., Khandaker, M. U., Shah, S. T., Rehman, F., Khan, G., Muhammad, N., Rehman, M. A., Khan, A. S., Ahmed, S. M., Gulzar, M., et al. 2017. *Controlled synthesis of anisotropic hexagonal boron nitride nano-web. Materials Science in Semiconductor Processing*, 66: 44-49.
- Ajayan, P. M., and Iijima, S. 1992. *Smallest Carbon Nanotube. Nature*, 358(6381): 23-23.
- Akbas, S. D., Mercan, K., and Civalek, O. 2020. *Post-buckling analysis of aorta artery under axial compression loads. Advances in nano research*, 8(3): 255-264.
- Albe, K., and Möller, W. 1998. *Modelling of boron nitride: Atomic scale simulations on thin film growth. Computational Materials Science*, 10(1): 111-115.
- Alder, B. J., and Wainwright, T. E. 1957. *Phase Transition for a Hard Sphere System. The Journal of Chemical Physics*, 27(5): 1208-1209.
- Alder, B. J., and Wainwright, T. E. 1959. *Studies in Molecular Dynamics. I. General Method. The Journal of Chemical Physics*, 31(2): 459-466.
- Amari, S., Hoppe, P., Zinner, E., and Lewis, R. S. 1992. *Interstellar sic with unusual isotopic compositions - grains from a supernova. Astrophysical Journal*, 394(2): L43-L46.
- Angizi, S., Alem, S. a. A., Azar, M. H., Shayeganfar, F., Manning, M. I., Hatamie, A., Pakdel, A., and Simchi, A. 2022. *A comprehensive review on planar boron nitride nanomaterials: From 2D nanosheets towards 0D quantum dots. Progress in Materials Science*, 124.
- Ansari, R., Rouhi, S., Aryayi, M., and Mirnezhad, M. 2012. *On the buckling behavior of single-walled silicon carbide nanotubes. Scientia Iranica*, 19(6): 1984-1990.
- Arenal, R., Blase, X., and Loiseau, A. 2010. *Boron-nitride and boron-carbonitride nanotubes: synthesis, characterization and theory. Advances in Physics*, 59(2): 101-179.
- Arshadi, S., Abedini, S., Asghari, A., and Zaghmarzi, F. A. 2013. *Nuclear Magnetic Resonance Parameters of Pure and Diborinin-Doped (6,0) Single-Walled Zigzag BNNT: DFT Study. Journal of Chemistry*, 2013.
- Blase, X., Rubio, A., Louie, S. G., and Cohen, M. L. 1994. *Stability and Band Gap Constancy of Boron Nitride Nanotubes. Europhysics Letters (EPL)*, 28(5): 335-340.
- Borowiak-Palen, E., Ruemmeli, M. H., Gemming, T., Knupfer, M., Biedermann, K., Leonhardt, A., Pichler, T., and Kalenczuk, R. J. 2005. *Bulk synthesis of carbon-*

- filled silicon carbide nanotubes with a narrow diameter distribution. Journal of Applied Physics*, 97(5).
- Borzi, A., Zboray, R., Dolabella, S., Brun, S., Telmont, F., Kupferschmied, P., Le Neal, J. F., Drljaca, P., Fiorucci, G., Dommann, A., et al. 2022. *HRXRD and micro-CT multiscale investigation of stress and defects induced by a novel packaging design for MEMS sensors. Applied Materials Today*, 29.
- Boucle, J., Herlin-Boime, N., and Kassiba, A. 2005. *Influence of silicon and carbon excesses on the aqueous dispersion of SiC nanocrystals for optical application. Journal of Nanoparticle Research*, 7(2-3): 275-285.
- Brenner, D. W. 1990. *Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. Physical Review B*, 42(15): 9458-9471.
- Brenner, D. W. 2000. *The Art and Science of an Analytic Potential. physica status solidi (b)*, 217(1): 23-40.
- Broughton, J. Q., and Li, X. P. 1987. *Phase diagram of silicon by molecular dynamics. Physical Review B*, 35(17): 9120-9127.
- Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., and Ciraci, S. 2009. *Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium. Physical Review Letters*, 102(23): 236804.
- Chen, H., Yen, P. L., Li, J., He, C. Y., Ouyang, T., Zhang, C. X., Tang, C., and Zhong, J. X. 2020. *Tunable photoelectronic properties of hydrogenated-silicene/halogenated-silicene superlattices for water splitting. Journal of Applied Physics*, 127(8).
- Chen, Y., Chadderton, L. T., Fitzgerald, J., and Williams, J. S. 1999a. *A solid-state process for formation of boron nitride nanotubes. Applied Physics Letters*, 74(20): 2960-2962.
- Chen, Y., Conway, M., Williams, J. S., and Zou, J. 2002. *Large-quantity production of high-yield boron nitride nanotubes. Journal of Materials Research*, 17(8): 1896-1899.
- Chen, Y., Fitz Gerald, J. D., Williams, J. S., and Bulcock, S. 1999b. *Synthesis of boron nitride nanotubes at low temperatures using reactive ball milling. Chemical Physics Letters*, 299(3-4): 260-264.
- Chen, Y. L., Yu, G. T., Chen, W., Liu, Y. P., Li, G. D., Zhu, P. W., Tao, Q., Li, Q. J., Liu, J. W., Shen, X. P., et al. 2017. *Highly Active, Nonprecious Electrocatalyst Comprising Borophene Subunits for the Hydrogen Evolution Reaction. Journal of the American Chemical Society*, 139(36): 12370-12373.

- Chernozatonskii, L. A. 1992a. *Carbon Nanotube Connectors and Planar Jungle Gyms. Physics Letters A*, 172(3): 173-176.
- Chernozatonskii, L. A. 1992b. *Carbon Nanotube Elbow Connections and Tori. Physics Letters A*, 170(1): 37-40.
- Chisholm, N., Mahfuz, H., Rangari, V. K., Ashfaq, A., and Jeelani, S. 2005. *Fabrication and mechanical characterization of carbon/SiC-epoxy nanocomposites. Composite Structures*, 67(1): 115-124.
- Chopra, N. G., Luyken, R. J., Cherrey, K., Crespi, V. H., Cohen, M. L., Louie, S. G., and Zettl, A. 1995a. *Boron Nitride Nanotubes. science*, 269(5226): 966-967.
- Chopra, N. G., Luyken, R. J., Cherrey, K., Crespi, V. H., Cohen, M. L., Louie, S. G., and Zettl, A. 1995b. *Boron-nitride nanotubes. science*, 269(5226): 966-967.
- Coleman, J. N., Curran, S., Dalton, A. B., Davey, A. P., Mccarthy, B., Blau, W., and Barklie, R. C. 1998. *Percolation-dominated conductivity in a conjugated-polymer-carbon-nanotube composite. Physical Review B*, 58(12): R7492-R7495.
- Cong, Z., and Lee, S. 2018. *Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations. Composite Structures*, 194: 80-86.
- Cui, H., Zhang, X. X., and Chen, D. C. 2018. *Borophene: a promising adsorbent material with strong ability and capacity for SO₂ adsorption. Applied Physics a-Materials Science & Processing*, 124(9).
- Curran, S. A., Ajayan, P. M., Blau, W. J., Carroll, D. L., Coleman, J. N., Dalton, A. B., Davey, A. P., Drury, A., Mccarthy, B., Maier, S., et al. 1998. *A composite from poly(m-phenylenevinylene-co-2,5-diethoxy-p-phenylenevinylene) and carbon nanotubes: A novel material for molecular optoelectronics. Advanced Materials*, 10(14): 1091-+.
- Daw, M. S., and Baskes, M. I. 1984. *Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. Physical Review B*, 29(12): 6443-6453.
- Demir, C., Akgoz, B., Erdinc, M. C., Mercan, K., and Civalek, O. 2017. *Free vibration analysis of graphene sheets on elastic matrix. Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University*, 32(2): 551-562.
- Demir, C., Mercan, K., and Civalek, O. 2016. *Determination of critical buckling loads of isotropic, FGM and laminated truncated conical panel. Composites Part B-Engineering*, 94: 1-10.
- Dimonte, G., Terrones, G., Cherne, F. J., Germann, T. C., Dupont, V., Kadau, K., Buttler, W. T., Oro, D. M., Morris, C., and Preston, D. L. 2011. *Use of the Richtmyer-*

