



I. ULUSAL NANOTEKNOLOJİ KONGRESİ 17-18 HAZİRAN 2011

Tek Katmanlı Bir Grafen Tabakasının Kırılma Davranışının İncelenmesi

Cengiz Baykasoğlu¹, Ata Muğan²

^{1,2} İstanbul Teknik Üniversitesi, Makina Fakültesi, 34437, İstanbul;
¹baykasoglu@itu.edu.tr ²mugan@itu.edu.tr

Özet

Bu çalışmada, tek katmanlı bir grafen tabakasının atomsal temelli sonlu elemanlar modeli kullanılarak kırılma davranışı incelenmiştir. Kullanılan model, grafen tabakasının dış kuvvetlerin etkisi altında, düzlemsel kafes yapısı gibi davrandığı varsayımına dayanmaktadır. Atomlar arası bağlar, kiriş elemanlar kullanılarak modellenmiştir. Kiriş elemanların parametreleri harmonik atomsal potansiyeller kullanılarak bulunmuştur. Analizlerde hatasız ve ortasında iki atom boşluğu hata bulunan tek katmanlı grafen tabakaları incelenmiş ve karbon atomları arasındaki bağların doğrusal olmayan davranışı, geliştirilmiş Morse atomlar arası potansiyel fonksiyonu kullanılarak benzetilmiştir. Yapılan analizler sonucunda, grafen tabakasının kırılma birim uzama ve kırılma gerilmesi değerlerinin mevcut literatürdeki sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmüştür. Mevcut model kullanılarak, istenen her türlü kusurun etkisi incelenebilir.

Anahtar Kelimeler: Tek Katmanlı Grafen, Moleküler Mekanik, Sonlu Elemanlar Analizi, Kırılma Mekanikliği

GİRİŞ

1991 yılında Lijima tarafından ark buharlaştırması yöntemi ile çok katmanlı karbon nanotüpün keşfedilmesiyle beraber [1], değişik bilim dallarından birçok araştırmacı karbon nano yapılar ve bunların uygulamaları hakkında çalışmaya başlamışlardır. Karbon nanotüpün bu kadar ilgi görmesi, büyük oranda istenilen yapısal mükemmelliğin bileşimine sahip olmasındandır. Bu bileşim, mükemmel mekanik, termal ve elektriksel özelliklerden meydana gelir [2]. Grafen tabakaları karbon nanotüplerin birçok mükemmel özelliğine sahiplerdir [3-5]. Grafen, bir karbon allotropudur ve kovalent bağ ile bağlı karbon atomlarının bal peteği kristal kafes yapısı içinde sıkıca paketlenmiş, tek atom kalınlığa sahip düzlemsel yapıdır. Son zamanlarda, grafen tabakalarının seri üretiminin ucuz yöntemler kullanılarak başarılmasıyla birlikte [6], grafen nano yapısının birçok uygulamada kullanımı hızla artmaktadır.

Grafenin mekanik özelliklerinin belirlenmesi, nanografen yapıların tasarımı ve kontrolü için oldukça önemli ve yararlıdır. Grafenin karakterize edilmesi için deneysel ölçümler ve hesaplamalı yöntemler kullanılmaktadır. Deneysel olarak grafenin mekanik özelliklerinin elde edilmesi, yüksek maliyet ve nano boyutlarda ölçüm yapmanın doğurduğu zorluklar gibi dezavantajlardan dolayı, günümüzde hesaplamalı yöntemler önemli araçlar haline gelmişlerdir.

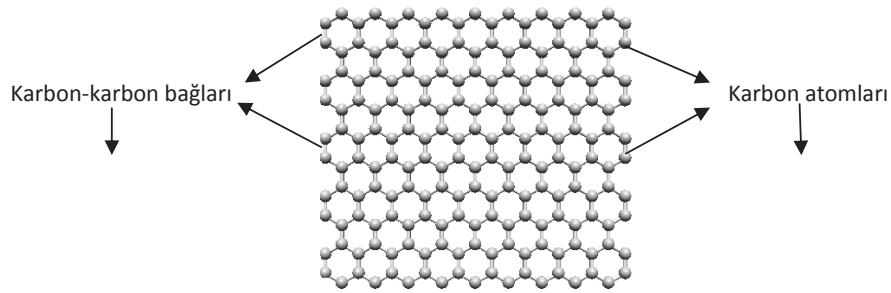
Hesaplamalı yöntemler, genel olarak atomsal ve sürekli ortamlar modelleme yöntemleri olmak üzere iki kategoride sınıflandırılabilir. Atomsal modelleme yönteminde, ab initio ve klasik moleküler dinamik yöntemlerini içeren, kuantum mekanik yöntemleri kullanılır. Bu yöntemler kullanılarak oldukça doğru sonuçlar elde edilebilmesine rağmen, bu yöntemlerin hesaplama yükü çok fazladır. Bu yüzden, pratikte sadece belirli sayıda atom içeren sistemlerde ve çok küçük zaman ölçeklerinde kullanılabilirler [7-9]. Atomsal dünyadan alınan bilgiler kullanılarak,

