T. C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOTÜPLERİN ÇÖKME DAVRANIŞLARININ SÜREKLİ ORTAM KİRİŞ MODELLERİ KULLANILARAK İNCELENMESİ

Seçil SEÇGİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Yöneticisi: Doç. Dr. Metin AYDOĞDU
Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı

EDİRNE-2010

T. C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOTÜPLERİN ÇÖKME DAVRANIŞLARININ SÜREKLİ ORTAM KİRİŞ MODELLERİ KULLANILARAK İNCELENMESİ

Seçil SEÇGİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI
TEZ DANIŞMANI: Doç. Dr. Metin AYDOĞDU

2010
EDİRNE

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KARBON NANOTÜPLERİN ÇÖKME DAVRANIŞLARININ SÜREKLİ ORTAM KİRİŞ MODELLERİ KULLANILARAK İNCELENMESİ

Seçil SEÇGİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MAKİNA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

Bu tez 11/10/2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Doç.Dr. Metin AYDOĞDU	Yrd.Doç.Dr.Vedat TAŞKIN	Yrd.Doç.Dr.Bahar UYMAZ
Danışman Jüri Üyesi	Jüri Üyesi	Jüri Üyesi

İÇİNDEKİLER

Önsöz i
Özet ii
Abstract iii
Şekil Listesi iv
Çizelge Listesi vi
Simgeler Dizini vii

BÖLÜM 1. GİRİŞ

1.1. Problem ve Önemi 1
1.2. Önceki Çalışmalar 2
1.3. Çalışmanın Amacı ve Kapsamı 3

BÖLÜM 2. NANOTEKNOLOJİ VE NANOYAPILAR

2.1. Giriş 4
2.2. Nanoteknoloji 4
2.3. Karbon Nanoyapılar 7
2.3.1 Karbon nanotoplar 8
2.3.2. Karbon nanotüpler 9
2.3.2.1. Karbon nanotüplerin üretim yöntemleri 11
2.3.2.2. Karbon nanotüplerin çeşitleri 14
2.3.3. Karbon nanoçubuklar 17
2.3.4. Karbon nanohalkalar 18

BÖLÜM 3. KARBON NANOTÜPLERİN ÇÖKMESİ VE KİRİŞ MODELLERİ

3.1. Giriş 19
3.2. N Duvarlı Karbon Nanotüpler İçin Çökme Denklemleri 19
3.3. Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Çökme Analizi 21
3.4. Sonlu Farklar Yöntemi 23

BÖLÜM 4. ÇİFT DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN STATİK ANALİZİ

4.1. Giriş 26
4.2. Çift Duvarlı Karbon Nanotüpler 26
4.3. Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Navier Tipi Yöntemle Çökme Analizi 27
4.4. Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sonlu Farklar Yöntemiyle Çökme Analizi 28
4.4.1. Uçları basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün 4 parça için çökme analizi 29
4.4.2. Uçları basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün 12 parça için çökme analizi 33
4.4.3. Uçları ankastre destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün 4 parça için çökme analizi 35
4.4.4. Uçları ankastre olan çift duvarlı karbon nanotüp'ün 12 parça için çökme analizi 37
4.5. Sayısal Sonuçlar ve Yorum 39
4.5.1. İç tüp ve dış tüpün değişik sınır şartlarındaki sayısal sonuçları 40

BÖLÜM 5. SONUÇLAR 49
KAYNAKLAR 50
ÖZGEÇMİŞ 52

ÖNSÖZ

Çalışmalarımda, sonsuz bir sabırla birikimini benimle paylaşan, her zaman güler yüzüyle desteğini benden hiç esirgemeyen, sayın hocam Doç. Dr. Metin AYDOĞDU'ya tüm yardımları için teşekkürlerimi sunuyorum.

Bu çalışmayı hazırlamamda çok büyük emeği olan sevgili arkadaşım Seçkin FİLİZ'e sonsuz teşekkürler ediyorum.

Manevi destekleriyle bana güç veren sevgili arkadaşlarım Pınar KARAOĞLU'na, Araş. Gör. Tolga AKSENCER'e ve Araş. Gör. Erhan AKYOL'a teşekkür ederim.

Maddi, manevi desteklerini benden bir an olsun esirgemeyen, emeklerini hiçbir zaman ödeyemeyeceğim, ailem; babam, annem, kardeşim ve nişanlım Ahmet CANAY'a ne kadar teşekkür etsem azdır.

ÖZET

Bu çalışmada çok duvarlı karbon nanotüplerin çökme davranışları sürekli ortam kiriş modelleri kullanılarak incelenmektedir. Klasik Euler-Bernoulli kiriş teorisi N-duvarlı karbon nanotüplerin çökmesi için formüle edilmiştir. Tek duvarlı karbon nanotüplerin düşey doğrultudaki yükler etkisinde çökmesi analitik olarak incelenmiştir. Basit destekli çok duvarlı tüplerin çökmesi Navier tipi çözüm yöntemiyle incelenmiştir. Genel sınır şartlarındaki çok duvarlı karbon nanotüpler için bir Sonlu Farklar formülasyonu geliştirilmiştir. Genel formülasyon kullanılarak farklı sınır şartları ve geometrik parametreler için tek ve iki duvarlı karbon nanotüplerin çökme davranışı incelenmiştir.

Anahtar Sözcükler: Çift Duvarlı Karbon Nanotüpler, Euler-Bernoulli Kiriş Modeli, Karbon Nanotüpler, Sonlu Farklar Yöntemi.

ABSTRACT

In this study, bending of multi-walled carbon nanotubes is studied using continuum beam models. Classical Euler-Bernoulli beam theory is formulated for bending of N-walled Carbon Nanotubes. The bending of singlewalled Carbon Nanotubes is investigated analytically. Navier type solution method is used for the bending of multiwalled simply supported Carbon nanotubes. A Finite Difference method is developed for the multiwalled Carbon Nanotubes with general boundary conditions. After general formulation, the bending of single and double-walled Carbon Nanotubes with different boundary conditions is investigated parametrically.

Keywords: Double Walled Carbon Nanotubes, Euler-Bernoulli Beam Theory, Carbon Nanotubes, Finite Differences Method.

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1. Fulleren molekülü 7

Şekil 2.2. Grafin tabakası 9

Şekil 2.3. Karbon nanotüp 9

Şekil 2.4. Tek duvarlı ve çok duvarlı karbon nanotüpler 14

Şekil 2.5. Tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik modellerinin oluşumu 15

Şekil 2.6. Tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik modelleri 15

Şekil 2.7. Çok duvarlı karbon nanotüp modelleri 17

Şekil 2.8. Nanoçubuk modeli 17

Şekil 2.9. Nanotüp halka görüntüsü 18

Şekil3.1 Çok duvarlı karbon nanotüplerin sürekli ortamdaki temsili şekli..... 20

Şekil 3.2. Yayılı yüklü bir karbon nanotüp..... 21

Şekil 3.3. Sonlu farklar yönteminde tanımlanan bir v=f(x) fonksiyonu 23

Şekil 3.4. Sınır şartlarının şematik gösterimi 25

Şekil 4.1. Çift duvarlı karbon nanotüpün şematik gösterimi..... 26

Şekil 4.2. 4 Parçaya ayrılmış her bir ucu basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün şematik gösterimi. 29

Şekil 4.3. 4 Parçaya ayrılmış iki nanotüpün etkileşiminin şematik gösterimi 29

Şekil 4.4. 4 Parçaya ayrılmış içteki nanotüpün şematik gösterimi 30

Şekil 4.5. İç tüpün 4 parçaya ayrılmış basit destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü 30

Şekil 4.6. Dış tüpün 4 parçaya ayrılmış basit destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü. 31

Şekil 4.7. İç tüpün 4 parçaya ayrılmış ankastre destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü....35

Şekil 4.8. Çift duvarlı bir karbon nanotüpün kesit geometrisi 39

Şekil 4.9. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Basit, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....45

Şekil 4.10. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....45

Şekil 4.11. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Basit, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....45

Şekil 4.12. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....46

Şekil 4.13. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Basit, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....46

Şekil 4.14. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Basit, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....46

Şekil 4.15. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Basit, dış tüp Ankastre-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....47

Şekil 4.16. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Ankastre, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....47

Şekil 4.17. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Ankastre-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....47

Şekil 4.18. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....48

Şekil 4.19. 12 Parçalı, iç tüp Ankastre-Basit, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği....48

ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge 2.1. Farklı (n,m) değerlerinde tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik özellikleri 16

Çizelge 3.1. Sonlu Farklar yöntemiyle sınır koşulları 25

Çizelge 4.1. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Basit-Basit destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 40

Çizelge 4.2. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Ankastre-Ankastre destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 40

Çizelge 4.3. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Ankastre-Ankastre destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 41

Çizelge 4.4. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Basit-Basit destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 41

Çizelge 4.5. İç Tüp Ankastre-Basit, Dış Tüp Basit-Ankastre destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 42

Çizelge 4.6. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Ankastre-Basit destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 42

Çizelge 4.7. İç Tüp Basit-Ankastre, Dış Tüp Basit-Basit destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 43

Çizelge 4.8. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Basit-Ankastre destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 43

Çizelge 4.9. İç Tüp Ankastre-Basit, Dış Tüp Ankastre-Ankastre destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi 44

SİMGELER DİZİNİ

E	Elastisite Modülü
I	Atalet Momenti
w	Boyutsuz Çökme
q(x)	Kirişin taşıdığı yayılı yük
L	Kirişin boyu
v	x'e bağlı değişen bir fonksiyon
$\frac{dv}{dx}$	x'e göre türev
h	Adım uzunluğu
ε	Lineer genleme

c	Van der Waals kuvvetleri
w_{ij}	i:1 iken iç tüp, i:2 iken dış tüp j: düğüm noktası
a, b, c, d	Doğrusal(Lineer) fonksiyonun katsayıları
R_i	Karbon nanotüpün yarıçapları (i: 1, 2, 3, 4)
C_j (j:1,2,3,4)	Çubukta belirsiz katsayılar
Δ	İleri fark
∇	Geri fark
n	Parça sayısı
x	Boyuna Kartezyen eksen bileşeni

Kısaltmalar

A-A	Ankastre-Ankastre mesnet
A-B	Ankastre-Basit Destekli mesnet
B-A	Basit destekli-Ankastre mesnet
B-B	Basit Destekli-Basit Destekli mesnet
ÇDKNT	Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
KNT	Karbon Nanotüp
TDKNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Tezin bu bölümü, üç kısımdan oluşmaktadır. Kısım 1'de tezde incelenen problem ve önemi açıklanmakta, Kısım 2'de konu ile ilgili daha önce yapılmış çalışmalar özetlenmektedir. Kısım 3'te çalışmanın amacı ve kapsamı üzerinde durulmaktadır.

1.1.Problem ve Önemi

Bu çalışmada çok duvarlı karbon nanotüplerin (ÇDKNT), çökme davranışı sürekli ortam kiriş modellerinden Euler-Bernoulli Kiriş Teorisi kullanılarak incelenecektir. Öncelikle N duvarlı karbon nanotüp (KNT) için yönetici denklemler elde edildikten sonra tek ve çift duvarlı KNT'ler için analitik çözümün mümkün olduğu durumlarda analitik çözüm kullanılacak aksi halde genel sınır şartları için Sonlu Farklar Yöntemi kullanılacaktır.

KNT'lerin çökme davranışının çalışılması KNT'lerin mekanik özelliklerinin belirlenmesinde (Elastisite modülü gibi), osilatör ve algılayıcı gibi çeşitli elektro mekanik sistemlerin modellenmesinde kullanımları açısından önem arz etmektedir. Ayrıca KNT'ler kompozit malzemelerde katkı elemanı olarak kullanılmaktadır.

1.2. Önceki Çalışmalar

KNT' lerin keşfedilmesinin ardından, Iijima, 1991, bu konuda yapılan çalışmalar gün geçtikçe artmıştır. KNT'lerin üretimi, yapısı, mekanik ve elektronik özellikleri ve kullanım alanları bazı tarama makalelerinde belirtilmiştir(Thostenson ve ark., 2001, Delmotte ve ark., 2002, Belin ve ark., 2005).

Falvo ve arkadaşları, 1997, ÇDKNT'lerin atomik kuvvet mikroskobu ucu kullanılarak hasara uğramadan çok büyük oranlarda çökebildiğini göstermişlerdir.

Eric Wong ve arkadaşları, 1997, atomik kuvvet mikroskobunu kullanarak silikon karbit nano çubukların ve ÇDKNT'lerin mekanik özelliklerini belirlemişlerdir. Yapılan ölçümler sonucunda, çok duvarlı tüplerin silikon karbit nanoçubukların 2 katı rijitliğe sahip olduğu sonucuna varılmıştır. Çökmenin devam ettirilmesi sonucunda silikon karbit nanoçubukların kırıldığı, buna karşılık ÇDKNT'lerin enteresan bir elastik burkulma gösterdikleri gözlenmiştir.

Harik, 2001, sürekli ortam kiriş modellerinin KNT'lerin burkulmasının modellenmesinde hangi şartlar altında kullanılabileceğini araştırmıştır.

Bu şartlar;

1. Homojenleştirme kriteri; $L/a_1 > 10$
2. Boyut oranı; $L/d < 1/10$
3. Lineer genleme kriteri; $\varepsilon << 1$

şeklinde ifade edilmiştir.