- Meshkov Instability to Infer Yield Stress at High-Energy Densities. Physical Review Letters*, 107(26).
- Ebbesen, T. W., and Ajayan, P. M. 1992. *Large-Scale Synthesis of Carbon Nanotubes. nature*, 358(6383): 220-222.
- 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. 2002. *Nonlocal continuum field theories*: Springer Science & Business Media.
- Ersoy, H., Mercan, K., and Civalek, O. 2018. *Frequencies of FGM shells and annular plates by the methods of discrete singular convolution and differential quadrature methods. Composite Structures*, 183: 7-20.
- Fan, J.-Y., and Chu, P. K.-H. (2014). Separate SiC Nanoparticles. In J. FAN and P. K. CHU (Eds.), *Silicon Carbide Nanostructures: Fabrication, Structure, and Properties* (pp. 131-193). Cham: Springer International Publishing.
- Finnis, M. W., and Sinclair, J. E. 1984. *A simple empirical N-body potential for transition metals. Philosophical Magazine A*, 50(1): 45-55.
- Fitz Gerald, J. D., Chen, Y., and Conway, M. J. 2003. *Nanotube growth during annealing of mechanically milled Boron. Applied Physics a-Materials Science & Processing*, 76(1): 107-110.
- Gali, A. 2006. *Ab initio study of nitrogen and boron substitutional impurities in single-wall SiC nanotubes. Physical Review B*, 73(24).
- Gallino, R., Raiteri, C. M., and Busso, M. 1993. *Carbon stars and isotopic ba anomalies in meteoritic sic grains. Astrophysical Journal*, 410(1): 400-411.
- Gao, Y. F., Zhou, Y. G., Zhang, X. L., and Hu, M. 2018. *Extremely Low Thermal Conductivity of Polycrystalline Silicene. Journal of Physical Chemistry C*, 122(16): 9220-9228.
- Gibson, J. a. E. 1992. *Early Nanotubes. nature*, 359(6394): 369-369.
- Gibson, J. B., Goland, A. N., Milgram, M., and Vineyard, G. H. 1960. *Dynamics of Radiation Damage. Physical Review*, 120(4): 1229-1253.
- Goel, S., Luo, X., Reuben, R. L., and Rashid, W. B. 2011. *Atomistic aspects of ductile responses of cubic silicon carbide during nanometric cutting. Nanoscale Research Letters*, 6(1): 589.

- Golberg, D., Bando, Y., Eremets, M., Takemura, K., Kurashima, K., and Yusa, H. 1996. *Nanotubes in boron nitride laser heated at high pressure. Applied Physics Letters*, 69(14): 2045-2047.
- Griebel, M., and Hamaekers, J. 2007. *Molecular dynamics simulations of boron-nitride nanotubes embedded in amorphous Si-B-N. Computational Materials Science*, 39(3): 502-517.
- Guo, L., and Singh, R. N. 2008. *Selective growth of boron nitride nanotubes by plasma-enhanced chemical vapor deposition at low substrate temperature. Nanotechnology*, 19(6).
- Guo, L., and Singh, R. N. 2009. *Catalytic growth of boron nitride nanotubes using gas precursors. Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures*, 41(3): 448-453.
- Guzmán-Verri, G. G., and Lew Yan Voon, L. C. 2007. *Electronic structure of silicon-based nanostructures. Physical Review B*, 76(7): 075131.
- Hacohen, Y. R., Grunbaum, E., Tenne, R., Sloan, J., and Hutchison, J. L. 1998. *Cage structures and nanotubes of NiCl₂. nature*, 395(6700): 336-337.
- Haldar, S., Mukherjee, S., and Singh, C. V. 2018. *Hydrogen storage in Li, Na and Ca decorated and defective borophene: a first principles study. Rsc Advances*, 8(37): 20748-20757.
- Hao, S., Zhou, G., Duan, W., Wu, J., and Gu, B.-L. 2006. *Tremendous Spin-Splitting Effects in Open Boron Nitride Nanotubes: Application to Nanoscale Spintronic Devices. Journal of the American Chemical Society*, 128(26): 8453-8458.
- He, X., Gui, Y. G., Liu, K., and Xu, L. N. 2020. *Comparison of sensing and electronic properties of C₂H₂ on different transition metal oxide nanoparticles (Fe₂O₃, NiO, TiO₂) modified BNNT (10,0). Applied Surface Science*, 521.
- Henderson, E. J., and Veinot, J. G. C. 2009. *From Phenylsiloxane Polymer Composition to Size-Controlled Silicon Carbide Nanocrystals. Journal of the American Chemical Society*, 131(2): 809-815.
- Herzallah, H., Elsayd, A., Shash, A., and Adly, M. 2020. *Effect of carbon nanotubes (CNTs) and silicon carbide (SiC) on mechanical properties of pure Al manufactured by powder metallurgy. Journal of Materials Research and Technology-Jmr&T*, 9(2): 1948-1954.
- Hollabaugh, C. M., Hull, D. E., Newkirk, L. R., and Petrovic, J. J. 1983. *RF-Plasma system for the production of ultrafine, ultrapure silicon-carbide powder. Journal of Materials Science*, 18(11): 3190-3194.
- Hoppe, P., Amari, S., Zinner, E., Ireland, T., and Lewis, R. S. 1994. *Carbon, nitrogen, magnesium, silicon, and titanium isotopic compositions of single interstellar*