eşdeğer moleküler-sürekli ortamlar mekaniği modelleri kurulabilir. Bu sayede daha büyük boy ve zaman ölçeklerinde analizler yapılabilir. Bu modelleme yöntemleri genel olarak, atomsal hesaplamalardan elde edilen sonuçlara göre geliştirilen belirli potansiyel fonksiyonlar ile hali hazırda geliştirilmiş olan doğrusal veya doğrusal olmayan kiriş, plak ve kabuk teorilerin birlikte kullanılmasına dayanır [10-19].

Bu çalışmada ikili etkileşimli geliştirilmiş Morse potansiyeli kullanılarak, hatasız ve ortasında iki atom boşluğu hata bulunan tek katmanlı grafen tabakalarının kırılma davranışı incelenmiştir. Atomlar arası bağlar kiriş elemanları kullanılarak modellenmiş ve ilgili parametreler küçük şekil değişimleri için kullanılan ikili etkileşimli harmonik potansiyel fonksiyonları yardımıyla, moleküler mekanik (MM) ve sürekli ortamlar mekaniği modellerinin enerji eşitliğinden elde edilmiştir. Bağların doğrusal olmayan özelliği yazılan algoritma ile adım adım kiriş parametrelerinin değiştirilmesiyle modele dahil edilmiştir. Yapılan analizler sonucunda elde edilen sonuçların mevcut literatürdeki sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmüştür.

TEK KATMANLI GRAFENİN KIRILMA MODELİ

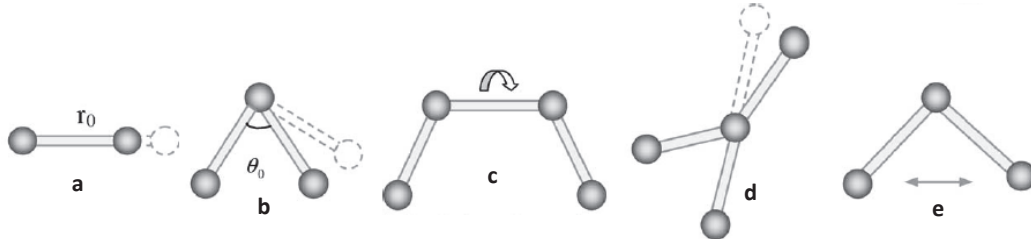
Grafen tabakasının büyük şekil değiştirme durumundaki davranışının modellenebilmesi için katılık matrisi yöntemi[11] ve ilerlemeli kırılma modeli [12] kullanılmıştır. İki boyutlu hegzagonal kafes yapısı şeklinde modellenen tek katmanlı grafen tabakasının eşdeğer modeli Şekil 1’de gösterilmiştir. Burada karbon atomları arasındaki bağları Euler-Bernoulli kiriş elemanları ve karbon atomları düğüm noktaları olarak benzetilmiştir. Kullanılan kiriş elemanının her bir düğüm noktası, x ve y yönlerinde yer değiştirme ve z-ekseni etrafında dönme olmak üzere toplam üç serbestlik derecesine sahiptir.



Şekil 1. Eşdeğer tek katmanlı grafen tabakası modeli.

Sayısal olarak Euler-Bernoulli kiriş elemanlarının katılık matrislerinin belirlenebilmesi için elemanların elastisite modüllerinin (E_i), kesit alanlarının (A), atalet momentlerinin (I) ve başlangıçtaki boylarının (L) (ilk karbon-karbon atom bağ boyu) değerlerinin belirlenmesi gerekmektedir [20]. L , başlangıçta bilinen bir parametre olup 0.1421 nm değerine eşittir.