Nano kirişlerin çökme davranışları Wang ve Liew, 2007, tarafından yerel olmayan elastisite teorisi kullanılarak incelenmiştir. Çökmede basma gerilmesi olan kısımda yerel burkulma sebebiyle elastisite modülündeki azalma deneysel ve teorik olarak incelenmiştir XY Wang, 2004.

Çökme burkulması problemi Li ve Chou, 2004, tarafından incelenmiştir. KNT' lerin çökmesi moleküler dinamik ve yapısal mekanik kullanılarak Munteanu tarafından incelenmiştir.

KNT' lerin titreşim ve burkulma davranışları ile ilgili çalışmalar çökme davranışları ile ilgili çalışmalarla kıyaslandığında çok fazladır. Literatür incelendiğinde KNT' lerin çökme davranışının yeterince incelenmediği görülmektedir.

Bu çalışmanın temel amacı literatürdeki bu boşluğu doldurmaktır.

1.3. Çalışmanın Amacı ve Kapsamı

Son yıllarda nanoteknoloji alanında ve özellikle KNT' ler konusunda yapılan çalışmalar gün geçtikçe artmaktadır. KNT' lerin burkulma ve titreşim problemleri ile ilgili sürekli ortam ve moleküler dinamik modelleme ile ilgili pek çok çalışma olmasına rağmen sürekli ortam modelleri ile KNT' lerin çökmesi ile ilgili çalışmalar sınırlıdır. Bu çalışmanın amacı, bu boşluğu doldurmak amacıyla sürekli ortam kiriş modelleri ile KNT' lerin çökme davranışlarını incelemektir.

Çalışmanın içeriği yukarıda belirlenen amaca ulaşmak maksadıyla aşağıdaki gibi düzenlenmiştir.

Öncelikle KNT' ler arası Van der Waals kuvvetleri dikkate alınarak n duvarlı tüpler için çökme denklemleri elde edilmiştir. Ardından, tek ve çok duvarlı tüplerin çökme davranışı farklı sınır şartları için incelenmiştir. Sonuçlar tablo ve grafikler halinde elde edilerek yorumlanmıştır. Bu çözümler sırasında basit destekli KNT' ler için analitik Navier tipi çözüm yöntemi kullanılmış, analitik çözümü mümkün olmayan genel sınır şartları için Sonlu farklar yönteminden yararlanılmıştır.

BÖLÜM 2

NANOTEKNOLOJİ VE KARBON NANOYAPILAR

2.1. Giriş

Tezin bu bölümünde, teknolojiyi nano boyuta taşıyan nanoteknoloji ve bu teknolojide geniş bir uygulama alanı bulan karbon nano yapılar tanımlanmaktadır. Teknolojinin neden nano boyuta inmeye ihtiyaç duyduğu ve bunun ne gibi getirilerinin olabileceği açıklanmaya çalışılmıştır. Nanoteknolojinin tarihsel gelişimi, bu gelişime katkı sağlayan bilimsel atılımlar sırası ile burada verilmiştir.

Karbon elementinin nanoteknolojideki önemi açıklanarak karbon nanoyapılar ayrı ayrı incelenmiştir. Bu yapılar arasında en büyük ilgiyi gören karbon nanotüpler, kullanım alanları, üretim yöntemleri ve çeşitleri ile birlikte açıklanmıştır.

2.2. Nanoteknoloji

Nano; teknik bir ölçü birimi olarak kullanılır ve herhangi bir birimin milyarda biri anlamını taşır. Genellikle metre ile birlikte kullanılır. Nanometre; 1 metrenin milyarda biri ölçüsünde bir uzunluğu temsil eder. Nanoteknoloji de nano boyuttaki parçacıklarla çalışan, atomların ve moleküllerin işlev ve özelliklerine göre istenildiği gibi

dizilimlerini gerçekleştirerek nano boyutta malzemeler üreten bir teknolojidir. Nano boyuta inildiğinde fiziksel, kimyasal, biyolojik özellikleri değişen malzeme ve sistemlerle ilgilenir. Artık günümüzde de daha küçük boyutlara inmeye, daha az yer kaplayan, daha az enerji harcayan ve daha hızlı çalışabilen aygıtlara ihtiyaç vardır. Bu ihtiyaçlar doğrultusunda yapılan çalışmalarla bir aygıtta kullanılan malzemenin boyutu küçüldükçe çalışma hızının arttığı ve malzemenin yeni özelliklerinin ortaya çıktığı tespit edilmiştir. Malzemeyi oluşturan atom sayısı 100'ler mertebesine inmeye başladığında atomsal yapının geometrisi hatta atom sayısının kendisi bile fiziksel özelliklerin belirlenmesinde etken olmaktadır. Bu doğrultuda nano boyutta yapılan çalışmalarda; iletkenlik özelliği gösteren bir nano yapıya tek bir atom eklendiğinde iletkenlik özelliğinin değiştiği, atomlar arası bağ yapısında değişimler gözlendiği, mekanik olarak malzeme kuvvetlenirken ya da zayıflarken elektronik olarak özelliklerinin tümüyle değişebildiği fark edilmiştir. Ortaya çıkan bu sonuçlarla da nanoteknoloji, her bilim dalının ilgi odağı haline gelmektedir.

Nanoteknolojinin tarihsel gelişimini inceleyecek olursak;

1) Nano boyutun çok farklı sonuçlar doğurabileceğine ilk olarak 1965 yılında kuantum elektrodinamiği alanında yapmış olduğu çalışmalarla Nobel Ödülü almış Richard Feynman değinmiştir. Ünlü fizikçi 1959'da bir konferansında eğer atom ve molekül boyutlarında imalat yapılabilirse birçok yeni keşiflerin olabileceğini söylemiş ve ilk olarak nano ölçekte özel ölçme ve üretim yöntemlerinin geliştirilmesi gerektiğini belirtmesi ile nanobilim ve nanoteknoloji için başlangıcı oluşturmuştur.

Feynman'ın 1959'da tarihsel önem taşıyan bir başlangıç yaptığı bu konferansında özetle şunları öngörmüştür; küçük ölçekte bilgi, daha iyi elektron mikroskobu, fevkalade biyolojik yapılar, bilgisayarları minyatürleştirme ve atomları istenildiği gibi yeniden organize edebilme. Ayrıca Feynman küçük boyutlarda, yer çekimi gibi kanunların öneminin azalacağına, van der Waals gibi mikro düzeyde zayıf kuvvetlerin daha önemli hale geleceğine dikkat çekmiştir.

2) Nanoteknoloji terimi ise ilk kez Norio Taniguchi tarafından " Temel Nanoteknoloji Konseptleri " adlı makalede kullanılmıştır. Norio Taniguchi bu makalede nanoteknoljiyi şöyle tanımlamıştır; Atom ya da molekül ayırma, birleştirme, bozma sürecine nanoteknoloji denir.

3) 1980 lerde K. Evin Drexler molekülleri rassal yöntemler yerine deterministik olarak işlemeyi detaylı bir şekilde incelemiştir. 1981'de de ilk nanoteknoloji makalesini yayınlamıştır.

4) Yine 1981'de Gerd Binnig ve Gerhard Rohrer taramalı tünelleme mikroskobunu üretmişlerdir. Bu mikroskop ile atomların yerlerinin istenildiği gibi değiştirilmesi mümkün olmuştur. Bu buluşlarından dolayı da 4 yıl sonra Nobel Ödülü almışlardır.

5) 1985'te Robert Curl, Harold Kroto ve Richard Smalley fulleren sınıfından olan ve ismine futbol topunu andırdığı için buckyball dedikleri molekülü sentezlemişlerdir. Bu üç bilim adamı da 1996 yılında kimya dalında Nobel Ödülü almışlardır.

6) 1986'da Binnig, Quate ve Gerber atomik kuvvet mikroskobunu bulmuşlardır. Daha önce de bulunan taramalı tünelleme mikroskobu ile birlikte nanoteknolojinin gelişimi için çok önemli buluşlar gerçekleşmiştir.

7) Yine 1986'da moleküler üretim bilincini arttırmak amacı ile Eric Drexler tarafından ilk nanoteknoloji organizasyonu olan Foresight kurulmuştur. Bu, kar amacı gütmeyen bir organizasyondur.

8) 1988'de bahar döneminde üniversitede Eric Drexler tarafından ilk nanoteknoloji dersi verilmiştir.

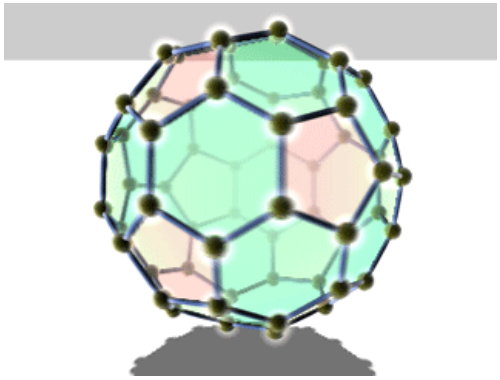
9) 1989'da IBM bilim adamı Don Eigler nikel yüzeye ksenon atomları ile IBM yazısını yazmıştır.

10) 1991'de Japon bilimi adamı Sumio Iijima, nanoteknoloji uygulamaları arasında en büyük öneme sahip olan karbon nanotüpü bulmuştur. Aslında KNT'lerin ilk keşifleri ile ilgili farklı bir iddia daha söz konusudur. Radushkevich ve Lukyanovich isimli iki Rus bilim adamı 1952'de Sovyet Journal of Physical Chemistry dergisinde 50 tane nanotüpün resmini yayınlarlar. Makale Rusça olduğu için ve yayınlanması soğuk savaş zamanına denk geldiği için diğer bilim adamları tarafından fark edilmez. Bu iddiaya rağmen nanotüplerin keşifleri, Sumio Iijima adı ile bilinmektedir.

11) 1996'da Rice Üniversitesi Araştırma Grubu, Sumio Iijima'nın kullandığı ark buharlaştırma tekniğinden farklı olarak lazer buharlaştırma tekniğini geliştirmişlerdir.

Nanoteknolojinin doğuşundan itibaren bu alanda çalışan tüm bilim adamlarının ilgilerinin yoğunlaştığı element karbon olmuştur. Karbon elementinin organik yapılardaki vazgeçilmezliği bu elementin nanoteknoloji uygulamalarında da önemli bir

yere sahip olabileceğini düşündürmüştür. İlk olarak 60 tane karbon atomunun, futbol topu şeklinde bir kafes yapısı halini alarak oluşturduğu fulleren molekülünün 1985 yılında deneysel olarak ilk defa elde edilmesi nanobilimin kapılarını aralamıştır.



Şekil 2.1. Fulleren molekülü

Karbon atomlarından oluşan malzemeler, karbon atomlarının kendi aralarındaki bağlanma geometrisine göre çok farklı fiziksel ve kimyasal özellikler gösterir. Karbonun bu özelliğinin sebebi, sahip olduğu 6 elektronudur. Karbon, 6 elektronu ile periyodik tabloda IV. grup elementlerinin ilk elemanıdır. Karbonun bu elektronlarından ilk ikisinin bağlanmaya hiç etkisinin olmaması, ilk iki elektron ile diğer elektronların enerjileri arasındaki farkın da büyük olması karbonun farklı yapılar oluşturabilmesini sağlamaktadır. Karbonun sahip olduğu bu özellikleri, nanoteknoloji uygulamaları için de onu öncelikli kılmıştır.

2.3. Karbon Nanoyapılar

Nanoteknoloji uygulamalarında, daha önce bahsettiğimiz gibi karbon öncü element olduğundan geliştirilen yapılar da karbon bazlı yapılar olmuştur. Farklı elementler üzerine çalışmalar yapılmışsa da öncelik halen karbon nanoyapılar üzerinedir.

2.3.1. Karbon Nanotoplar

Karbon topları, 20 ile 130 arasında karbon atomu içerebilirler. Bunlar grafinin buharlaştırılması sırasında oluşurlar. İçlerinde yapısı ve özellikleri en iyi bilineni ve en sağlamı C_{60} dır. Karbon nanotoplar beşgen ve altıgen şeklinde yapılardan oluşur. Genel olarak tümüne Fulleren ismi verilir. Karbon nanotoplar arasına başka atomlar yerleştirerek katkılandırılmış farklı özelliklerde yeni malzemeler, özellikle de süperiletken malzemeler yapmak mümkündür.

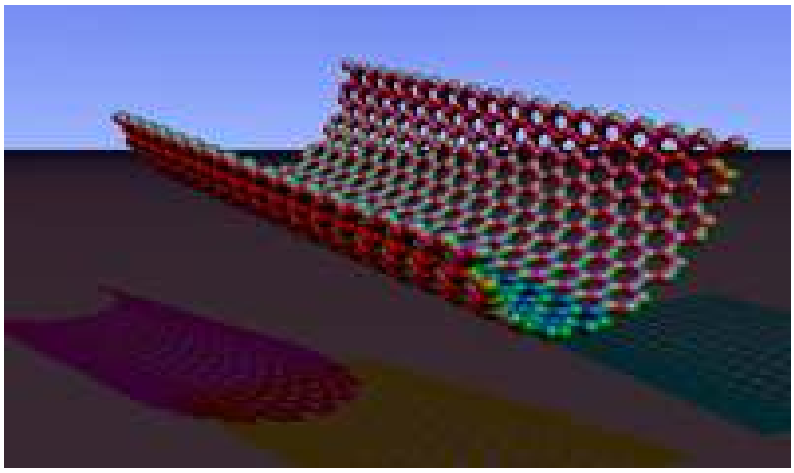
Karbon nanotoplar;

- kristal yüzeylerine yerleştirildiklerinde yüzeyin optik ve elektronik özelliklerini değiştirebilmek,
- yüzey kaplamalarında malzemeleri aşırı ışıktan korumada optik sınırlayıcı olmak,
- iki yüzey arasında zıplayarak hareket edebilme özellikleri ile nanotransistör yapımında kullanılmak,
- oksitlenmeye karşı iyi bir koruyucu olmak,
- hidrojen depolamada ve yüksek enerjili pil üretiminde kullanılmak,
- herhangi iki malzeme arasında sürtünmeyi azaltıcı olarak görev yapabilmek gibi özelliklere sahiptirler.