- silicon-carbide grains from the murchison carbonaceous chondrite. Astrophysical Journal*, 430(2): 870-+.
- Hoppe, P., Strebel, R., Eberhardt, P., Amari, S., and Lewis, R. S. 1996. *Small SiC grains and a nitride grain of circumstellar origin from the Murchison meteorite: Implications for stellar evolution and nucleosynthesis. Geochimica Et Cosmochimica Acta*, 60(5): 883-907.
- Hu, S., Li, Z., Zeng, X. C., and Yang, J. 2008. *Electronic Structures of Defective Boron Nitride Nanotubes under Transverse Electric Fields. The Journal of Physical Chemistry C*, 112(22): 8424-8428.
- Huang, B., Xiang, H. J., and Wei, S. H. 2013. *Chemical Functionalization of Silicene: Spontaneous Structural Transition and Exotic Electronic Properties. Physical Review Letters*, 111(14).
- Huang, C. S., Murat, A., Babar, V., Montes, E., and Schwingenschlogl, U. 2018. *Adsorption of the Gas Molecules NH₃, NO, NO₂, and CO on Borophene. Journal of Physical Chemistry C*, 122(26): 14665-14670.
- Huang, T. H., Tian, B. W., Guo, J. Y., Shu, H. B., Wang, Y., and Dai, J. 2019. *Semiconducting borophene as a promising anode material for Li-ion and Na-ion batteries. Materials Science in Semiconductor Processing*, 89: 250-255.
- Huisken, F., Kohn, B., Alexandrescu, R., Cojocaru, S., Crunteanu, A., Ledoux, G., and Reynaud, C. 1999. *Silicon Carbide Nanoparticles Produced by CO₂ Laser Pyrolysis of SiH₄/C₂H₂ Gas Mixtures in a Flow Reactor. Journal of Nanoparticle Research*, 1(2): 293-303.
- Iijima, S. 1991. *Helical microtubules of graphitic carbon. nature*, 354(6348): 56.
- Iijima, S., Ajayan, P. M., and Ichihashi, T. 1992. *Growth-Model for Carbon Nanotubes. Physical Review Letters*, 69(21): 3100-3103.
- Iijima, S., and Ichihashi, T. 1993. *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. nature*, 363(6430): 603-605.
- Jeong, B.-W., Lim, J.-K., and Sinnott, S. B. 2007. *Tensile mechanical behavior of hollow and filled carbon nanotubes under tension or combined tension-torsion. Applied Physics Letters*, 90(2): 023102.
- Jiang, H., and Cheng, X. L. 2019. *MD simulation of methane adsorption properties on pillared graphene bubble models. Journal of Molecular Modeling*, 25(8).
- Jiang, H. R., Lu, Z., Wu, M. C., Ciucci, F., and Zhao, T. S. 2016a. *Borophene: A promising anode material offering high specific capacity and high rate capability for lithium-ion batteries. Nano Energy*, 23: 97-104.

- Jiang, H. R., Lu, Z. H., Wu, M. C., Ciucci, F., and Zhao, T. S. 2016b. *Borophene: A promising anode material offering high specific capacity and high rate capability for lithium-ion batteries*. *Nano Energy*, 23: 97-104.
- Jiang, X. F., Weng, Q. H., Wang, X. B., Li, X., Zhang, J., Golberg, D., and Bando, Y. 2015. *Recent Progress on Fabrications and Applications of Boron Nitride Nanomaterials: A Review*. *Journal of Materials Science & Technology*, 31(6): 589-598.
- Jiyang, F., and Paul, K. C. 2014. *Silicon Carbide Nanostructures: Fabrication, Structure, and Properties*: Springer.
- Jones, J. E., and Chapman, S. 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.
- Kalwar, B. A., Zong, W. F., Ahmed, I., and Saeed, M. H. 2021. *Ti atomdoped single vacancy silicene for hydrogen energy storage: DFT study*. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 68(12): 2243-2253.
- Kassiba, A., Makowska-Janusik, M., Boucle, J., Bardeau, J. F., Bulou, A., and Herlin-Boime, N. 2002. *Photoluminescence features on the Raman spectra of quasistoichiometric SiC nanoparticles: Experimental and numerical simulations*. *Physical Review B*, 66(15).
- Kassiba, A., Tabellout, M., Charpentier, S., Herlin, N., and Emery, J. R. 2000. *Conduction and dielectric behaviour of SiC nano-sized materials*. *Solid State Communications*, 115(7): 389-393.
- Khalkhali, M., Rajabpour, A., and Khoeini, F. 2019. *Thermal transport across grain boundaries in polycrystalline silicene: A multiscale modeling*. *Scientific Reports*, 9.
- Khanifaev, J., Pekoz, R., Konuk, M., and Durgun, E. 2017. *The interaction of halogen atoms and molecules with borophene*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(42): 28963-28969.
- Kim, H. 2009. *Supercooled Liquid, Glass and Glass Transition*. *Journal of the Korean Chemical Society-Daehan Hwahak Hoe Jee*, 53(2): 99-110.
- Kityk, I. V., Makowska-Janusik, M., Kassiba, A., and Plucinski, K. J. 2000. *SiC nanocrystals embedded in oligoetheracrylate photopolymer matrices; new promising nonlinear optical materials*. *Optical Materials*, 13(4): 449-453.
- Klein, S., Winterer, M., and Hahn, H. 1998. *Reduced-pressure chemical vapor synthesis of nanocrystalline silicon carbide powders*. *Chemical Vapor Deposition*, 4(4): 143-149.

- Klochko, L., Noel, J., Sgreva, N. R., Leclerc, S., Metivier, C., Lacroix, D., and Isaiev, M. 2022. *Thermophysical properties of n-hexadecane: Combined molecular dynamics and experimental investigations. International Communications in Heat and Mass Transfer*, 137.
- Kootenaei, A. S., and Ansari, G. 2016. *B-36 borophene as an electronic sensor for formaldehyde: Quantum chemical analysis. Physics Letters A*, 380(34): 2664-2668.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., and Smalley, R. E. 1985. *C-60 - buckminsterfullerene. nature*, 318(6042): 162-163.
- Kumar, R., Rajasekaran, G., and Parashar, A. 2016. *Optimised cut-off function for Tersoff-like potentials for a BN nanosheet: a molecular dynamics study. Nanotechnology*, 27(8): 085706.
- Lan, J., Yang, Y., and Li, X. C. 2004. *Microstructure and microhardness of SiC nanoparticles reinforced magnesium composites fabricated by ultrasonic method. Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 386(1-2): 284-290.
- Laude, T., Matsui, Y., Marraud, A., and Jouffrey, B. 2000. *Long ropes of boron nitride nanotubes grown by a continuous laser heating. Applied Physics Letters*, 76(22): 3239-3241.
- Le, M.-Q. 2014a. *Young's modulus prediction of hexagonal nanosheets and nanotubes based on dimensional analysis and atomistic simulations. Meccanica*, 49(7): 1709-1719.
- Le, M.-Q. 2015. *Prediction of Young's modulus of hexagonal monolayer sheets based on molecular mechanics. International Journal of Mechanics and Materials in Design*, 11(1): 15-24.
- Le, M. Q. 2014b. *Atomistic Study on the Tensile Properties of Hexagonal AlN, BN, GaN, InN and SiC Sheets. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 11(6): 1458-1464.
- Le, M. Q., Mortazavi, B., and Rabczuk, T. 2016. *Mechanical properties of borophene films: a reactive molecular dynamics investigation. Nanotechnology*, 27(44).
- Leng, S. L., Sun, X. Y., Yang, Y. C., and Zhang, R. H. 2019. *Borophene as an anode material for Zn-ion batteries: a first-principles investigation. Materials Research Express*, 6(8).
- Lherbier, A., Botello-Mendez, A. R., and Charlier, J. C. 2016. *Electronic and optical properties of pristine and oxidized borophene. 2d Materials*, 3(4).