Kiriş elemanlarının bu bilinmeyen parametreleri, MM potansiyel enerji terimleri ile yapısal mekanik potansiyel enerji terimleri arasında kurulan bağ ile elde edilebilir. Bu yaklaşımda, bağ gerilme, eğilme ve burulma gibi potansiyel enerji terimlerinin birbirinden bağımsız oluşu kullanılarak; bu terimlerin moleküler ve yapısal mekanik karşılıkları birbirine eşitlenir. Şekil 2’de bazı MM potansiyel enerji terimleri şekilsel olarak gösterilmiştir.



Şekil 2. MM potansiyel enerji terimleri: a) bağ eksenel gerilme, b) eğilme, c) iki düzlemli açılı burulma, d) düzlem dışı burulma, e) Van der Waals [11].

Moleküler mekanikte, toplam potansiyel enerjinin genel ifadesi elektrostatik ve Van der Waals etkileri ihmal edilerek, etkileşimli bağların enerjileri toplamı şeklinde ifade edilebilir (Denklem 1).

$$U_{total} = \Sigma U_r + \Sigma U_\theta + \Sigma U_\phi + \Sigma U_\omega \quad (1)$$

Burada, U_r bağ aksenal gerilme enerjisi, U_θ bağ eğilme enerjisi, U_ϕ iki düzlem açılı burulma enerjisi ve U_ω düzlem dışı burulma enerjisini ifade etmektedir. Ayrıca, Denklem 4'de gösterildiği gibi U_ϕ ve U_ω toplamı tek bir terim ile ifade edilebilir.

Küçük şekil değiştirme yaklaşımına göre, MM'de potansiyel enerjilerin basit harmonik formları, enerji terimlerini ifade etmek için yeterlidir.

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

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

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

Burada, k_r , k_θ ve k_τ kuvvet alan sabitleri olup, Δr , $\Delta \theta$ ve $\Delta \phi$ sembolleri sırasıyla bağ boy değişimini, bağ eğilme açısı değişimini ve bağ burulma açısı değişimini ifade etmektedir.

Yapısal mekanikte, sabit kesitli bir kirişin yalnızca çekme, eğilme ve burulma yüklenme durumları için potansiyel enerji ifadeleri sırasıyla Denklem 5-7'de belirtilmiştir.

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

$$U_M = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (\theta_B)^2 \quad (6)$$

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

Burada U_A , U_M ve U_T sırasıyla çekme, eğilme ve burulma enerjilerini, L kiriş boyunu, A , kirişin kesit alanını, E ve G sırasıyla kirişin elastisite ve kayma modüllerini, I ve J , sırasıyla alan atalet momenti ve alan polar atalet momentlerini, ΔL aksenal şekil değiştirmeyi, θ_B toplam dönme açısını, $\Delta \beta$ iki kiriş ucu arasındaki izafi dönmeyi ifade etmektedir.

MM ve yapısal mekanik denklemlerinde benzer potansiyel enerji terimlerinin eşitlenmesi ile aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (8)$$

Düzlem şekil değiştirme problemleri için Denklem 8'deki ilk iki terim kiriş rijitlik değerlerinin belirlenmesi için yeterlidir. Kirişin kesit alanı dairesel ve kiriş boyunca değişmediği varsayılarak ve Denklem 8 kullanılarak aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, \quad d = 4\sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad A = \frac{\pi d^2}{4}, \quad I = \frac{\pi d^4}{64} \quad (9)$$

Bu çalışmada k_r ve k_θ sırasıyla $6.52 \times 10^{-7} \text{ N nm}^{-1}$ ve $8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2}$ olarak alınmıştır [11,21].

Yukarıda açıkça ifade edilen yaklaşıma göre grafenin sadece küçük şekil değişimi problemleri çözülebilir. Kırılma mekaniği problemleri gibi büyük şekil değişimi problemlerinde bu yaklaşım yeterli değildir. Bu yüzden, büyük şekil değiştirme analizlerinde ikili etkileşimli geliştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu [22], hatalı grafenin tabakasının kırılma davranışının incelenmesinde kullanılmıştır. Geliştirilmiş Morse potansiyelinin, Brenner gibi çoklu-cisim etkileşimli potansiyellere göre uygulanabilirliği daha kolaydır ve literatürde sıklıkla kullanılmaktadır [12,13,23].

Geliştirilmiş Morse potansiyelinin bağ aksel gerilme ve bağ eğilme terimleri sırasıyla Denklem 10 ve Denklem 11'de verilmiştir.