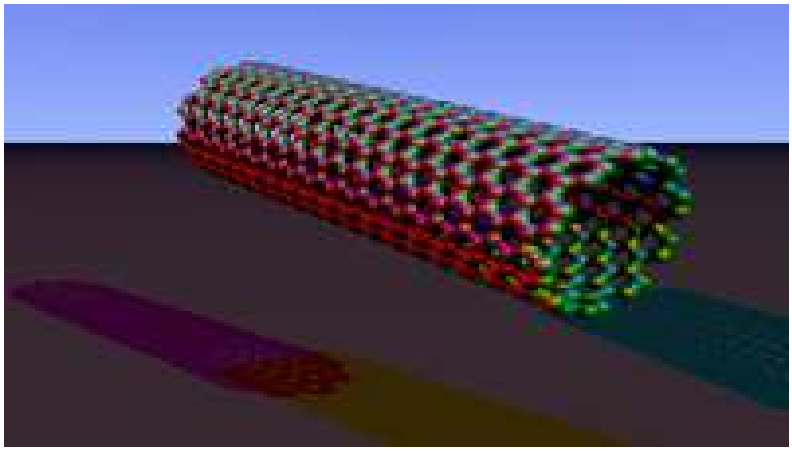
Ayrıca suda çözülebilen karbon nanotopu türevlerinden oluşturulan bir maddenin HIV virüsünün faaliyetini sınırladığı son yıllarda yapılan çalışmalar ile tespit edilmiştir.

2.3.2. Karbon Nanotüpler

Tek sıra karbon atomundan oluşturulan bir grafin katmanının silindir şeklinde bükülerek, uçlarının birleştirilmesi ile oluşturulan yapılardır. Silindir şeklinde bir karbon allotropudur. İsminden de anlaşılacağı gibi sadece karbon atomu içerir.



Şekil 2.2. Grafin tabakası



Şekil 2.3. Karbon nanotüp

Karbon nanotüpler;

- Silindirik grafin tabakasının kıvrılma yönüne, tüpün çapına ve geometrisine göre farklı özellik göstermektedirler. Yarıiletken ya da istenildiğinde iletken özellik sergileyebilirler. Tüpün elektronik özellikleri herhangi bir katkı maddesi olmadan sadece tüpün geometrik şekli ile ayarlanabilir.
- Bağ tipi polar değildir. Bu sayede suda çözünmezler.
- Vakumda 1500, açık havada 750 dereceye kadar kararlı halde durabilirler.
- Isıl iletkenlikleri elmasın iki katıdır.
- Bükülebilirler ve halka haline getirilebilirler.
- Düğüm atılabilecek kadar esnektirler.
- Çelikten 100 kat daha güçlü ve 6 kat daha hafiftirler. Bir kurşun kalemin yarısı kadar genişliğe sahip bir karbon nanotüp 40000 kg'dan daha fazla yük taşıyabilir. Küçük çaplı (yaklaşık 1-2 nm) tüplerden oluşturulmuş bir demeti koparabilmek için uygulanan çekme kuvvetinin büyüklüğü yaklaşık 36 GPa'dır. Buradan da nanotüplerin gerilmeye karşı en sağlam malzeme özelliği taşıdığı görülmektedir.
- Yüksek erime sıcaklığına sahiptirler.
- Elektrik iletim kapasiteleri, bakırın sahip olduğu kapasitenin 1000 katıdır.
- Hidrojen depolamaya imkan sağlayan geniş yüzey alanlarına sahiptirler. Bu geniş yüzey alanına sahip olma özellikleri ile su, hava ve diğer malzemeleri temizlemede kullanılan filtrelerde de yer alabilirler.
- İnsan sağlığı açısından uygunlukları kanıtlandığı taktirde dış yüzeylerinin fonksiyonlaştırılması sonucu tıbbi uygulamalarda ilaç taşıyıcı olarak görev alabilirler.
- Elektronik malzeme olarak manyetik ve optik nanoaygıt yapımında, hafıza elemanı, kapasitör, transistör, diyot, mantık devresi elemanı olarak kullanım alanlarına sahiptirler.
- Nanoteknoloji uygulamalarında diğer tüm nanoyapılardan daha fazla ilgi gören yapılardır.

2.3.2.1. Karbon nanotüplerin üretim yöntemleri

KNT'ler farklı çap ve boyda, uçları açık ya da kapalı olarak üretilebilirler. Üretim yöntemleri; ark buharlaştırma, lazer buharlaştırma, mekanik öğütme ve kimyasal buhar püskürtmesi olarak sıralanabilir.

1. Ark buharlaştırma

Bu yöntem, helyum ve argon atmosferinde iki elektrodun arasına elektrik akımı uygulamaya dayanır. Nanotüp sentezi için difüzyon pompalı bir vakum hattına ve bir helyum kaynağına bağlı olan paslanmaz çelikten bir vakum odası kullanılır. Elektrotlar yüksek saflıkta iki grafin çubuktan oluşur. Anot 6 mm çapında ve uzun, katot ise çok daha kısa ve 9 mm çapındadır. Akım genellikle 50-100 A kadardır. Arklama sırasında elektrotlar birbirinden ayrı tutulmaktadır. 5000 ˚C'de grafinler buharlaşır. Anottan buharlaşan karbonun bir kısmı, katotta silindirik olarak tekrar buharlaşır. Bu silindirik tortunun merkezinde nanotüpler ve nano parçacıklar vardır. Odadaki helyum basıncı arttıkça nanotüp sayısı da önemli ölçüde artar. Nanotüplerin oluşumunda kobalt-nikel katalizörü kullanılabilir.

2. Lazer buharlaştırma

1200 ˚C'de argon akışında kobalt ve nikel tozlarının yarı yarıya karışımlarından oluşan grafin çubuklarının, lazer depolaması işlemi sırasında elde edilen ürünleri fullerenleri temizlemek için 1000 ˚C'de ısıl işlemi izlerler. Hareketsiz lazer pulsu, ikinci bir puls hedefi buharlaştırmak için izler. İki tane birbirini izleyen lazer pulsu kullanmak, karbon kiri birikintisini azaltır. İkinci lazer pulsu ilkinden gelen daha büyük parçacıkları durdurur ve onları büyüyen nanotüp yapısına ekler. Bu şekilde üretilen malzeme; çapı 10-20 nm'den 100 μm'ye varan hatta daha uzun olabilen ip demetleri halinde görülmektedir. Her ip nanotüp yapısı oluşturmaya katkıda bulunur.

3. Mekanik Öğütme

Mekanik öğütme ve ardışık tavlama nanotüp üretimi için basit yöntemlerdir. Mekanik öğütme işlemi oda sıcaklığında 150 saate kadar sürmektedir. Öğütmeyi takiben elde edilen toz, 1400 ˚C'de 6 saatlik nitrojen ya da argon gazı akışı altında tavlanır. Bu oluşumun mekanizması tam olarak bilinmemekle birlikte mekanik öğütmenin nanotüp çekirdeğini oluşturduğu, tavlama işleminin nanotüp büyümesini hızlandırdığı düşünülmektedir.

4. Kimyasal Buhar Püskürtmesi

Bu metot, çeşitli materyallerin ince filmlerini oluşturmak için kullanılan bir kimyasal prosestir. Tipik bir kimyasal buhar püskürtmesi prosesinde, istenen depolanmış materyali üretmek için malzeme yüzeyi üzerinde reaksiyon oluşturan ve/veya parçalanan öncü maddeler oluşur. Bunlar reaksiyonun gerçekleştirildiği ortam içinde gaz akışı ile taşınırlar. Nanotüp üretiminde bu metot kullanılarak 50 μ kalınlığında bir film oluşturulmuştur. Bu metot yüzey üzerinde büyüme doğrultusunu kontrol edebilmeye de imkan tanır.

Bu proseste hidrokarbon gaz karışımı, asetilen, metan veya etilen ve nitrojen reaksiyon odasına gönderilir. Bu reaksiyon sırasında nanotüpler bir malzeme üzerinde oluşturulurlar. Hidrokarbonun 700-900 ˚C'de atmosferik basınçta parçalanması ile nanotüpler oluşur. Bu proseste nanotüpler daha düşük sıcaklıkta oluşturulabilmektedirler. Bu daha düşük kaliteye neden olabilir. Aynı zamanda proseste kullanılan katalizörler ki bunlar metal nanopartiküllerdir malzeme üzerinde toplanır. Bu durum da daha farklı yapıların oluşumuna da imkan sağlar. Elde edilen nanotüpün çapı, katalizör madde boyutuna bağlıdır. Doğan ve arkadaşları, 2005, yaptıkları çalışmalarda gözenekli silikon kullanıldığı taktirde nanotüplerin daha yüksek oranlarda (uzunluk/dakika) büyüdüklerini, nanotüplerin malzeme yüzeyine dik olarak katalizör-yüzey etkileşiminden ve Van der Waals kuvvetlerinden dolayı birbirlerine daha paralel bir şekilde uzandıklarını ve malzemedeki gözeneklerin düzenli, nanotüplerin de düzgün bir şekilde büyümesi için oldukça küçük olması gerektiğini kanıtlamışlardır.

Halen hem düşük maliyetli hem de fazla miktarda nanotüp üretmeye imkan sağlayan metotlar olmasa da var olan metotlar daha iyi hale getirilmekte ve her geçen gün yeni metot bulma çalışmaları hızla devam ettirilmektedir.

2.3.2.2. Karbon nanotüplerin çeşitleri

Karbon nanotüpler, grafin tabakasının silindir şeklinde yuvarlanması ile tek duvarlı ve iç içe geçmiş silindirler şeklinde çok duvarlı olmak üzere iki tipe sahiptirler.



Şekil 2.4. Tek duvarlı ve çok duvarlı karbon nanotüpler

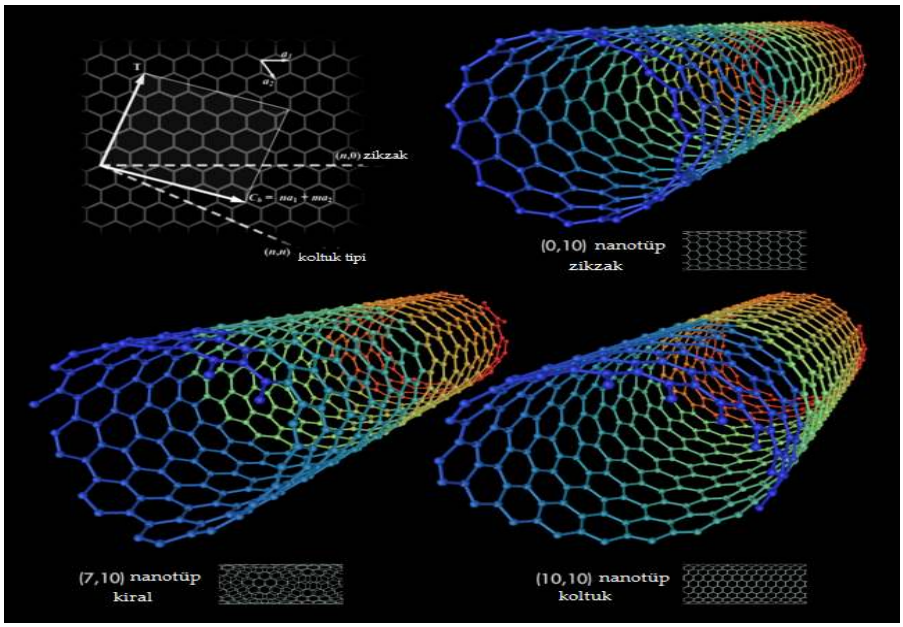
1. Tek duvarlı karbon nanotüpler

Tek bir grafin tabakasının yuvarlanmasıyla elde edilen yapılardır. Grafin tabakasının yuvarlanma yönüne göre TDKNT' lerin geometrileri ve buna bağlı olarak sahip oldukları elektronik ve mekanik özellikleri değişiklikler göstermektedir. Grafin tabakasının yuvarlanma yönüne göre TDKNT' ler, koltuk modeli, zig-zag modeli ve bükük model olmak üzere üç farklı modele sahiptirler.