- Li, J. Y., Lv, H. Y., Lu, W. J., Shao, D. F., Xiao, R. C., and Sun, Y. P. 2016. *Tuning the electronic and magnetic properties of borophene by 3d transition-metal atom adsorption. Physics Letters A*, 380(46): 3928-3931.
- Li, Q. Y., Zhang, Y., Fan, R. D., Wang, Y., Wang, Y., and Wang, C. H. 2022. *MEMS mirror based omnidirectional scanning for lidar optical systems. Optics and Lasers in Engineering*, 158.
- Li, X., Wang, X. P., Zhang, J., Hanagata, N., Wang, X. B., Weng, Q. H., Ito, A., Bando, Y., and Golberg, D. 2017. *Hollow boron nitride nanospheres as boron reservoir for prostate cancer treatment. Nature Communications*, 8.
- Lim, H., Kim, B., and Jang, S. G. 2019. *Highly stable boron nitride nanotube (BNNT) dispersions and pastes for thin film coatings and fibers. Abstracts of Papers of the American Chemical Society*, 257.
- Lin, H. F., Gerbec, J. A., Sushchikh, M., and Mcfarland, E. W. 2008. *Synthesis of amorphous silicon carbide nanoparticles in a low temperature low pressure plasma reactor. Nanotechnology*, 19(32).
- Liu, N., Hong, J. W., Pidaparti, R., and Wang, X. Q. 2016. *Abnormality in fracture strength of polycrystalline silicene. 2d Materials*, 3(3).
- Liu, W. W., Zhang, L., Yue, C. G., Su, J. N., Bai, P. C., and Chen, Y. 2014. *Strain Hardening Mechanism of (BNNT-BNNP)/(ZrB₂-SiC) Ultrahigh-Temperature Ceramic Composites. Rare Metal Materials and Engineering*, 43(12): 3078-3081.
- Lu, A. H., Schmidt, W., Kiefer, W., and Schuth, F. 2005. *High surface area mesoporous SiC synthesized via nanocasting and carbothermal reduction process. Journal of Materials Science*, 40(18): 5091-5093.
- Lundgren, C., Kakanakova-Georgieva, A., and Gueorguiev, G. K. 2022. *A perspective on thermal stability and mechanical properties of 2D Indium Bismide from ab initio molecular dynamics. Nanotechnology*, 33(33).
- Luo, X. M., Qi, L. P., Wen, S. M., Wang, Y. F., Lai, H., Lin, Q. Q., Zhou, Y. F., Wu, X. T., and Song, Z. G. 2021. *Adsorption configuration of dodecylamine at gas-liquid interface and its relationship with foam stability: MD simulation and ToF-SIMS investigation. Minerals Engineering*, 164.
- Macchiagodena, M., Karrenbrock, M., Pagliai, M., and Procacci, P. 2021. *Virtual Double-System Single-Box for Absolute Dissociation Free Energy Calculations in GROMACS. Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(11): 5320-5326.
- Mackerell, A. D., Bashford, D., Bellott, M., Dunbrack, R. L., Evanseck, J. D., Field, M. J., Fischer, S., Gao, J., Guo, H., Ha, S., et al. 1998. *All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins. Journal of Physical Chemistry B*, 102(18): 3586-3616.

- Makowska-Janusik, M., Kassiba, A., Boucle, J., Bardeau, J. F., Kodjikian, S., and Desert, A. 2005. *Vibrational density of states in silicon carbide nanoparticles: experiments and numerical simulations*. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 17(33): 5101-5110.
- Matsunaga, K., and Iwamoto, Y. 2001. *Molecular Dynamics Study of Atomic Structure and Diffusion Behavior in Amorphous Silicon Nitride Containing Boron*. *Journal of the American Ceramic Society*, 84(10): 2213-2219.
- Memarian, F., Fereidoon, A., Khodaei, S., Mashhadzadeh, A. H., and Ganji, M. D. 2017. *Molecular dynamic study of mechanical properties of single/double wall SiCNTs: Consideration temperature, diameter and interlayer distance*. *Vacuum*, 139: 93-100.
- Mercan, K. 2016. *A Comparative Buckling Analysis of Silicon Carbide Nanotube and Boron Nitride Nanotube*. *International Journal of Engineering & Applied Sciences*, 8(4): 99-107.
- Mercan, K., Baltacioglu, A. K., and Civalek, O. 2018. *Free vibration of laminated and FGM/CNT composites annular thick plates with shear deformation by discrete singular convolution method*. *Composite Structures*, 186: 139-153.
- Mercan, K., and Civalek, O. 2016a. *DSC method for buckling analysis of boron nitride nanotube (BNNT) surrounded by an elastic matrix*. *Composite Structures*, 143: 300-309.
- Mercan, K., and Civalek, O. 2017a. *Buckling analysis of Silicon carbide nanotubes (SiCNTs) with surface effect and nonlocal elasticity using the method of HDQ*. *Composites Part B-Engineering*, 114: 35-45.
- Mercan, K., and Civalek, O. 2022. *Comparative Stability Analysis of Boron Nitride Nanotube using MD Simulation and Nonlocal Elasticity Theory*. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 13(4): 189-200.
- Mercan, K., and Civalek, Ö. 2016b. *Buckling Analysis of Silicon Carbide Nanotubes (SiCNTs)*. *International Journal of Engineering & Applied Sciences (IJEAS)*, 8(2): 101-108.
- Mercan, K., and Civalek, Ö. 2016c. *DSC method for buckling analysis of boron nitride nanotube (BNNT) surrounded by an elastic matrix*. *Composite Structures*, 143: 300-309.
- Mercan, K., and Civalek, Ö. 2017b. *Buckling analysis of Silicon carbide nanotubes (SiCNTs) with surface effect and nonlocal elasticity using the method of HDQ*. *Composites Part B: Engineering*, 114: 34-45.
- Mercan, K., and Civalek, Ö. 2017c. *Comparison of small scale effect theories for buckling analysis of nanobeams*. *Int J Eng*, 9(3).

- Mercan, K., Ebrahimi, F., and Civalek, O. 2020. *Vibration of angle-ply laminated composite circular and annular plates*. *Steel and Composite Structures*, 34(1): 141-154.
- Mercan, K., Emsen, E., and Civalek, O. 2019. *Effect of silicon dioxide substrate on buckling behavior of Zinc Oxide nanotubes via size-dependent continuum theories*. *Composite Structures*, 218: 130-141.
- Mercan, K., Numanoglu, H. M., Akgoz, B., Demir, C., and Civalek, O. 2017a. *Higher-order continuum theories for buckling response of silicon carbide nanowires (SiCNWs) on elastic matrix*. *Archive of Applied Mechanics*, 87(11): 1797-1814.
- Mercan, K., Numanoglu, H. M., Akgöz, B., Demir, C., and Civalek, Ö. 2017b. *Higher-order continuum theories for buckling response of silicon carbide nanowires (SiCNWs) on elastic matrix*. *Archive of Applied Mechanics*, 87(11): 1797-1814.
- Merlo, A., Mokkapat, V., Pandit, S., and Mijakovic, I. 2018. *Boron nitride nanomaterials: biocompatibility and bio-applications*. *Biomaterials Science*, 6(9): 2298-2311.
- Mistry, S., Pillai, R., Mattia, D., and Borg, M. K. 2021. *Untangling the physics of water transport in boron nitride nanotubes*. *Nanoscale*, 13(43): 18096-18102.
- Moon, W. H., Son, M. S., Lee, J. H., and Hwang, H. J. 2004. *Molecular dynamics simulation of C60 encapsulated in boron nitride nanotubes*. *physica status solidi (b)*, 241(8): 1783-1788.
- Mortazavi, B., Rahaman, O., Dianat, A., and Rabczuk, T. 2016. *Mechanical responses of borophene sheets: a first-principles study*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(39): 27405-27413.
- Mukherjee, S., and Thilagar, P. 2016. *Borophene: a new paradigm!* *Current Science*, 111(8): 1302-1304.
- Nagarajan, V., and Chandiramouli, R. 2017. *Borophene nanosheet molecular device for detection of ethanol - A first-principles study*. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1105: 52-60.
- Nasrollahpour, M., Vafaei, M., and Razzaghi, S. 2022. *Structural and dynamical properties of Palmitoyl-Oleoyl phosphatidylserine lipid nanotubes containing cholesterol and PEGylated dioleoyl Phosphatidylethanolamine: A Coarse-Grained molecular dynamics simulation*. *Chemical Engineering Science*, 260.
- Nhut, J. M., Vieira, R., Pesant, L., Tessonier, J. P., Keller, N., Ehret, G., Pham-Huu, C., and Ledoux, M. J. 2002. *Synthesis and catalytic uses of carbon and silicon carbide nanostructures*. *Catalysis Today*, 76(1): 11-32.
- Nicolussi, G. K., Pellin, M. J., Lewis, R. S., Davis, A. M., Clayton, R. N., and Amari, S. 1998. *Strontium Isotopic Composition in Individual Circumstellar Silicon*