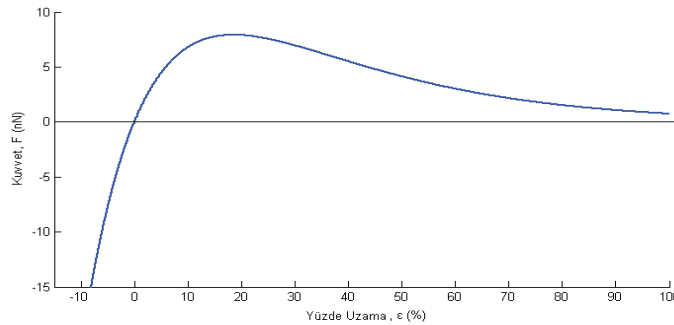
$$U_r = D_e \left\{ \left[1 - e^{-\beta(\Delta r)} \right]^2 - 1 \right\} \quad (10)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2 + \left[1 + k_{\text{sextic}} (\Delta\theta)^4 \right] \quad (11)$$

Denklemlerde [22] ile aynı parametreler kullanılmıştır. Grafen tabakasının kırılma davranışında bağ eğilme gerilmesi teriminin değişiminin etkisi aksel gerilme terimine göre çok küçük olduğundan [12], sadece eğilme terimindeki değişim dikkate alınmıştır. Denklem 10'un türevi alınarak gerilme kuvveti elde edilebilir.

$$F(\Delta r) = 2\beta D_e (1 - e^{-\beta\Delta r}) e^{-\beta\Delta r} \quad (12)$$

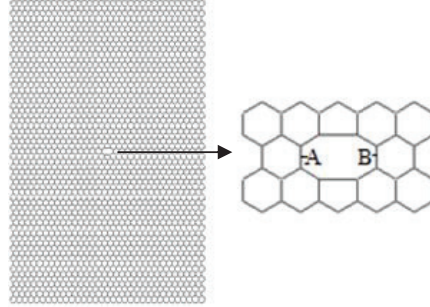
Şekil 3'de Denklem 12 kullanılarak elde edilen kuvvet-birim şekil değiştirme eğrisi gösterilmiştir. Şekilden de açıkça görülebileceği gibi kuvvet-birim şekil değiştirme eğrisi, artan birim şekil değiştirme değeriyle birlikte doğrusallıktan oldukça uzaklaşmaktadır. Kırılma, ayrılma enerjisinden bağımsız olup temel olarak büküm noktasına (atomlar arası kuvvetin maksimum olduğu nokta) bağlıdır ve potansiyelin bu noktadan sonraki değerleri kırılma için önemli değildir [22]. Bu çalışmada büküm noktası olarak %19 yüzde uzama değeri alınmıştır. Bu değer geliştirilmiş Morse potansiyeli kuvvet- yüzde uzama eğrisinde, maksimum kuvvet değerine karşı gelen yüzde uzama değerini ifade etmektedir.



Şekil 3. Geliştirilmiş Morse potansiyeli için kuvvet- yüzde uzama eğrisi.

Geliştirilmiş Morse potansiyeli ile tanımlanan karbon-karbon bağlarının doğrusal olmayan davranışı, kiriş elemanlara aşamalı yaklaşım [12] kullanılarak atanmıştır. Grafen tabakasının bir ucundaki tüm düğüm noktalarının serbestlik dereceleri sınırlandırılmış, diğer ucundaki tüm düğüm noktalarına adimsal olarak çok küçük yer değiştirmeler uygulanmıştır. Elemanların ilk elastisite değerleri Şekil 3'deki eğrinin eğiminden elde edilmiştir. Her bir adımda her bir kiriş elemanının elastisite modülü, $F/A\varepsilon$ ifadesine eşitlenerek bulunmakta ve bu süreç grafen tabakası kırılana kadar devam etmektedir. Burada A kirişin kesit alanı, ε birim şekil değiştirme ve F Denklem 12 kullanılarak elde edilen kuvvet değerini ifade etmektedir. En yüksek doğrulukta çözüm elde etmek için, değişik yer

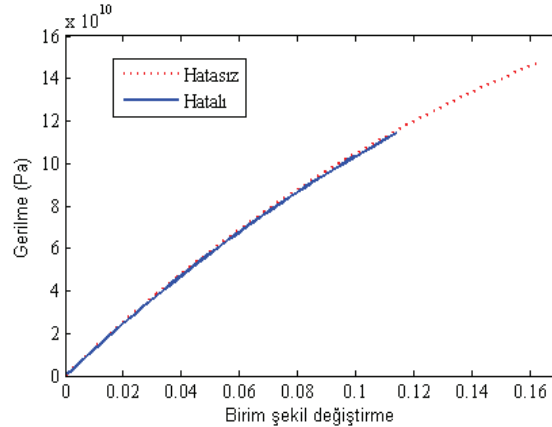
değiştirme adımları için yakınsaklık testi yapılmış ve kullanılabilir en yüksek adım seçilmiştir (Kırılma gerilmesinin yaklaşık %2'si).