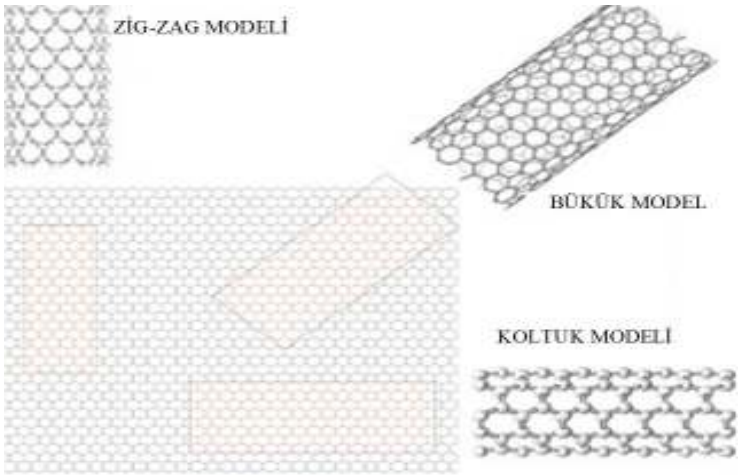
Koltuk modeli TDKNT' ler metalik özellik gösterirken, zig-zag model tüp yarıiletken özelliği göstermektedir. Eğer zig-zag modelde tüpün çevresindeki halka sayısı üçün katları ise zig-zag model de metal özelliği gösterir. Aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi grafin tabakasının üzerindeki altıgen parçalar karbon atomlarını temsil etmektedir. c vektörüne dik olan vektör de yüzeyin kıvrılma eksenini göstermektedir. Kolaylık sağlaması açısından her karbon atomuna bir numara verilmektedir. c vektörünün ucu

nerede ise nanotüp o ismi almaktadır. Şekildeki (0,10) nanotüp, (7,10) nanotüp, (10,10) nanotüp gibi. Bu iki indis genellikle (n,m) şeklinde gösterilmektedir.

n=m ise nanotüp koltuk modelidir. m=0 ise nanotüp zig-zag modelidir. Diğerlerinin tümü bükük (kiral) model olarak isimlendirilmektedir.



Şekil 2.5. Tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik modellerinin oluşumu



Şekil 2.6. Tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik modelleri

Bazı KNT yapılara ait atom sayıları, yarıçap, uzunluk ve elastisite modülleri Çizelge 2.1'de verilmiştir.

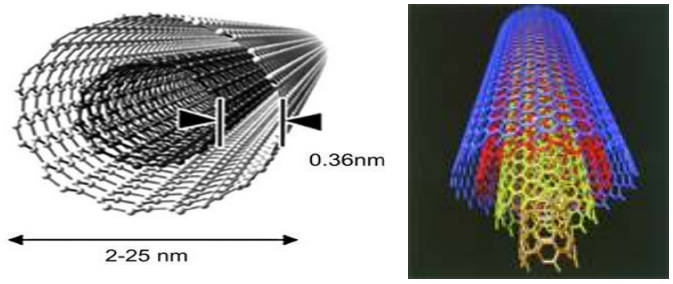
Çizelge 2.1. Farklı (n,m) değerlerinde, tek duvarlı karbon nanotüplerin geometrik özellikleri

(n,m)	Atom sayısı	Yarıçap (nm)	Uzunluk (nm)	Y(GPa)
Koltuk modeli				
(8,8)	1168	0,542	8,854	934,960
(10,10)	1460	0,678	8,854	935,470
(12,12)	1752	0,814	8,854	935,462
(14,14)	2324	0,946	10,084	935,454
(16,16)	3040	1,085	11,560	939,515
(18,18)	3924	1,220	13,281	934,727
(20,20)	5000	1,356	15,250	935,048
Ortalama				935,805±0,618
Zig-zag model				
(14,0)	840	0,548	6,230	939,032
(17,0)	1360	0,665	8,362	938,553
(21,0)	1890	0,882	9,428	936,936
(24,0)	2400	0,939	10,500	934,201
(28,0)	3080	1,096	11,563	932,626
(31,0)	3720	1,213	12,621	932,598
(35,0)	4900	1,370	14,757	933,061
Ortalama				935,287±2,887
Bükük model				
(12,6)	1344	0,525	9,023	927,671
(14,6)	1896	0,696	11,367	921,616
(16,8)	2240	0,828	11,279	928,013
(18,9)	2520	0,932	11,279	927,113
(20,12)	3920	1,096	14,921	904,353
(24,11)	3844	1,213	13,215	910,605
(30,8)	4816	1,358	14,792	908,792
Ortalama				918,309±10,392
Ortalama				929,8±11,5

(Jin, Y. ve Yuan, F. G.,2003)

2. Çok duvarlı karbon nanotüpler

ÇDKNT' ler, bir çok eş merkezli grafin tabakalarının yuvarlanması ile oluşmuş yapılardır. İç içe geçmiş durumdaki tüpleri Van der Waals kuvvetleri birarada tutar. ÇDKNT' lerde katmanlar arası mesafe yaklaşık 0,34–0,36 nm'dir. Bu boyut grafinin tipik atomik boşluğuna yakındır. ÇDKNT' lerin boyutları yaklaşık 5-10 nm kadardır ve kullanımları TDKNT' lere oranla daha yaygındır.



Şekil 2.7. Çok duvarlı karbon nanotüp modelleri

2.3.3. Karbon Nanoçubuklar

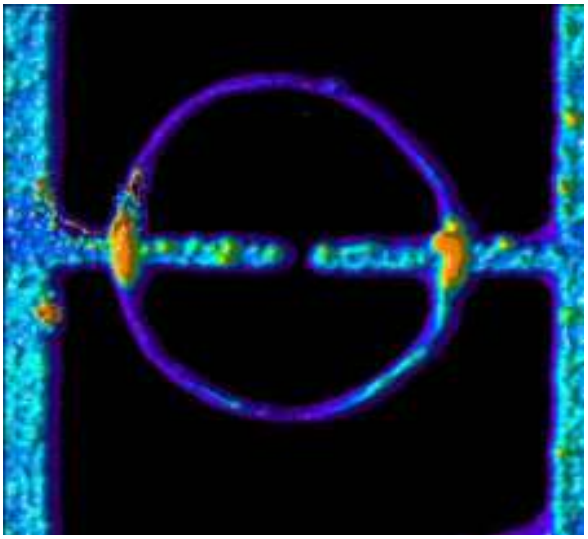
İç içe geçmiş karbon tüplerinde (ÇDKNT) iki tüp arasındaki mesafe, genellikle tüpü oluşturan karbon atomları arasındaki bağ mesafesinden büyüktür. Eğer tüplerin duvarları arasındaki mesafe, karbon atomlarının bağ yapabileceği kadar kısa ise karbon atomları birbirleri ile bağlanırlar. Bu durumda oluşan çok duvarlı tüp yapısına çubuk denmektedir. Nanoçubuklar, tüplere oranla daha az esneklik gösterirler. Bu yapıların elektronik ve mekanik özellikleri de TDKNT' lere göre farklılık göstermektedir.



Şekil 2.8. Nanoçubuk modeli

2.3.4. Karbon nanohalkalar

Düz, ip şeklindeki nanotüpleri halka haline çevirmek mümkündür. Bu halkalar bir çok katman olarak tek duvarlı nanotüplerden oluşmaktadır. Yaklaşık 0,7 mikron çapa sahiptirler. Halka haline getirme, proteinlerde ve diğer biyomoleküllerde gözlenmiştir. İlk olarak sarım içi temel kuvvetin hidrojen bağından kaynaklandığı düşünülmekte iken daha sonra bu kuvvetin sadece Van der Waals kuvvetinden kaynaklandığı tespit edilmiştir. Halka oluşturmak için kullanılan nanotüpler oldukça küçüktür. Çapları sadece 1,4 nm'dir. Halka halindeki nanotüpler düşük sıcaklıklarda tek boyutlu iletkendirler. Kuantumsal etkileşim tüpler arasındaki elektriksel iletimi yönetir. Halka şekli, bunun gibi tek boyutlu iletkenlerde kuantum etkilerini gözleyebilmeyi mümkün kılar.



Şekil 2.9. Nanotüp halka görüntüsü

BÖLÜM 3

KARBON NANOTÜPLERİN ÇÖKMESİ VE KİRİŞ MODELLERİ

3.1. Giriş

Bu bölümde KNT' lerin mekanik davranışlarının modellenmesinde kullanılan Euler-Bernoulli kiriş modeli açıklanacaktır. TDKNT'lerin kiriş teorileriyle modellenmesi mukavemetten iyi bilinen yöntemlerle kolaylıkla yapılabilmektedir. N duvarlı tüpler için genel Euler Bernoulli kiriş teorisi oluşturulacaktır. Ardından Sonlu Farklar Yöntemi açıklanacaktır.

3.2. N Duvarlı Karbon Nanotüpler İçin Çökme Denklemleri

KNT' lerin moleküler dinamik yöntemlerle incelenmesi atom sayısının artmasıyla güçleşmekte hatta günümüzdeki hesaplama olanaklarıyla imkansız olabilmektedir. Bu nedenle KNT' lerin sürekli ortam şeklinde modellenmesi yoluna gidilmektedir. Şekil 3.1 de iki duvarlı KNT için atomik ve sürekli ortam modelleri gösterilmiştir. KNT' lerin sürekli ortam modellerinde kabuk ve kiriş modelleri daha önceki bazı çalışmalarda kullanılmıştır. Bu çalışmada sürekli ortam Euler-Bernoulli kiriş modeli kullanılacaktır. N duvarlı bir karbon nanotüp göz önüne alınsın. Düşey

yükler etkisinde bu tüpe ait çökme denklemi Euler-Bernoulli kiriş teorisi kullanılarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

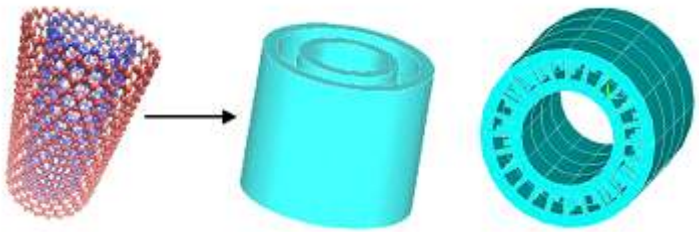
$$E\ I_1 \frac{\partial^4 w_1(x)}{\partial x^4} = c_{12}(w_2 - w_1)$$
$$E\ I_2 \frac{\partial^4 w_2(x)}{\partial x^4} = c_{12}(w_1 - w_2) + c_{23}(w_3 - w_2)$$
$$\cdot$$
$$\cdot \qquad (3.1)$$
$$EI_N \frac{\partial^4 w_N(x)}{\partial x^4} + q = c_{N-1,N}(w_N - w_{N-1}).$$

c, Van der Waals etkileşim katsayısıdır ve aşağıda gösterildiği gibi hesaplanmıştır.

$$c = \frac{320 \cdot 2R_1}{0.16 \cdot 0.142^2} \qquad (3.2)$$

Burada E elastisite modülünü, I_i i.tüpe ait atalet momentini, w_i i.tüpün çökmesini c_{ij} i. ve j. tüp arasındaki Van der Waals etkileşim katsayısını ve q en dıştaki tüpe düşey yönde etkiyen yayılı kuvveti göstermektedir. Buradaki tüp numaralandırılması en iç tüpe 1 denilerek dışarıya doğru arttırılmıştır. Böylece en dıştaki tüp N. tüp olarak adlandırılmıştır.

Bu tüplerin çökme analizinde kullanılacak klasik sınır şartları aşağıdaki gibi verilebilir:



Şekil 3.1. Çok duvarlı karbon nanotüplerin sürekli ortamdaki temsili şekli

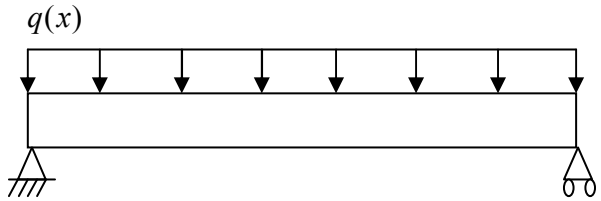
Basit Destekli(B): $w = 0, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0$

Ankastre(A): $w = 0, \ \frac{\partial w}{\partial x} = 0$

Serbest(S): $\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0, \frac{\partial^3 w}{\partial x^3} = 0$ (3.3)

3.3. Tek Duvarlı Karbon Nanotüplerin Çökme Analizi

Bu kısımda integral alma yöntemiyle Euler-Bernoulli Sürekli Ortam Kiriş Modeli kullanılarak TDKNT'lerin farklı sınır şartlarındaki çökmeleri hesaplanacaktır. Öncelikle aşağıdaki şekilde verildiği gibi genel düşey yayılı yük etkisindeki bir TDKNT göz önüne alınsın.



Şekil 3.2. Yayılı yüklü bir karbon nanotüp

Bu durum için (3.1) aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$EI\frac{\partial^4 w(x)}{\partial x^4} = q(x) \tag{3.3}$$

Bu denklemin integre edilmesiyle sırasıyla aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$EI\frac{\partial^3 w(x)}{\partial x^3} = V(x) = \int_0^x q(x)dx + C_1 \tag{3.4}$$

$$EI\frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} = M(x) = \int_0^x\int_0^x q(x)dxdx + C_1 x + C_2 \tag{3.5}$$

$$EI\frac{\partial w(x)}{\partial x} = \int_0^x\int_0^x\int_0^x q(x)dxdxdx + C_1\frac{x^2}{2} + C_2 x + C_3 \tag{3.6}$$

$$EIw(x) = \int_0^x\int_0^x\int_0^x\int_0^x q(x)dxdxdxdx + C_1\frac{x^3}{6} + C_2\frac{x^2}{2} + C_3 x + C_4 \tag{3.7}$$

(3.7) ifadesi genel sınır şartlarında, tek duvarlı bir karbon nanotüpe ait çökme davranışını yöneten denklemdir. (3.2)'de verilen sınır şartları kullanılarak ilgili sınır şartlarına ait özel çözümler bulunabilir.

Örneğin B-B mesnetli, üniform q(x)=q düşey yükü etkisindeki, TDKNT için çökmeyi hesaplayalım.