- Carbide Grains: A Record of s -Process Nucleosynthesis*. *Physical Review Letters*, 81(17): 3583-3586.
- Nishihara, K., Wouchuk, J. G., Matsuoka, C., Ishizaki, R., and Zhakhovsky, V. V. 2010. *Richtmyer–Meshkov instability: theory of linear and nonlinear evolution*. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 368(1916): 1769-1807.
- Numanoglu, H. M., Mercan, K., and Civalek, O. 2019. *Finite element model and size-dependent stability analysis of boron nitride and silicon carbide nanowires/nanotubes*. *Scientia Iranica*, 26(4): 2079-2099.
- Ohji, T., Nakahira, A., Hirano, T., and Niihara, K. 1994. *Tensile creep-behavior of alumina silicon-carbide nanocomposite*. *Journal of the American Ceramic Society*, 77(12): 3259-3262.
- Pall, S., Zhmurov, A., Bauer, P., Abraham, M., Lundborg, M., Gray, A., Hess, B., and Lindahl, E. 2020. *Heterogeneous parallelization and acceleration of molecular dynamics simulations in GROMACS*. *Journal of Chemical Physics*, 153(13).
- Parrinello, M., and Rahman, A. 1981. *Polymorphic transitions in single-crystals - a new molecular-dynamics method*. *Journal of Applied Physics*, 52(12): 7182-7190.
- Pham-Huu, C., Keller, N., Ehret, G., and Ledoux, M. J. 2001. *The first preparation of silicon carbide nanotubes by shape memory synthesis and their catalytic potential*. *Journal of Catalysis*, 200(2): 400-410.
- Pol, V. G., Pol, S. V., and Gedanken, A. 2005. *Novel synthesis of high surface area silicon carbide by RAPET (reactions under autogenic pressure at elevated temperature) of organosilanes*. *Chemistry of Materials*, 17(7): 1797-1802.
- Rahman, A. 1964. *Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon*. *Physical Review*, 136(2A): A405-A411.
- Rakhshani, H., Dehghanian, E., and Rahati, A. 2019. *Enhanced GROMACS: toward a better numerical simulation framework*. *Journal of Molecular Modeling*, 25(12).
- Rao, N. P., Tymiak, N., Blum, J., Neuman, A., Lee, H. J., Girshick, S. L., Mcmurry, P. H., and Heberlein, J. 1998. *Hypersonic plasma particle deposition of nanostructured silicon and silicon carbide*. *Journal of Aerosol Science*, 29(5-6): 707-720.
- Rappe, A. K., and Goddard, W. A. 1991. *Charge equilibration for molecular dynamics simulations*. *The Journal of Physical Chemistry*, 95(8): 3358-3363.
- Reddy, J. N., and Pang, S. D. 2008. *Nonlocal continuum theories of beams for the analysis of carbon nanotubes*. *Journal of Applied Physics*, 103(2): 023511.

- Rentsch, R. G., and Vdi Gesell, P. (1996, Sep 30-Oct 02). *Process modeling by means at molecular dynamics (MD)*. Paper presented at the 2nd International Conference on Machining of Advanced Materials (MAM), Aachen, Germany.
- Rostami, Z., and Soleymanabadi, H. 2016. *N-H bond cleavage of ammonia on graphene-like B-36 borophene: DFT studies*. *Journal of Molecular Modeling*, 22(4).
- Rubio, A., Corkill, J. L., and Cohen, M. L. 1994a. *Theory of graphitic boron nitride nanotubes*. *Physical Review B*, 49(7): 5081-5084.
- Rubio, A., Corkill, J. L., and Cohen, M. L. 1994b. *Theory of graphitic boron-nitride nanotubes*. *Physical Review B*, 49(7): 5081-5084.
- Sahoo, S., Sinha, A., Koshi, N. A., Lee, S. C., Bhattacharjee, S., and Muralidharan, B. 2022. *Silicene: an excellent material for flexible electronics*. *Journal of Physics D-Applied Physics*, 55(42).
- Sakharova, N. A., Antunes, J. M., Pereira, A. F. G., Chaparro, B. M., and Fernandes, J. V. 2021. *On the Determination of Elastic Properties of Single-Walled Boron Nitride Nanotubes by Numerical Simulation*. *Materials*, 14(12).
- Sawaguchi, A., and Toda, K. 1991. *Mechanical and electrical-properties of silicon-nitride silicon-carbide nanocomposite material*. *Journal of the American Ceramic Society*, 74(5): 1142-1144.
- Schadler, L. S., Giannaris, S. C., and Ajayan, P. M. 1998. *Load transfer in carbon nanotube epoxy composites*. *Applied Physics Letters*, 73(26): 3842-3844.
- Schulz, M., Shanov, V., and Yin, Z. 2013. *Nanotube Superfiber Materials: Changing Engineering Design*: William Andrew.
- Sekkal, W., Bouhafs, B., Aourag, H., and Certier, M. 1998. *Molecular-dynamics simulation of structural and thermodynamic properties of boron nitride*. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 10(23): 4975-4984.
- Sevik, C., Kinaci, A., Haskins, J. B., and Çağın, T. 2011. *Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures*. *Physical Review B*, 84(8): 085409.
- Shi, L., Zhao, T. S., Xu, A., and Xu, J. B. 2016. *Ab initio prediction of borophene as an extraordinary anode material exhibiting ultrafast directional sodium diffusion for sodium-based batteries*. *Science Bulletin*, 61(14): 1138-1144.
- Sinehbaghizadeh, S., Saptoro, A., Amjad-Iranagh, S., Tiong, A. N. T., and Mohammadi, A. H. 2022. *Molecular Dynamics Simulation Studies on the Stability and Dissociation of Clathrate Hydrates of Single and Double Greenhouse Gases*. *Energy & Fuels*.