Şekil 4. Ortasında iki atom boşluğu hata bulunan tek katmanlı grafen tabakası.

Analizde kullanılan ortasında iki atom boşluğu hata bulunan tek katmanlı bir grafen tabakası Şekil 4'de gösterilmiştir. Ayrıca sadece hatalı bölge civarı görünürlüğünün artırılması için aynı şekilde gösterilmiştir. Analizlerde zigzag tipinde 8.12 nm genişlik ve 12.6 nm yükseklik ölçülerine sahip bir grafen tabakası kullanılmıştır (Şekil 4). Hatalı grafen tabakası modeli toplam 4018 atomdan meydana gelmektedir. Grafen kırılma analizlerinin tümü MATLAB®'de yazılan sonlu elemanlar yöntemi temelli programlar ile gerçekleştirilmiştir.

Şekil 5 analizler sonucu elde edilen, hatalı ve hatasız tek katmanlı grafen tabakalarına ait gerilme-birim uzama eğrilerini göstermektedir. Birim şekil değiştirme $\epsilon=(L-L_0)/L_0$ formülü kullanılarak hesaplanmış olup; burada L_0 ve L sırasıyla grafen tabakasının ilk ve son boyunu ifade etmektedir. Gerilme $\sigma=F_g/bt$, formülü kullanılarak hesaplanmış olup; F_g , grafenin serbestlik dereceleri sınırlandırılmış alt kısmından hesaplanan toplam eksenel çekme kuvvetini, b ve t ise sırasıyla grafenin tabakasının enini ve kalınlığını ifade etmektedir. Tüm hesaplamalarda grafen tabakasının kalınlığı 0.34 nm olarak alınmıştır.



Şekil 5. Hatalı ve hatasız tek katmanlı grafen tabakalarına ait gerilme-birim uzama eğrilerini.

Yukarıda anlatılmış olan yükleme durumunda, hatasız grafen tabakası yaklaşık 150 GPa gerilme ve 0.16 birim şekil değiştirme değerlerinde; hatalı grafen tabakası ise yaklaşık 115 GPa gerilme ve 0.11 birim şekil değiştirme değerlerinde kırılmaktadır. Beklenildiği gibi Şekil 4'de A ve B harfleriyle gösterilen dikey elemanlar ilk olarak kırılmaktadır. Literatürdeki değişik tip hata formları için elde edilen analiz sonuçları ile bu çalışmada bulunan sonuçlar Çizelge 1'de gösterilmiştir.

Çizelge 1. Değişik tip hata yapılarına sahip karbon nanotüp ve grafen literatür çalışma sonuçları.

Yazar(lar)	Kırılma Gerilmesi (GPa)	Kırılma Yüzde Uzaması (%)	Tip	Yöntem
Yu ve diğerleri [24]	11 - 63	10 - 13	Nanotüp	Deneysel
Xiao ve diğerleri [13]	83.3 - 85.9	9.8 - 11.0	Nanotüp	Sayısal
Tserpes ve diğerleri [12]	92.7 - 112	13.1 - 16.7	Nanotüp	Sayısal
Belytschko ve diğerleri [22]	93.5 - 112	15.8 - 18.7	Nanotüp	Sayısal
Zhang ve diğerleri [25]	57.6	16.8	Grafen	Sayısal
Tserpes ve diğerleri [26]	92.44 - 100	11.51 - 15.75	Nanotüp	Sayısal
Mielke ve diğerleri [27]	65 - 101	8.7 - 15.3	Nanotüp	Sayısal
Bu çalışma	115	11	Grafen	Sayısal

Bu çalışmalardan aynı tip hatalı grafen tabakası için yapılan Mielke ve diğerlerinin [27] çalışmalarında yarı deneysel kuantum mekanik ve moleküler dinamik yöntemler kullanılmıştır. Yu ve diğerlerinin [24] yaptıkları deneysel çalışmalarda ne kadar hata olduğu ve nasıl formda olduğu bilinmemektedir. Bu yüzden model doğrulaması için tam olarak fikir vermemektedir. Literatürde grafenin kırılma davranışı ile ilgili çok az çalışma bulunmaktadır. Karbon nanotüp ile grafenin yapıları benzer olup, karbon nanotüp, grafenin silindir şeklinde sarılmış hali olarak düşünülebilir. Bu yüzden referans olarak genellikle karbon nanotüp çalışmaları alınmıştır.