Basit Destekli(B): $w = 0, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0$

Basit destekli sınır şartı için çözüm yaparsak, x=0 iken (3.5)'te C_2=0, (3.7)'de C_4=0;

x=L iken, (3.5)'te $C_1 = \frac{1}{2}qL$, (3.7)'de $C_2 = -\frac{1}{24}qL^3$ sabit katsayıları bulunur.

Bulunan C_m sabitlerini (3.7)'de yerlerine koyarsak B-B için TDKNT için çökme denklemini aşağıdaki gibi buluruz.

$$w(x) = \frac{x^4}{24EI}q + \frac{x^3 L}{12EI}q - \frac{xL^3}{24EI}q \tag{3.8}$$

Basit destekli TDKNT'te maksimum çökme tam orta nokta, x=L/2'de meydana gelmektedir.

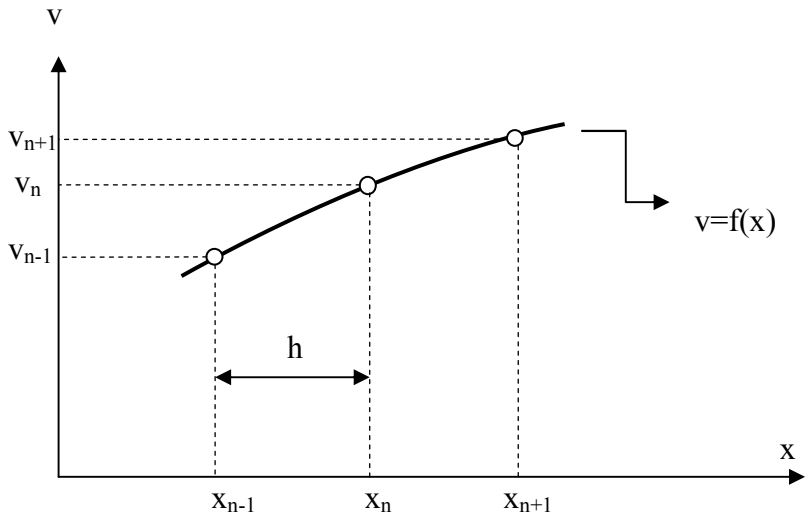
$$w_{\max}(L/2) = \frac{(L/2)^4}{24EI}q + \frac{(L/2)^3 L}{12EI}q - \frac{(L/2)L^3}{24EI}q \tag{3.9}$$

$$w_{\max}(L/2,t) = \frac{5qL^4}{384EI} \tag{3.10}$$

TDKNT için verilen bu analitik çözümleme 2 ve daha fazla tüpten oluşan ÇDKNT'ler için genel sınır şartlarında mümkün değildir. Bu sebeple yaklaşık çözüm yöntemleri kullanılması yoluna gidilmektedir. Bu çalışmada da çok duvarlı tüpler için bir nümerik yöntem olan sonlu farklar yöntemi kullanılacaktır. Bir sonraki bölümde kısaca bu yöntem açıklanacaktır.

3.4. Sonlu Farklar Yöntemi

Karbon nanotüplerin çökmesinde kullanılan yöntemlerden birisi sonlu farklar yöntemidir (SFY). Sürekli bir v(x) fonksiyonu göz önüne alınsın. **(**Steven ve Raymond, 2003)



Şekil 3.3. Sonlu farklar yönteminde tanımlanan bir v=f(x) fonksiyonu

Burada h adım uzunluğu, n ise düğüm noktaları olarak adlandırılır.

v fonksiyonunun n düğümündeki birinci türevi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\left[\frac{dv}{dx}\right]_n \approx \frac{\Delta v_n}{h} = \frac{1}{h}(v_{n+1} - v_n) \tag{3.11}$$

burada,

$$\Delta v_n = v_{n+1} - v_n \approx h\left[\frac{dv}{dx}\right]_n \tag{3.12}$$

şeklinde yazılır.

Δ, birinci ileri fark olarak adlandırılır. Benzer şekilde birinci türeve aşağıdaki gibi yaklaşır.

$$\left[\frac{dv}{dx}\right]_n \approx \frac{\nabla v_n}{h} = \frac{1}{h}(v_n - v_{n-1}) \tag{3.13}$$

∇, ikinci ileri fark olarak adlandırılır.

$$\Delta v_n = v_n - v_{n-1} \approx h\left[\frac{dv}{dx}\right]_n \tag{3.14}$$

Bu ifade de geri fark formülü ile birinci türevdir.

Merkezi fark formülleri şeçilen n sayısı kadar türevlerde yakınsama sağlar. Eğer ileri ve geri fark formüllerini toplayıp ikiye bölersek merkezi fark formülünü bulmuş oluruz. Burada merkezi fark formülü ile birinci türev şöyle ifade edilir.

$$\left[\frac{dv}{dx}\right]_n = \frac{1}{2h}(v_{n+1} - v_{n-1})$$

$$\delta v_n = \frac{1}{2}(v_{n+1} - v_{n-1}) \approx h\left[\frac{dv}{dx}\right]_n \tag{3.15}$$

şeklinde yazılır.

Birinci türevin bir daha türevi alınırsa yani ikinci türevi elde etmek istenirse,

$$h^2\left[\frac{d^2v}{dx^2}\right]_n \approx \Delta(\nabla v_n) = \nabla(\Delta v_n) = \delta^2 v_n \tag{3.16}$$

elde edilir.

(3.15) ve (3.16)'a göre denklemler tekrar düzenlenirse,

$$\delta^2 v_n = \Delta v_n - \Delta v_{n-1} = (v_{n+1} - v_n) - (v_n - v_{n-1}) \tag{3.17}$$

elde edilir. Daha da açılırsa,

$$\delta^2 v_n = v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1} \approx h^2\left[\frac{d^2v}{dx^2}\right]_n \tag{3.18}$$

ikinci merkezi fark formülü de bulunmuş olur.

Benzer adımlar üçüncü merkezi farklar için yapılırsa,

$$\delta^3 v_n = \delta(\delta^2 v_n) = \delta v_{n+1} - 2\delta v_n + \delta v_{n-1} = \frac{1}{2}(v_{n+2} - v_n) - (v_{n+1} - v_{n-2}) + \frac{1}{2}(v_n - v_{n-2})$$

veya

$$\delta^3 v_n = \frac{1}{2}(v_{n+2} - 2v_{n+1} + 2v_{n-1} - v_{n-2}) \approx h^3\left[\frac{d^3v}{dx^3}\right]_n \tag{3.19}$$

elde edilir.

Aynı mantıkla dördüncü mertebeden sonlu farklar;

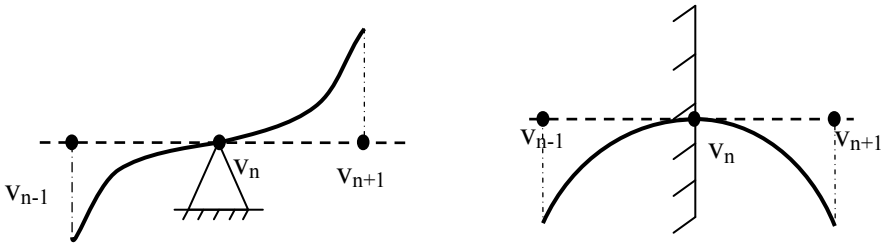
$$\delta^4 v_n = v_{n+2} - 4v_{n+1} + 6v_n - 4v_{n-1} + v_{n-2} \approx h^4 \left[\frac{d^4 v}{dx^4} \right]_n \tag{3.20}$$

şeklinde yazılır.

Bu çalışmada ankastre ve basit destekli nanotüpler için sonlu farklarla çözüm yapılacaktır. Bu şartlara ait sonlu farklar formülasyonu aşağıdaki tablo ve şekilde verilmiştir.

Çizelge 3.1. Sonlu Farklar yöntemiyle sınır koşulları

Basit Destekli(B)	Ankastre(A)	Serbest Destekli
$v_n=0$	$v_n=0$	$v_{n+1}-2v_n+v_{n-1}=0$
$v_{n+1}=-v_{n-1}$	$v_{n+1}=v_{n-1}$	$v_{n+2}-2v_{n+1}+2v_{n-1}-v_{n-2}=0$



a) Basit destekli sınır şartı b) Ankastre sınır şartı

Şekil 3.4. Sınır şartlarının şematik gösterim

BÖLÜM 4

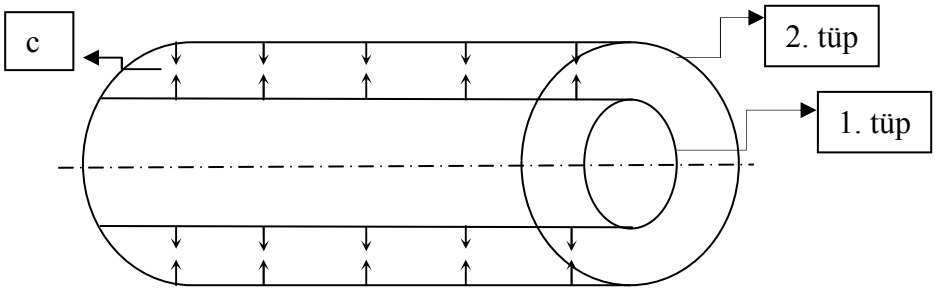
ÇİFT DUVARLI KARBON NANOTÜPLERİN STATİK ANALİZİ

4.1. Giriş

Bu bölümde çok duvarlı tüpler olarak 2 duvarlı tüplerin çökme davranışları incelenecektir. Öncelikle tüm kenarları basit destekli ÇDKNT'lerin çökmesi Navier tipi yöntemle incelenecektir. Ardından uçları farklı sınır koşullarındaki ÇDKNT'lerin çökmesi sonlu farklar metodu (SFM) kullanarak bulunacaktır. Çok duvarlı tüplerde analitik çözüm genel sınır şartları için mümkün olmadığından bu yöntemden faydalanılmıştır.

4.2. Çift Duvarlı Karbon Nanotüpler

Çift duvarlı bir nanotüp şematik olarak aşağıdaki gibi gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Çift duvarlı karbon nanotüpün şematik gösterimi

Burada, c; Van der Waals bağlarını göstermektedir ve atomlar arası çekim kuvvetini ifade etmektedir. Bir başka deyişle, mekanik anlamda iki tüp arasında yay varmış gibi düşünülebilir.

(3.9)'da tek tüp için çökme denklemi elde edilmiştir. İki tüp için çökme denklemlerini yazarsak;

$$E_1 I_1 \frac{\partial^4 w_1(x)}{\partial x^4} = c(w_2 - w_1)$$
$$E_2 I_2 \frac{\partial^4 w_2(x)}{\partial x^4} + q = c(w_1 - w_2) \qquad (4.1)$$

Elde edilir.

Bu eşitlikler el ile analitik olarak çözülmeye çalışılacak olursa, sekizinci dereceden bir diferansiyel denklemle karşılaşılmış olur. Tüp sayısı daha da arttırılacak olursa, analitik yöntemle çözüm zorlaşmaktadır.

4.3. Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Navier Tipi Yöntemle Çökme Analizi

Yerdeğiştirme bileşenlerinin ve düşey kuvvetin aşağıdaki form da seçilmesi (4.1) denklemini ve (3.2)'de verilen basit destekli sınır şartlarını sağlar.

$$w_i = W_i \sin \frac{\pi x}{L}, \quad i = 1,2$$
$$q(x) = Q_0 \sin \frac{\pi x}{L} \qquad (4.2)$$

(4.2)'yi, (3.2)'de yerine yazarsak W_1* ve W_2* aşağıdaki gibi bulunur:

$$W_1^* = \frac{W_1 EI_2}{qL^4} = \frac{\varepsilon_2\left(\beta^4 + \varepsilon_1\right)}{\left(\beta^4 + \varepsilon_1\right)\left[\left(\beta^4 + \varepsilon_2\right)\left(\beta^4 + \varepsilon_1\right) - \varepsilon^2\right]} \tag{4.3}$$

$$W_2^* = \frac{W_2 EI_2}{qL^4} = \frac{\left(\beta^4 + \varepsilon_1\right)}{\left[\left(\beta^4 + \varepsilon_2\right)\left(\beta^4 + \varepsilon_1\right) - \varepsilon^2\right]} \tag{4.4}$$

Burada ilgili parametreler aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$\beta = \pi,\ \varepsilon_i = \frac{cL^4}{EI_i}\ i = 1,2. \tag{4.5}$$

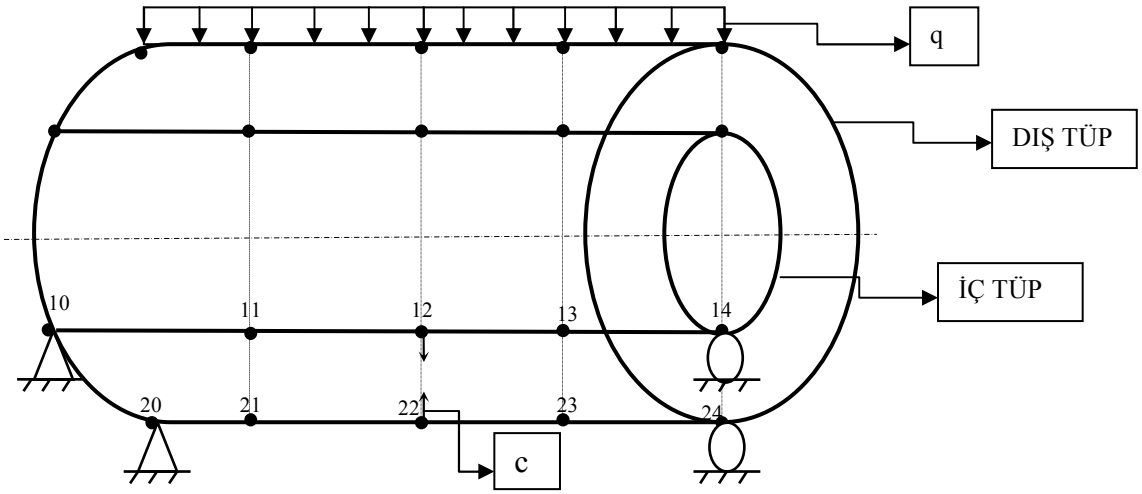
Navier tipi çözüm yöntemi sadece tüm kenarları basit destekli KNT'lere uygulandığından genel sınır şartlarındaki KNT'ler için bu çalışmada sonlu farklar yöntemi kullanılmıştır.