- Singh, S. K., Neek-Amal, M., Costamagna, S., and Peeters, F. M. 2013. *Thermomechanical properties of a single hexagonal boron nitride sheet. Physical Review B*, 87(18): 184106.
- Sinnott, S. B., and Brenner, D. W. 2012. *Three decades of many-body potentials in materials research. Mrs Bulletin*, 37(5): 469-473.
- Solozhenko, V. L., Lazarenko, A. G., Petitet, J. P., and Kanaev, A. V. 2001. *Bandgap energy of graphite-like hexagonal boron nitride. Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 62(7): 1331-1334.
- Song, F. H., Liu, L. Y., Wang, Y. C., Fan, J., and Zhao, X. R. 2022. *Molecular dynamic investigation on the thermophysical properties of binary molten carbonate mixtures. Journal of Molecular Liquids*, 363.
- Stuart, S. J., Tutein, A. B., and Harrison, J. A. 2000. *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. The Journal of Chemical Physics*, 112(14): 6472-6486.
- Sukumaran, S. K. 2013. *Using Molecular Dynamics Simulations to Understand Entangled Polymeric Liquids. Nihon Reoroji Gakkaishi*, 41(5): 283-288.
- Sun, H. Y., Li, Q. F., and Wan, X. G. 2016. *First-principles study of thermal properties of borophene. Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(22): 14927-14932.
- Taguchi, T., Igawa, N., Yamamoto, H., and Jitsukawa, S. 2005. *Synthesis of silicon carbide nanotubes. Journal of the American Ceramic Society*, 88(2): 459-461.
- Takeda, K., and Shiraishi, K. 1994. *Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite. Physical Review B*, 50(20): 14916-14922.
- Tanaka, H. 1996. *A self-consistent phase diagram for supercooled water. nature*, 380(6572): 328-330.
- Tang, C., Bando, Y., Sato, T., and Kurashima, K. 2002. *A novel precursor for synthesis of pure boron nitride nanotubes. Chemical Communications*(12): 1290-1291.
- Tersoff, J. 1986. *New empirical model for the structural properties of silicon. Physical Review Letters*, 56(6): 632-635.
- Tersoff, J. 1988a. *Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon. Physical Review Letters*, 61(25): 2879-2882.
- Tersoff, J. 1988b. *New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. Physical Review B*, 37(12): 6991-7000.
- Vaezi, M. R., Sadrnezhad, S. K., and Nikzad, L. 2008. *Electrodeposition of Ni-SiC nano-composite coatings and evaluation of wear and corrosion resistance and*

- electroplating characteristics. Colloids and Surfaces a-Physicochemical and Engineering Aspects*, 315(1-3): 176-182.
- Verma, G., and Gupta, A. 2022. *Sensing performance of room temperature operated MEMS gas sensor for ppb level detection of hydrogen sulfide: a review. Journal of Micromechanics and Microengineering*, 32(9).
- Vo, A. T. N., Murphy, M. A., Stone, T. W., Phan, P. K., Baskes, M. I., and Prabhu, R. K. 2021. *Molecular dynamics simulations of phospholipid bilayer mechanoporation under different strain states-a comparison between GROMACS and LAMMPS. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 29(5).
- Vokhmintsev, A. S., Minin, M. G., and Weinstein, I. A. 2016. *Application of hexagonal boron nitride micropowder for thermoluminescent dosimetry of UV radiation. Radiation Measurements*, 90: 205-209.
- Wang, H. F., Li, Q. F., Gao, Y., Miao, F., Zhou, X. F., and Wan, X. G. 2016. *Strain effects on borophene: ideal strength, negative Poisson's ratio and phonon instability. New Journal of Physics*, 18.
- Wang, L. T., Yuan, M. L., Zhao, Y. D., Guo, Z., Lu, X., and Xin, Z. 2022a. *Fabrication of superhydrophobic bio-based polybenzoxazine/hexagonal boron nitride composite coating for corrosion protection. Progress in Organic Coatings*, 167.
- Wang, S. R., Wang, G. Q., Wen, D. S., Yang, X. F., Yang, L. Y., and Guo, P. Q. 2018. *Mechanical Properties and Thermal Shock Resistance Analysis of BNNT/Si₃N₄ Composites. Applied Composite Materials*, 25(2): 415-423.
- Wang, Z. H., Chen, J. Y., Zhou, Q. Y., Wang, X. F., Zhang, Y., He, X. J., and Li, S. Z. 2022b. *Molecular Dynamics Simulation and Mechanical Properties Analysis of Ni-Fe Alloy under Uniaxial Stretching. Integrated Ferroelectrics*, 228(1): 9-16.
- Weinstein, I. A., Vokhmintsev, A. S., Minin, M. G., Kartashov, V. V., and Chernetsky, I. V. 2013. *Spectral and kinetic features of thermoluminescence in hexagonal boron nitride powder after UV-irradiation. Radiation Measurements*, 56: 236-239.
- Weng, Q. H., Wang, X. B., Wang, X., Bando, Y., and Golberg, D. 2016. *Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications. Chemical Society Reviews*, 45(14): 3989-4012.
- Xiao, R. C., Shao, D. F., Lu, W. J., Lv, H. Y., Li, J. Y., and Sun, Y. P. 2016. *Enhanced superconductivity by strain and carrier-doping in borophene: A first principles prediction. Applied Physics Letters*, 109(12).
- Xie, G. C., Zhang, K., Guo, B. D., Liu, Q., Fang, L., and Gong, J. R. 2013. *Graphene-Based Materials for Hydrogen Generation from Light-Driven Water Splitting. Advanced Materials*, 25(28): 3820-3839.

- Xie, H., Wang, J., Xi, T., and Liu, Y. 2002. *Thermal conductivity of suspensions containing nanosized SiC particles. International Journal of Thermophysics*, 23(2): 571-580.
- Xu, L. C., Du, A. J., and Kou, L. Z. 2016. *Hydrogenated borophene as a stable two-dimensional Dirac material with an ultrahigh Fermi velocity. Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(39): 27284-27289.
- Yang, S. K., Cai, W. P., Zeng, H. B., and Xu, X. X. 2009. *Ultra-fine beta-SiC quantum dots fabricated by laser ablation in reactive liquid at room temperature and their violet emission. Journal of Materials Chemistry*, 19(38): 7119-7123.
- Yang, S. K., Cai, W. P., Zhang, H. W., Zeng, H. B., and Lei, Y. 2011. *A General Strategy for Fabricating Unique Carbide Nanostructures with Excitation Wavelength-Dependent Light Emissions. Journal of Physical Chemistry C*, 115(15): 7279-7284.
- Yong Bae, S., Won Seo, H., Park, J., Sang Choi, Y., Chul Park, J., and Young Lee, S. 2003. *Boron nitride nanotubes synthesized in the temperature range 1000–1200 °C. Chemical Physics Letters*, 374(5): 534-541.
- Yu, D. P., Sun, X. S., Lee, C. S., Bello, I., Lee, S. T., Gu, H. D., Leung, K. M., Zhou, G. W., Dong, Z. F., and Zhang, Z. 1998. *Synthesis of boron nitride nanotubes by means of excimer laser ablation at high temperature. Applied Physics Letters*, 72(16): 1966-1968.
- Yu, J., Chen, Y., Elliman, R. G., and Petravic, M. 2006. *Isotopically Enriched 10BN Nanotubes. Advanced Materials*, 18(16): 2157-2160.
- Yu, J., Chen, Y., Wuhrer, R., Liu, Z., and Ringer, S. P. 2005. *In Situ Formation of BN Nanotubes during Nitriding Reactions. Chemistry of Materials*, 17(20): 5172-5176.
- Yu, J. W., Zhou, M., Yang, M. Y., Yang, Q. F., Zhang, Z. X., and Zhang, Y. B. 2020. *High-Performance Borophene/Graphene Heterostructure Anode of Lithium-Ion Batteries Achieved via Controlled Interlayer Spacing. Acs Applied Energy Materials*, 3(12): 11699-11705.
- Zakharko, Y., Rioux, D., Patskovsky, S., Lysenko, V., Marty, O., Bluet, J. M., and Meunier, M. 2011. *Direct synthesis of luminescent SiC quantum dots in water by laser ablation. Physica Status Solidi-Rapid Research Letters*, 5(8): 292-294.
- Zhang, D. B., Akatyeva, E., and Dumitrică, T. 2011. *Helical BN and ZnO nanotubes with intrinsic twisting: An objective molecular dynamics study. Physical Review B*, 84(11): 115431.
- Zhang, J. Z., Han, D. L., Wang, C. C., Lin, W., Zhang, H. W., and Li, S. 2022. *Molecular simulation of shale gas adsorption in type III kerogen organic matter. Petroleum Science and Technology*: 1-11.