4.4. Çift Duvarlı Karbon Nanotüplerin Sonlu Farklar Yöntemiyle Çökme Analizi

Karbon nanotüplerin çökme analizi 3. bölümde anahatları verilen sonlu farklar yöntemi kullanılarak ankastre ve basit destekli haller için ve nanotüp 4, 6, 8, 10 ve 12 parçaya bölünerek yapılacaktır. Elde edilen sonuçlar karşılaştırılarak aralık sayısının sonuçlar üzerindeki etkisi gözlenecektir.

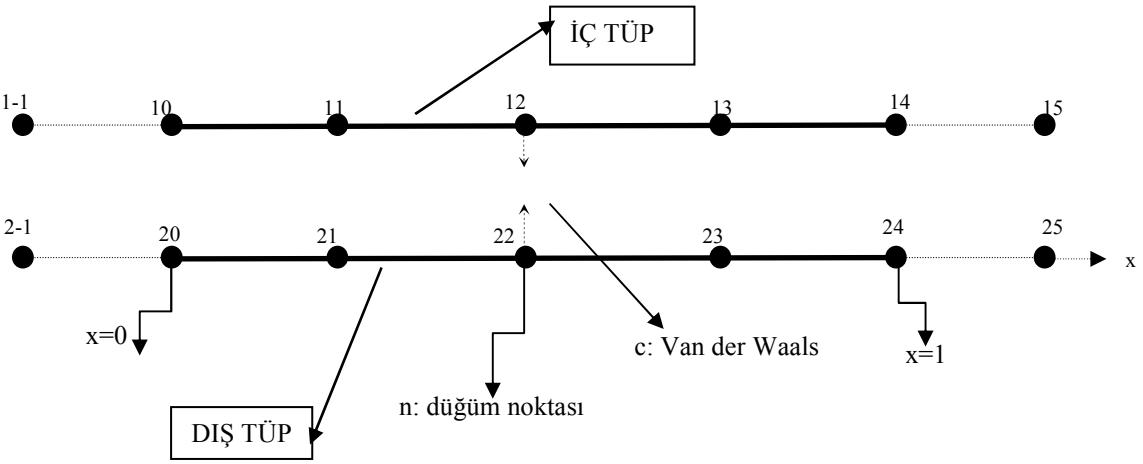
4.4.1. Uçları basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün 4 parça için çökme analizi

4 parçaya bölünmüş bir ÇDKNT'ün şematik görünümü Şekil 4.2. de verilmiştir. Buradaki numaralandırmada ilk sayı tüpün numarasını ikinci sayı ise düğüm numarasını göstermektedir.



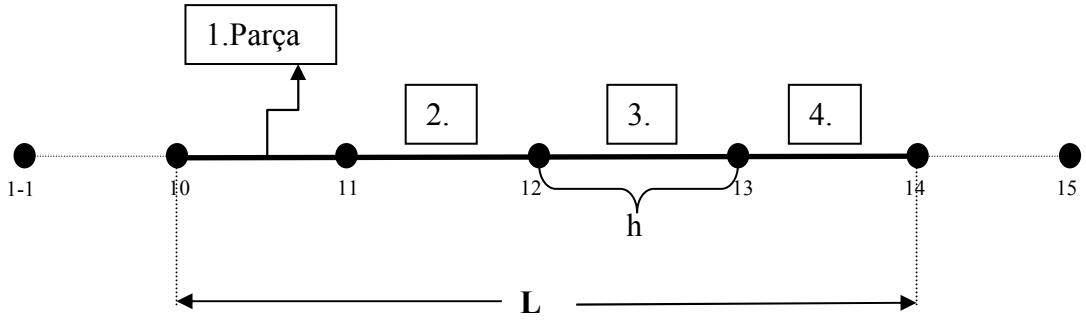
Şekil 4.2. 4 Parçaya ayrılmış her bir ucu basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün şematik gösterimi

Sınır şartlarının uygulanması sırasında kullanılacak hayali noktaların eklenmesi halindeki numaralandırma Şekil 4.3'de gösterilmiştir.



Şekil 4.3. 4 Parçaya ayrılmış iki nanotüpün etkileşiminin şematik gösterimi

İçteki, yani birinci tüp daha yakından incelenirse, w_{mn} çökme ifadesinde m tüpün indisi, n ise hangi noktada olduğunu göstermektedir.



Şekil 4.4. 4 parçaya ayrılmış içteki nanotüpün şematik gösterimi

(4.1)'de verilen çökme denklemi Sonlu Farklar yöntemi kullanılarak aşağıdaki formda yazılabilir.

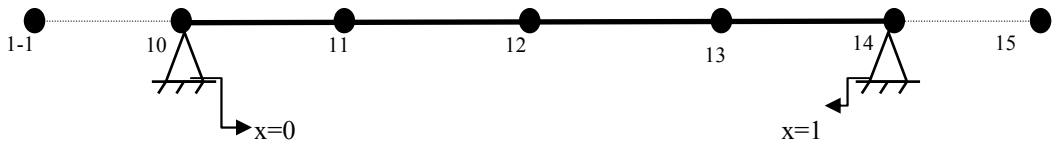
$$EI_1(w_{1n})^{(4)} = c(w_{2n} - w_{1n}) \qquad \{1.\text{tüp}\}$$

$$EI_2(w_{2n})^{(4)} = c(w_{1n} - w_{2n}) + q \qquad \{2.\text{tüp}\} \tag{4.6}$$

Sonlu Farklar ile 4. türev ifadesi aşağıdaki gibi idi.

$$\left[\frac{d^4w}{dx^4}\right]_n = \frac{1}{h^4}\left[w_{n+2} - 4w_{n+1} + 6w_n - 4w_{n-1} + w_{n-2}\right] \tag{4.7}$$

Yukarıda değinilen denklemleri kullanarak tüplerin maksimum çökme hesabını inceleyelim. İçteki 1. tüp incelenecek olursa, Burada, $0<x<L$; $h=L/4$; $n=1, 2, 3$; $-w_{11}=w_{1-1}$, $-w_{13}=w_{15}$ ve $w_{10}=w_{14}=0$ olarak alınır.



Şekil 4.5. İç tüpün 4 parçaya ayrılmış basit destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü

(3.20)'deki 4. Türevi sonlu farklarla tanımlayan denklem, (4.6)'da 1. tüpe uygulanırsa ve Şekil 3.3. a)'daki basit destek şartlarıyla;

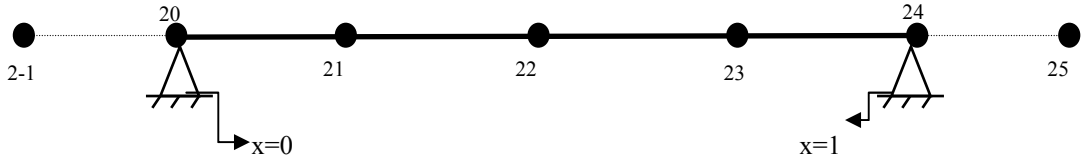
$$\begin{aligned} n=1 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+6w_{11}-4w_{10}+w_{1-1}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0 \\ n=2 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{14}-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}+w_{10}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0 \\ n=3 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{15}-4w_{14}+6w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0 \end{aligned} \tag{4.8}$$

genel bir ifade karşımıza çıkar.

$$\begin{aligned} n=1 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+5w_{11}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0 \\ n=2 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0 \\ n=3 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[5w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Sadeleştirmeleri yaparsak (4.9) elde edilir.

1. tüpün çökme denklemlerinin eldesi için yapılan hesaplar, 2. tüp için de yapılacak olursa; burada, $0<x<L$; $h=L/4$; $n=1, 2, 3$; $-w_{21}=w_{2-1}$, $-w_{23}=w_{25}$ ve $w_{20}=w_{24}=0$ olarak alınır.



Şekil 4.6. Dış tüpün 4 parçaya ayrılmış basit destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+6w_{21}-4w_{20}+w_{2-1}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q \\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{24}-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}+w_{20}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q \\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{25}-4w_{24}+6w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

genel ifadeyi sadeleştirirsek,

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+5w_{21}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q \\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q \\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[5w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q
\end{aligned}
\tag{4.11}
$$

elde edilir.

Bu işlemler sonucunda elde edilen (4.9) ve (4.11) eşitliklerinde verilen 6 adet 6 bilinmeyenli lineer denklem sistemi çözülerek çözüm bölgesindeki her bir noktada çökme değerleri elde edilmiş olur.

4.4.2. Uçları basit destekli olan çift duvarlı karbon nanotüpün 12 parça için çökme analizi

İkinci bir örnek olarak nanotüp 12 parçaya bölünmüştür. -1'den 13'e kadar toplam 14 düğüm noktası vardır.

1. tüpü incelersek; burada, 0<x<L; h=L/12; n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11; $-w_{11}=w_{1-1}$, $-w_{1(10)}=w_{1(13)}$ ve $w_{10}=w_{1(12)}=0$ olarak alınır.

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+6w_{11}-4w_{10}+w_{1-1}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{14}-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}+w_{10}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{15}-4w_{14}+6w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0\\
&n=4 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{16}-4w_{15}+6w_{14}-4w_{13}+w_{12}\right]+cw_{14}-cw_{24}=0\\
&n=5 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{17}-4w_{16}+6w_{15}-4w_{14}+w_{13}\right]+cw_{15}-cw_{25}=0\\
&n=6 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{18}-4w_{17}+6w_{16}-4w_{15}+w_{14}\right]+cw_{16}-cw_{26}=0\\
&n=7 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{19}-4w_{18}+6w_{17}-4w_{16}+w_{15}\right]+cw_{17}-cw_{27}=0\\
&n=8 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(10)}-4w_{19}+6w_{18}-4w_{17}+w_{16}\right]+cw_{18}-cw_{28}=0\\
&n=9 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(11)}-4w_{1(10)}+6w_{19}-4w_{18}+w_{17}\right]+cw_{19}-cw_{29}=0\\
&n=10 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(12)}-4w_{1(11)}+6w_{1(10)}-4w_{19}+w_{18}\right]+cw_{1(10)}-cw_{2(10)}=0\\
&n=11 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(13)}-4w_{1(12)}+6w_{1(11)}-4w_{1(10)}+w_{19}\right]+cw_{1(11)}-cw_{2(11)}=0
\end{aligned}
\tag{4.16}
$$

elde edilir.

2. tüpü incelersek;

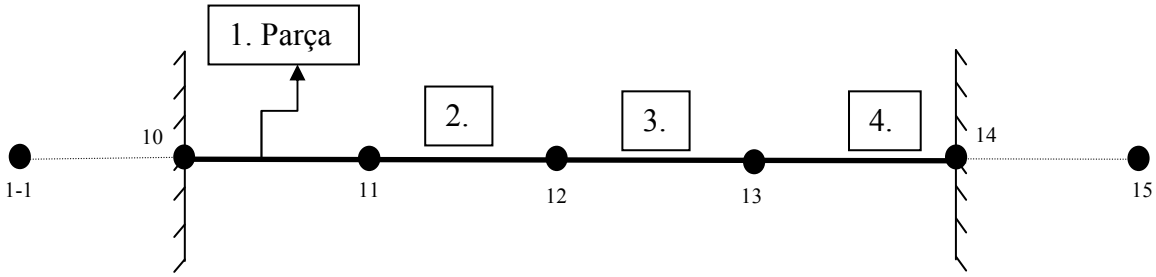
Burada, 0<x<L; h=L/12; n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11; $-w_{21}=w_{2\text{-}1}$, $-w_{2(11)}=w_{2(13)}$ ve $w_{20}=w_{2(12)}=0$ olarak alınır.

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+6w_{21}-4w_{20}+w_{2-1}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{24}-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}+w_{20}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{25}-4w_{24}+6w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q\\
&n=4 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{26}-4w_{25}+6w_{24}-4w_{23}+w_{22}\right]+cw_{24}-cw_{14}=q\\
&n=5 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{27}-4w_{26}+6w_{25}-4w_{24}+w_{23}\right]+cw_{25}-cw_{15}=q\\
&n=6 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{28}-4w_{27}+6w_{26}-4w_{25}+w_{24}\right]+cw_{26}-cw_{16}=q\\
&n=7 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{29}-4w_{28}+6w_{27}-4w_{26}+w_{25}\right]+cw_{27}-cw_{17}=q\\
&n=8 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(10)}-4w_{29}+6w_{28}-4w_{27}+w_{26}\right]+cw_{28}-cw_{18}=q\\
&n=9 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(11)}-4w_{2(10)}+6w_{29}-4w_{28}+w_{27}\right]+cw_{29}-cw_{19}=q\\
&n=10 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(12)}-4w_{2(11)}+6w_{2(10)}-4w_{29}+w_{28}\right]+cw_{2(10)}-cw_{1(10)}=q\\
&n=11 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(13)}-4w_{2(12)}+6w_{2(10)}-4w_{2(9)}+w_{2(8)}\right]+cw_{2(11)}-cw_{1(11)}=q
\end{aligned}
\tag{4.17}
$$

Yukarıda 4 parçaya bölünmüş KNT için elde edildiği gibi 12 parçaya bölünmüş tüp için de 12 bilinmeyenli 12 adet lineer denklem sistemi yazılarak KNT'e ait her bir noktadaki çökme değeri bulunmuş olur.

4.4.3. Uçları ankastre olan çift duvarlı karbon nanotüpün 4 parça için çökme analizi

İç ve dıştaki her iki tüpün de ankastre destekli olduğu ÇDKNT'lerde 4 ve 12 parçaya bölünmüş halleri için denklemler verilecektir.



Şekil 4.7. İç tüpün 4 parçaya ayrılmış ankastre destekli halindeki düğüm noktalarının görünümü

İlk olarak 4 parçalı ÇDKNT'lerde, içteki 1. tüp incelenecek olursa;

Burada, $0<x<L$; $h=L/4$; $n=1, 2, 3$; $w_{11}=w_{1-1}$, $w_{13}=w_{15}$ ve $w_{10}=w_{14}=0$ olarak alınır.

(3.9)'daki denklem (4.6)'da 1. tüpe uygulanırsa,

$$\begin{aligned} n=1 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+6w_{11}-4w_{10}+w_{1-1}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0 \\ n=2 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{14}-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}+w_{10}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0 \\ n=3 \text{ iken } & \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{15}-4w_{14}+6w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0 \end{aligned} \tag{4.18}$$

(4.8)'i sadeleştirirsek,

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+7w_{11}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[7w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0
\end{aligned}
\qquad (4.19)
$$

elde edilir. 2. tüp incelenecek olursa; burada, 0<x<L; h=L/4; n=1, 2, 3; $-w_{21}=w_{2\text{-}1}$, $-w_{23}=w_{25}$ ve $w_{20}=w_{24}=0$ olarak alınır.

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+6w_{21}-4w_{20}+w_{2-1}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{24}-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}+w_{20}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{25}-4w_{24}+6w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q
\end{aligned}
\qquad (4.20)
$$

elde edilir.

(4.20)'yi sadeleştirirsek,

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+7w_{21}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[7w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q
\end{aligned}
\qquad (4.21)
$$

elde edilir.

Daha önce basit destekli durum için belirtildiği gibi (4.19) ve (4.20) denklemlerinde verilen 6 adet 6 bilinmeyenli denklemden A-A mesnetli KNT için herbir noktadaki çökme değerleri bulunabilir.

4.4.4. Uçları ankastre olan çift duvarlı karbon nanotüpün 12 parça için çökme analizi

Son olarak nanotüp 12 parçaya bölünmüştür, -1'den 13'e kadar numaralandırılmış toplam 14 düğüm noktası vardır.

1. tüpü incelersek;

Burada, $0<x<L$; $h=L/12$; $n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11$; $-w_{11}=w_{1-1}$, $-w_{1(10)}=w_{1(13)}$ ve $w_{10}=w_{1(12)}=0$ olarak alınır.

$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{13}-4w_{12}+6w_{11}-4w_{10}+w_{1-1}\right]+cw_{11}-cw_{21}=0\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{14}-4w_{13}+6w_{12}-4w_{11}+w_{10}\right]+cw_{12}-cw_{22}=0\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{15}-4w_{14}+6w_{13}-4w_{12}+w_{11}\right]+cw_{13}-cw_{23}=0\\
&n=4 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{16}-4w_{15}+6w_{14}-4w_{13}+w_{12}\right]+cw_{14}-cw_{24}=0\\
&n=5 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{17}-4w_{16}+6w_{15}-4w_{14}+w_{13}\right]+cw_{15}-cw_{25}=0\\
&n=6 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{18}-4w_{17}+6w_{16}-4w_{15}+w_{14}\right]+cw_{16}-cw_{26}=0\\
&n=7 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{19}-4w_{18}+6w_{17}-4w_{16}+w_{15}\right]+cw_{17}-cw_{27}=0\\
&n=8 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(10)}-4w_{19}+6w_{18}-4w_{17}+w_{16}\right]+cw_{18}-cw_{28}=0\\
&n=9 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(11)}-4w_{1(10)}+6w_{19}-4w_{18}+w_{17}\right]+cw_{19}-cw_{29}=0\\
&n=10 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(12)}-4w_{1(11)}+6w_{1(10)}-4w_{19}+w_{18}\right]+cw_{1(10)}-cw_{2(10)}=0\\
&n=11 \text{ iken } \frac{EI_1}{h^4}\left[w_{1(13)}-4w_{1(12)}+6w_{1(11)}-4w_{1(10)}+w_{19}\right]+cw_{1(11)}-cw_{2(11)}=0
\end{aligned}
\tag{4.16}
$$

elde edilir.

2. tüpü incelersek;

Burada, 0<x<L; h=L/12; n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11; $-w_{21}=w_{2-1}$, $-w_{2(11)}=w_{2(13)}$ ve $w_{20}=w_{2(12)}=0$ olarak alınır.

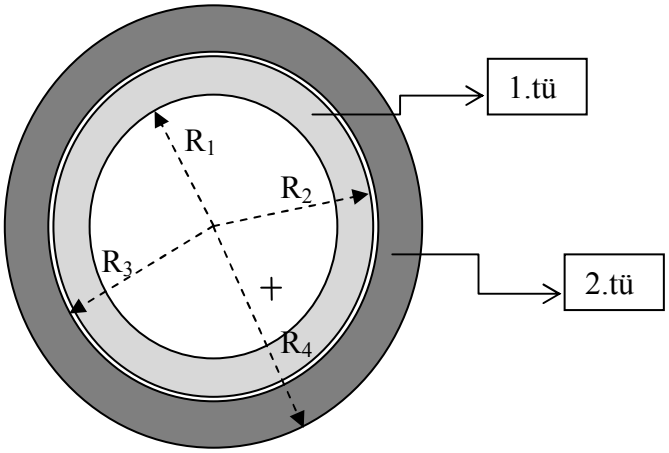
$$
\begin{aligned}
&n=1 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{23}-4w_{22}+6w_{21}-4w_{20}+w_{2-1}\right]+cw_{21}-cw_{11}=q\\
&n=2 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{24}-4w_{23}+6w_{22}-4w_{21}+w_{20}\right]+cw_{22}-cw_{12}=q\\
&n=3 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{25}-4w_{24}+6w_{23}-4w_{22}+w_{21}\right]+cw_{23}-cw_{13}=q\\
&n=4 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{26}-4w_{25}+6w_{24}-4w_{23}+w_{22}\right]+cw_{24}-cw_{14}=q\\
&n=5 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{27}-4w_{26}+6w_{25}-4w_{24}+w_{23}\right]+cw_{25}-cw_{15}=q\\
&n=6 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{28}-4w_{27}+6w_{26}-4w_{25}+w_{24}\right]+cw_{26}-cw_{16}=q\\
&n=7 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{29}-4w_{28}+6w_{27}-4w_{26}+w_{25}\right]+cw_{27}-cw_{17}=q\\
&n=8 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(10)}-4w_{29}+6w_{28}-4w_{27}+w_{26}\right]+cw_{28}-cw_{18}=q\\
&n=9 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(11)}-4w_{2(10)}+6w_{29}-4w_{28}+w_{27}\right]+cw_{29}-cw_{19}=q\\
&n=10 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(12)}-4w_{2(11)}+6w_{2(10)}-4w_{29}+w_{28}\right]+cw_{2(10)}-cw_{1(10)}=q\\
&n=11 \text{ iken } \frac{EI_2}{h^4}\left[w_{2(13)}-4w_{2(12)}+6w_{2(10)}-4w_{2(9)}+w_{2(8)}\right]+cw_{2(11)}-cw_{1(11)}=q
\end{aligned}
\tag{4.17}
$$

elde edilir.

Genel formülasyon bu şekilde elde edildikten sonra takip eden bölümde nümerik sonuçlar verilecektir.

4.5. Sayısal Sonuçlar ve Yorum

Bu kısımda daha önce parametrik olarak elde edilmiş ifadeler nümerik olarak hesaplanacaktır. Şekil 2.8'de çift duvarlı bir KNT'ün kesit geometrisi gösterilmiştir.



Şekil 4.8. Çift duvarlı bir karbon nanotüpün kesit geometrisi

Hesapları yapılan KNT'ün boyutları, malzeme ve yük aşağıdaki gibi seçilmiştir.

- R_1=0.175nm
- R_2=R_3=0.525nm
- R_4=0.875nm
- L=20R2
- E=1TPa
- q=1kN/m

Farklı sınır şartlarındaki ÇDKNT için farklı adım sayılarında bulunan boyutsuz maksimum çökme değerleri Tablo 4.1- Tablo 4.9'da verilmiştir. Tablolara göre n parça sayısı arttırıldığında çökme değerlerinin belli bir değere yakınsadığı görülmektedir. 10 ve 12 terim ile yapılan çözümlerde elde edilen sonuçlar arası fark en az % 0.17 en çok % 2.84 değerindedir. Bu sebeple tüm hesaplamalar 12 terim alarak gerçekleştirilmiştir. Yakınsama çalışmaları incelendiğinde ankastre mesnetli sınır şartı için yakınsamanın göreceli olarak daha yavaş olduğu söylenebilir. Yükün uygulandığı 2.tüpün daha çok çöktüğü gözlenmektedir. Burada birinci tüpün çökmesi van der Waals etkileşimi sebebiyledir.

4.5.1. İç Tüp ve Dış Tüpün Değişik Sınır Şartlarındaki Sayısal Sonuçları

Çizelge 4.1. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Basit-Basit destekli için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	1.198	1.214
6	1.166	1.182
8	1.154	1.171
10	1.149	1.165
12	1.146	1.163
%fark	0.26	0.17

Burada %fark ifadesi; 12 ve 10 parçalara ayrılmış nanotüpün çökmesinin farkının, 10 parçalı nanotübün çökmesine oranını ifade eder.

Çizelge 4.2. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Ankastre-Ankastre için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.333	0.348
6	0.268	0.284
8	0.246	0.262
10	0.235	0.251
12	0.229	0.246
%fark	2.62	2.03

Çizelge 4.3. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Ankastre-Ankastre için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.363	0.375
6	0.291	0.305
8	0.268	0.280
10	0.253	0.268
12	0.246	0.262
%fark	2.84	2.29

Çizelge 4.4. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Basit-Basit için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.912	0.938
6	0.690	0.780
8	0.316	0.332
10	0.767	0.765
12	0.489	0.505
%fark	0.78	0.7

Çizelge 4.5. İç Tüp Ankastre-Basit, Dış Tüp Basit-Ankastre için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.545	0.562
6	0.466	0.482
8	0.437	0.453
10	0.418	0.445
12	0.415	0.441
%fark	0.72	0.90

Çizelge 4.6. İç Tüp Basit-Basit, Dış Tüp Ankastre-Basit için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.599	0.613
6	0.526	0.541
8	0.504	0.521
10	0.499	0.517
12	0.495	0.513
%fark	0.80	0.77

Çizelge 4.7. İç Tüp Basit-Ankastre, Dış Tüp Basit-Basit için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.545	0.562
6	0.466	0.482
8	0.437	0.453
10	0.418	0.445
12	0.415	0.441
%fark	0.72	0.90

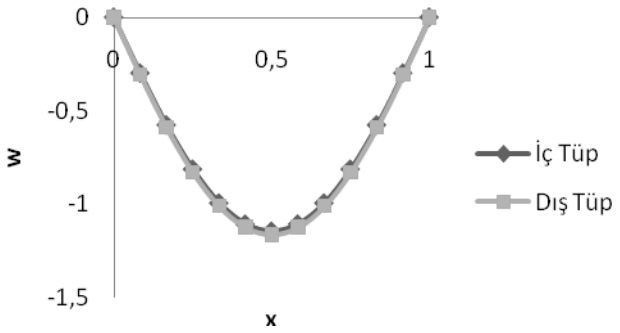
Çizelge 4.8. İç Tüp Ankastre-Ankastre, Dış Tüp Basit-Ankastre için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.518	0.537
6	0.445	0.463
8	0.418	0.435
10	0.405	0.430
12	0.402	0.426
%fark	0.75	0.94

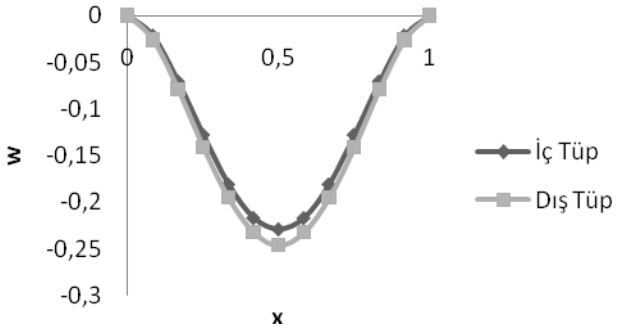
Çizelge 4.9. İç Tüp Ankastre-Basit, Dış Tüp Ankastre-Ankastre için adım sayısı ile boyutsuz çökmesinin değişimi

Parça Sayısı	w_1	w_2
4	0.347	0.361
6	0.279	0.294
8	0.255	0.271
10	0.244	0.260
12	0.238	0.254
%fark	2.52	2.36