- Zhang, L., Becton, M., and Wang, X. 2015. *Mechanical analysis of graphene-based woven nano-fabric*. *Materials Science and Engineering: A*, 620: 367-374.
- Zhang, X. M., Hu, J. P., Cheng, Y. C., Yang, H. Y., Yao, Y. G., and Yang, S. Y. A. 2016. *Borophene as an extremely high capacity electrode material for Li-ion and Na-ion batteries*. *Nanoscale*, 8(33): 15340-15347.
- Zhang, Y., and Huang, H. 2008. *Stability of single-wall silicon carbide nanotubes – molecular dynamics simulations*. *Computational Materials Science*, 43(4): 664-669.
- Zhao, J. H., Stearns, L. C., Harmer, M. P., Chan, H. M., Miller, G. A., and Cook, R. F. 1993. *Mechanical-behavior of alumina silicon-carbide nanocomposites*. *Journal of the American Ceramic Society*, 76(2): 503-510.
- Zhou, Y. P., and Jiang, J. W. 2017. *Molecular dynamics simulations for mechanical properties of borophene: parameterization of valence force field model and Stillinger-Weber potential*. *Scientific Reports*, 7.
- Zimmerman, A. F., Clark, D. G., Aust, K. T., and Erb, U. 2002a. *Pulse electrodeposition of Ni-SiC nanocomposite*. *Materials Letters*, 52(1-2): 85-90.
- Zimmerman, A. F., Palumbo, G., Aust, K. T., and Erb, U. 2002b. *Mechanical properties of nickel silicon carbide nanocomposites*. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 328(1-2): 137-146.

ÖZGEÇMİŞ

KADİR MERCAN

ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Doktora	Akdeniz Üniversitesi
2017-2022	Fen Bilimleri Enstitüsü, İnşaat Mühendisliği A.B.D., Antalya
Yüksek Lisans	Akdeniz Üniversitesi
2014-2017	Fen Bilimleri Enstitüsü, İnşaat Mühendisliği A.B.D., Antalya
Lisans	Süleyman Demirel Üniversitesi
2008-2013	Mühendislik Fakültesi, İnşaat Mühendisliği Bölümü, Isparta

MESLEKİ VE İDARİ GÖREVLER

Araştırma Görevlisi	Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
2013-Devam ediyor	Mühendislik-Mimarlık Fakültesi, İnşaat Mühendisliği Bölümü, Burdur
Araştırma Görevlisi	Akdeniz Üniversitesi
2014-2018	Mühendislik Fakültesi, İnşaat Mühendisliği Bölümü, Antalya

ESERLER

Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler

- 1- Emsen E., Mercan K., Akgöz B., Civalek Ö. (2015). Modal analysis of tapered beam-column embedded in Winkler elastic foundation. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 7(1), 1-11. Doi: 10.24107/ijeas.251238
- 2- Mercan K., Demir Ç., Akgöz B., Civalek Ö. (2015). Coordinate transformation for sector and annular sector shaped graphene sheets on silicone matrix. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 7(2), 56-73. Doi: 10.24107/ijeas.251247
- 3- Mercan K., Demir Ç., Civalek Ö. (2016). Vibration analysis of FG cylindrical shells with power-law index using discrete singular convolution technique. *Curved and Layered Structures*, 3(1). Doi: 10.1515/cls-2016-0007
- 4- Mercan K., Demir Ç., Ersoy H., & Civalek Ö. (2016). The effects of thickness on frequency values for rotating circular shells. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 8(1), 26-37. Doi: 10.24107/ijeas.251257
- 5- Mercan K., Civalek Ö. (2016). Buckling analysis of silicon carbide nanotubes (SiCNTs). *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 8(2), 101-108. Doi: 10.24107/ijeas.252148
- 6- Akgöz B., Mercan K., Demir Ç., Civalek Ö. (2016). Static analysis of beams on elastic foundation by the method of discrete singular convolution. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 8(3), 67-73. Doi: 10.24107/ijeas.255040
- 7- Mercan K. (2016). A comparative buckling analysis of silicon carbide nanotube and boron nitride nanotube. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 8(4), 99-107. Doi: 10.24107/ijeas.281475
- 8- Mercan K., Aydoğdu İ., Civalek Ö. (2016). Discrete singular convolution and differential quadrature method for buckling analysis of laminated composite plates. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 8(4), 66-74. Doi: 10.24107/ijeas.281468
- 9- Mercan K., Civalek Ö. (2016). A Simple Buckling Analysis of Aorta Artery. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 7(4), 34-45. Doi: 10.24107/ijeas.251256
- 10- Mercan K., Civalek Ö. (2016). DSC method for buckling analysis of boron nitride nanotube (BNNT) surrounded by an elastic matrix. *Composite Structures*, 143, 300-309.
- 11- Demir Ç., Mercan K., Civalek Ö. (2016). Determination of critical buckling loads of isotropic, FGM and laminated truncated conical panel. *Composites Part B: Engineering*, 94, 1-10.
- 12- Mercan K., Ersoy H., Civalek, O. (2016). Free vibration of annular plates by discrete singular convolution and differential quadrature methods. *Journal of Applied and Computational Mechanics*, 2(3), 128-133. Doi: 10.22055/JACM.2016.12364

- 13- Numanoglu H. M., Mercan K., Civalek Ö. (2017). Frequency and mode shapes of Au nanowires using the continuous beam models. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 9(1), 55-61. Doi: 10.24107/ijeas.300774
- 14- Mercan K., Akgöz B., Demir C., Civalek Ö. (2017). Frequencies values of orthotropic composite circular and annular plates. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 9(2), 55-65. Doi: 10.24107/ijeas.309060
- 15- Mercan K., Demir Ç., Civalek Ö. (2017). Nano ölçekli plakların serbest titreşimi ve tek katmanlı grafen uygulaması. *Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 19(1), 104-117. Doi: 10.25092/baunfbed.321979
- 16- Mercan K., Civalek Ö. (2017). What is The Correct Mechanical Model of Aorta Artery. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 9(2), 138-146. Doi: 10.24107/ijeas.322526
- 17- Demir Ç., Akgöz B., Erdiñç M. C., Mercan K., Civalek Ö. (2017). Elastik bir ortamdaki grafen tabakanın titreşim hesabı. *Gazi Üniversitesi Mühendislik-Mimarlık Fakültesi Dergisi*, 32(2). Doi: 10.17341/gummfd.61874
- 18- Demir Ç., Mercan K., Ersoy H., Civalek, Ö. (2017). Vibration analysis of graphene sheets using membrane model. *Pamukkale University Journal of Engineering Sciences*, 23(6), 652-658. Doi: 10.5505/pajes.2016.43789
- 19- Mercan K., Civalek Ö. (2017). Comparison of small scale effect theories for buckling analysis of nanobeams. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 9(3), 87-97. Doi: 10.24107/ijeas.340958
- 20- Demir Ç., Ersoy H., Mercan K., Civalek Ö. (2017). Free vibration analysis of annular sector plates via conical shell equations. *Curved and Layered Structures*, 4(1), 146-157. Doi: 10.1515/cls-2017-0011
- 21- Mercan K., Civalek Ö. (2017). Buckling analysis of Silicon carbide nanotubes (SiCNTs) with surface effect and nonlocal elasticity using the method of HDQ. *Composites Part B: Engineering*, 114, 34-45.
- 22- Mercan K., Numanoglu H. M., Akgöz B., Demir Ç., Civalek Ö. (2017). Higher-order continuum theories for buckling response of silicon carbide nanowires (SiCNWs) on elastic matrix. *Archive of Applied Mechanics*, 87(11), 1797-1814.
- 23- Ersoy H., Mercan K., Civalek Ö. (2018). Frequencies of FGM shells and annular plates by the methods of discrete singular convolution and differential quadrature methods. *Composite Structures*, 183, 7-20.
- 24- Mercan K., Baltacıoglu A. K., Civalek Ö. (2018). Free vibration of laminated and FGM/CNT composites annular thick plates with shear deformation by discrete singular convolution method. *Composite Structures*, 186, 139-153.
- 25- Demir C., Mercan K., Numanoglu H. M., Civalek O. (2018). Bending response of nanobeams resting on elastic foundation. *Journal of Applied and Computational Mechanics*, 4(2), 105-114.

- 26- Mercan K., Civalek Ö. (2019). Modal analysis of micro and nanowires using finite element softwares. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 10(4), 291-304. Doi: 10.24107/ijeas.528290
- 27- Mercan K., Civalek Ö. (2019). Geometric Mapping for Non-Rectangular Plates with Micro/Nano or Macro Scaled under Different Effects. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 11(3), 445-454. Doi: 10.24107/ijeas.641211
- 28- Mercan K. (2019). Comparative Stability Analysis of Silicone Carbide Nanotube using MD Simulation and FEM Software. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 11(4), 507-511. Doi: 10.24107/ijeas.655851
- 29- Mercan K., Emsen E., Civalek Ö. (2019). Effect of silicon dioxide substrate on buckling behavior of Zinc Oxide nanotubes via size-dependent continuum theories. *Composite Structures*, 218, 130-141.
- 30- Civalek O., Numanoglu H. M., Mercan K. (2019). Finite element model and size dependent stability analysis of boron nitride and silicon carbide nanowires/nanotubes. *Scientia Iranica*, 26 (4: Special Issue Dedicated to Professor Abolhassan Vafai), 2079-2099. Doi: 10.24200/SCI.2019.52517.2754
- 31- Mercan K., Ebrahimi F., Civalek Ö. (2020). Vibration of angle-ply laminated composite circular and annular plates. *Steel and Composite Structures, An International Journal*, 34(1), 141-154.
- 32- Akbas S. D., Mercan K., Civalek O. (2020). Post-buckling analysis of aorta artery under axial compression loads. *Advances in nano research*, 8(3), 255-264. Doi: 10.12989/anr.2020.8.3.255
- 33- Mercan K. (2020). Size Dependent Buckling Analysis of Hybrid Organic/Inorganic Nano-Sized I-Beam. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 12(4), 153-162. Doi: 10.24107/ijeas.836644
- 34- Mercan K., Civalek Ö. (2021). Comparative Stability Analysis of Boron Nitride Nanotube using MD Simulation and Nonlocal Elasticity Theory. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 13(4), 189-200. Doi: 10.24107/ijeas.1041504
- 35- Mercan K., Civalek Ö. (2022). Critical Buckling Load of SiCNTs: A Molecular Dynamics Study on Gas Sensing. *International Journal of Engineering and Applied Sciences*, 14(1), 40-52. Doi: 0.24107/ijeas.1151308

Ulusal bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında basılan bildiriler

- 1- İnce G., Tekeli H., İnce H. H., Öcal C., Mercan K., Ulutaş H. (2015). Betonarme çerçevelerin düşey bağ kirişli dışmerkez çaprazlarla güçlendirilmesi. In *International Burdur Earthquake & Environment Symposium (IBEES2015) Uluslararası Burdur Deprem ve Çevre Sempozyumu. (Tam Bildiri)*

- 2- Mercan K., Civalek Ö., Demir Ç., Akgöz B. (2016, July). Buckling of boron nitride nanotubes surrounded by an elastic matrix. In International Conference on Mechanics of Composites, pp. 11-14. (Tam Bildiri)
- 3- Mercan K., Civalek Ö., (2016). Comparison of higher-order shear deformation theories on static analysis of rectangular plates. International Conference on Composite Structures
- 4- Mercan K., Akgöz B., Demir Ç., Civalek Ö. (2018). Investigating the Effect of Silicon Dioxide Substrate on Nanowires/Nanotubes Buckling. 4th International Conference on Mechanics of Composites
- 5- Ersoy H., Mercan K., Civalek Ö. (2018). Free vibration analysis of FGM composite and laminated skew plates with shear-deformation theory by discrete singular convolution technique. 21th International Conference on Composite Structures
- 6- Baltacıoğlu A. K., Mercan K., Civalek Ö. (2018). Free vibration of circular panel with CNT and FGM composite material. 21th International Conference on Composite Structures
- 7- Civalek Ö., Ersoy H., Mercan K. (2019). Large deflection analysis of carbon nanotubes (CNTs) reinforced composite plates using the differential quadrature methods. 5th International Conference on Mechanics of Composites
- 8- Civalek Ö., Akgöz B., Mercan K. (2019). Free vibration of laminated doubly curved shells via different numerical approaches. 5th International Conference on Mechanics of Composites
- 9- Civalek Ö., Mercan K., Hooman A. (2020). Analysis of carbon and graphene nanoplatelets porous doubly-curved nano shells using the nonlocal elasticity theory. ICCS23-23rd International Conference on Composite Structures; MECHCOMP6 - 6th International Conference on Mechanics of Composites.
- 10- Civalek Ö., Mercan K., Ersoy H. (2020). Free Vibration Analysis of CNT Reinforced Plates with Non-Rectangular Shapes. ICCS23-23rd International Conference on Composite Structures; MECHCOMP6 - 6th International Conference on Mechanics of Composites.
- 11- Mohammed A., Mercan K., Civalek Ö. (2021). Graphene Nanoplatelet (GNPL) Reinforced Cylindrical Shell. 7th International Conference on Mechanics of Composites
- 12- Civalek Ö., Ersoy H., Mercan K. (2021). Static analysis of isotropic and orthotropic composite triangular plates by geometric transformation method. 7th International Conference on Mechanics of Composites