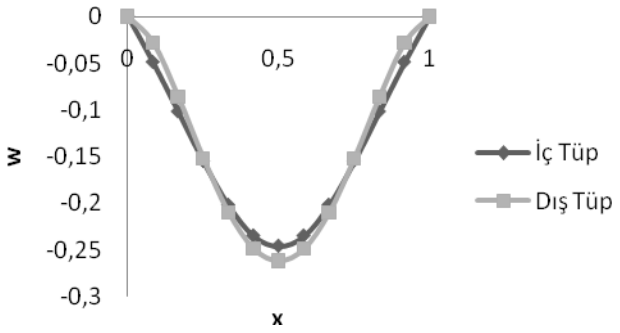
Yakınsamanın ardından farklı mesnetli KNT' lerin elastik eğrileri bulunarak Şekil 4.9-4.19'da verilmiştir. Grafikler incelendiğinde Basit destekli KNT' lerin ankastre mesnetli KNT' lere göre daha çok çöktüğü gözlenmektedir. Tüm kenarların ankastre mesnetli olması durumunda iki tüpün çökmeleri arasındaki fark tüm kenarların basit mesnetli olması durumuna göre daha fazladır. İç tüpün B-B dış tüpün A-A olması durumunda merkeze yakın noktalarda dış tüp daha fazla çökerken kenarlara yakın noktalarda iç tüpün daha fazla çöktüğü gözlenmektedir. Şekiller incelendiğinde tüpler arası çökmenin farklı konumlarda farklı değerler aldığı gözlenmiştir. Bazı şekillerde şu ilginç sonuç gözlenmektedir: Maksimum çökmeler tüm durumlarda dıştaki tüpte daha fazla olurken iç tüpün ankastre dış tüpün basit mesnetli olduğu durumlarda mesnetlere yakın konumlarda iç tüpün çökmesi dış tüpten fazla olmaktadır (Şekil 4.11, 4.14, 4.15, 4.19). Bu durum ankastre mesnetin çökmenin yanında dönmeyi de kısıtlaması sebebiyle açıklanabilir. Bu sonuçlar farklı elektro mekanik sistemlerin tasarımında kullanılabilir.



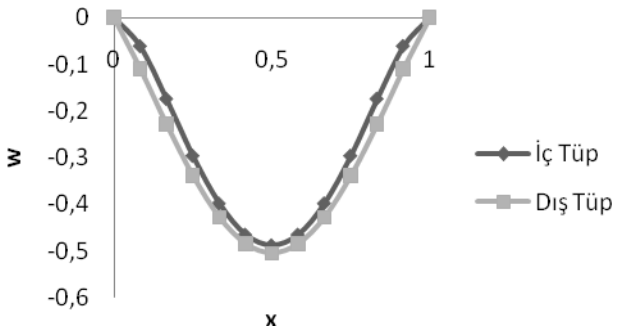
Şekil 4.9. 12 Parçalı, iç tüp Basit-Basit, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



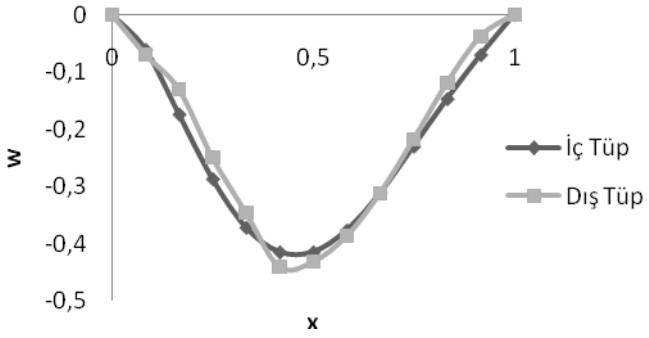
Şekil 4.10. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



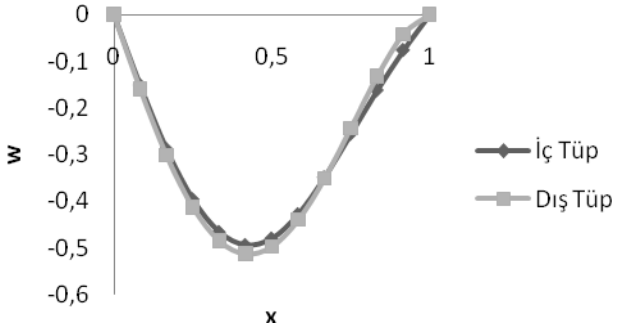
Şekil 4.11. 12 parçalı iç tüp Basit-Basit, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



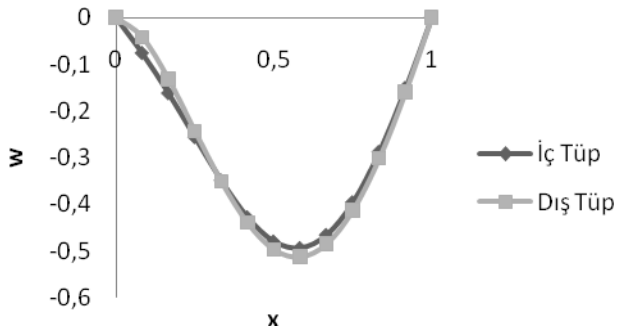
Şekil 4.12. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



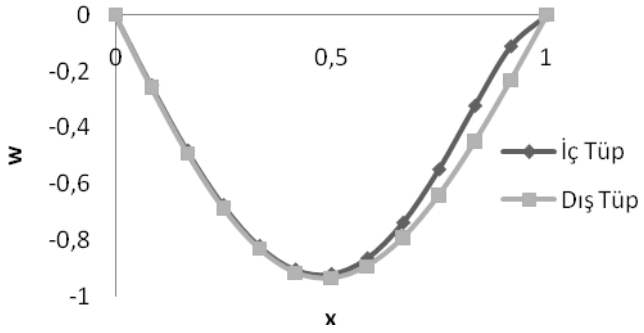
Şekil 4.13. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Basit, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



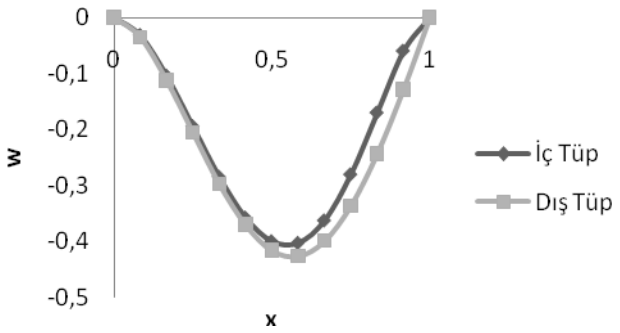
Şekil 4.14. 12 parçalı iç tüp Basit-Basit, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



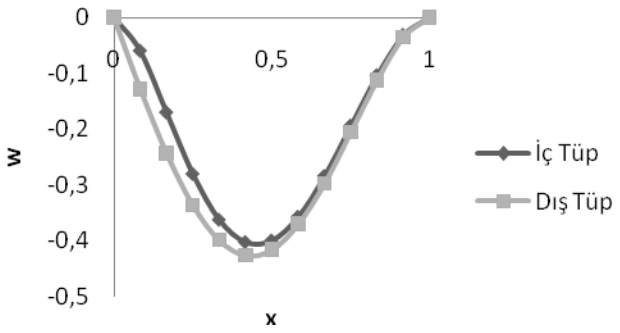
Şekil 4.15. 12 parçalı iç tüp Basit-Basit, dış tüp Ankastre-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



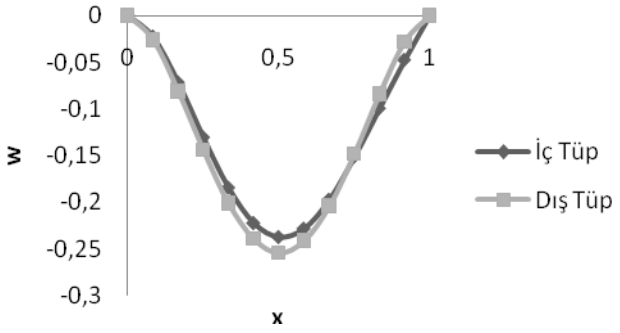
Şekil 4.16. 12 parçalı iç tüp Basit-Ankastre, dış tüp Basit-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



Şekil 4.17. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Ankastre-Basit destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



Şekil 4.18. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Ankastre, dış tüp Basit-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği



Şekil 4.19. 12 parçalı iç tüp Ankastre-Basit, dış tüp Ankastre-Ankastre destekli sınır şartlarındaki bir tüpün çökme grafiği

BÖLÜM 5

SONUÇLAR

Bu çalışmada çok duvarlı karbon nanotüplerin çökme davranışları sürekli ortam Euler-Bernoulli teorisi kiriş modelleri kullanılarak incelenmiştir. Tek duvarlı karbon nanotüplerin düşey doğrultudaki yükler etkisinde çökmesi analitik olarak incelenmiştir. Basit destekli çok duvarlı tüplerin çökmesi Navier tipi çözüm yöntemiyle incelenmiştir. Genel sınır şartlarındaki çok duvarlı karbon nanotüpler için bir Sonlu farklar formülasyonu geliştirilmiştir. Genel formülasyondan sonra farklı sınır şartları ve geometrik parametreler için tek ve iki duvarlı karbon nanotüplerin çökme davranışı incelenmiştir. Sonlu farklar yönteminin çok duvarlı KNT' lerin çökme davranışının modellenmesinde kullanılabileceği gösterilmiştir. Kullanılan kiriş modelinde yerel burkulmalar gözlenememiştir. İleriki çalışmalarda kabuk modellerinin kullanılmasıyla bu tip davranışların da gösterilebileceği umulmaktadır.

KAYNAKLAR

Belin, T. and Epron, F., 2005, 'Characterization Methods of Carbon Nanotubes: a Review' , Materials Science and Engineering B, 119, 105-118.

Delmotte, J. P. S. and Rubio, A., 2002, 'Mechanical Properties of Carbon Nanotubes : a Fiber Digest for Beginners' , Carbon, 40, 1729-1734.

Falvo, M. R., Clary, G. J., Taylor II, R. M., Chi, V., Brooks Jr, F. P., Washburn, S. and Superfine, R., 1997, 'Bending and Buckling of Carbon Nanotubes Under Large Strain' , Nature, 389.

Govindjee, S. and Sackman, J. L., 1999, 'On The Use of Continuum Mechanics to Estimate The Properties of Nanotubes' , Solid State Communications, 110, 227-230.

Harik, V. M., 2001, 'Ranges of Applicability for The Continuum Beam Model in The Mechanics of Carbon Nanotubes and Nanorods' , Solid State Communications, 120, 331-335.

Iijima, S., 1991, 'Helical Microtubules of Graphitic Carbon' , Letters to Nature, 354.

Jin, Y. and Yuan, F. G., 2003, 'Simulation of Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes, Composites Science and Technology, 63, 1507-1515.

Lau, K., Gu, C. and Hui, D., 2006, 'A Critical Review on Nanotube and Nanotube/Nanoclay Related Polymer Composite Materials' , Composites: Part B, 37, 425-436.

Li, C. and Chou, T., 2004, 'Modeling of Elastic Buckling of Carbon Nanotubes by Molecular Structural Mechanics Approach' , Mechanics of Materials, 36, 1047-1055.

Munteanu, L., 'On the Bending of Carbon Nanotubes' , Proceeding of 10th WSEAS Int. Conference on Mathematics and Computers in Business and Economics.

Papanicos, P., Nikolopoulos, D. D. and Tserpes, K. I., 2008, 'Equivalent Beams for Carbon Nanotubes' , Computational Materials Science.

Steven, C.C. ve Raymond P.C., 2003, 'Yazılım ve Program Uygulamalarıyla Mühendisler için Sayısal Yöntemler',McGraw Hill.

Thostenson, E. T., Ren, Z. and Chou, T., 2001, 'Advances in The Science and Technology of Carbon Nanotubes and Their Composites: a Review' , Composites Science and Technology, 61, 1899-1912.

Wang, Q. and Liew, K. M., 2007, 'Application of Nonlocal Continuum Mechanics to Static Analysis of Micro and Nano Structures' , Physics Letters A, 363, 236-242.

Wang, X. Y. and Wang, X., 2004, 'Numerical Simulation for Bending Modulus of Carbon Nanotubes and Some Explanations for Experiment' , Composites: Part B 35, 79-86.

Wong, E. W., Sheehan, P. E. and Lieber, C. M., 1997, 'Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes' , Science, 277.

Yakobson, B. I., Brabec, C. J. and Bernholc, J., 1996, 'Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities beyond Linear Response' , Physical Review Letters, 76, 14.

Yang, J., Jia, X. L. and Kitipornchai, S., 2008, 'Pull-in İnstability of Nano-Switches Using Nonlocal Elasticity Theory' , Journal of Physics D: Applied Physics, 41, 035103.

http://medikalteknoloji.com/

http://nanoturkiye.blogspot.com/

http://web.sakarya.edu.tr/

http://www.slidefinder.net/

ÖZGEÇMİŞ

Seçil SEÇGİN, 1984 yılında Tekirdağ'da doğdu. 1995 yılında Tekirdağ Atatürk İlköğretim Okulu'ndan mezun oldu. Orta öğretimini Tekirdağ Anadolu Lisesi'nde tamamladı. 2007 yılında Celal Bayar Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesinin Kimya Bölümünden mezun oldu. 2007 yılında Trakya Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesinin Makine Mühendisliği Bölümünde yüksek lisans eğitimine başladı.