SONUÇLAR ve ÖNERİLER

Bu çalışmada, hatalı bir grafen tabakasının atomsal temelli sonlu elemanlar modeli kullanılarak kırılma davranışı incelenmiştir. Analizlerde ortasında iki atom boşluğu hata bulunan tek katmanlı bir grafen tabakasının, hatasız grafen tabakasına göre yaklaşık % 30 daha düşük gerilme ve yaklaşık % 45 daha düşük birim şekil değiştirme değerlerinde kırıldığı görülmüştür. Literatürde bulunan çalışma sonuçları geniş bir aralıkta yer almakta ve grafenin kırılma davranışı ile ilgili deneysel ve sayısal sonuçlar içeren literatür de çok az sayıda çalışma bulunmaktadır. Literatürdeki mevcut çalışmalarla karşılaştırıldığında modelin tutarlı olduğu görülmektedir. Kırılma gerilmesi değerinin literatür çalışmalarının biraz üzerinde, kırılma birim şekil değiştirme değerinin ise literatür çalışmaları ile oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. İlerideki çalışmalarda değişik tip hata yapılarına sahip grafen tabakaların kırılma davranışının incelenmesi ve mevcut model kullanılarak, çok ölçekli bir modelleme yaklaşımı geliştirilerek daha büyük boyutlardaki sistemlerin davranışlarının belirlenmesi hedeflenmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] Lijima, S., 1991. Helical microtubules of graphitic carbon, Nature, 354, 56–58.
- [2] Popov, V.N., 2004. Carbon nanotubes: properties and application, Mater. Sci. Eng.,43, 61–102.
- [3] Frank, I.W., Tanenbaum, D.M., van der Zande, A.M. and McEuen, P.L., 2007. Mechanical properties of suspended graphene sheets, Journal of Vacuum Science & Technology B, 25, 2558-2561.
- [4] Lee, C., Wei, X., Kysar, W., and Hone, J., 2008. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, Science, 321, 5887, 385-388.
- [5] Castro Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S. and Geim, A.K., 2009. The electronic properties of graphene. Rev. Mod. Phys., 81, 109-162.
- [6] Stankovich, S., Dikin, D.A., Dommett, G.H.B., Kohlhaas, K.M., Zimney, E.J., Stach, E.A., Piner, R.D., Nguyen, S.T., Ruoff, R.S., 2006. Graphene-based composite materials, Nature 442, 282-286.

- [7] Lu, Q., Bhattacharya, B., 2005. The role of atomistic simulations in probing the small scale aspects of fracture— a case study on a single-walled carbon nanotube. *Eng Fract Mech*, 72, 2037–2071.
- [8] Qian, D, Wagner, G.J. and Liu, W.K., 2004. A multiscale projection method for the analysis of carbon nanotubes. *Comput Method Appl Mech Eng*, 193,1603–1632.
- [9] Gates, T.S., Odegard, G.M., Frankland, S.J.V. and Clancy, T.C., 2005. Computational materials: multi-scale modeling and simulation of nanostructured materials, *Compos Sci Technol*, 65, 2416–2434.
- [10] Sakhaee-Pour, A. 2009. Elastic properties of single-layered graphene sheet, *Solid State Communications*, 149, 91-95.
- [11] Li, C. and Chou, T.-W., 2003. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *Internat. J. Solids Structures*, 40, 2487–2499.
- [12] Tserper, K.I. and Papanikos, P., Tsirkas, S.A., 2006. A progressive fracture model for carbon nanotubes, *Composite: Part B*, 373, 662-669.
- [13] Xiao, J.R., Staniszewski, J. and Jr Gillespie, J.W. 2009. Fracture and progressive failure of defective graphene sheets and carbon nanotubes, *Composite Structures*, 88, 602-609.
- [14] Scarpa, F., Adhikari, S. and Phani, A. S., 2009. Effective Elastic Mechanical Properties of Single Layer Graphene Sheets, *Nanotechnology*, 20, 065709
- [15] Odegard, G., M., Gates, T.S., Nicholson, L.M. and Wise, K.,E., 2002. Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials. *Compos Sci Technol*, 62,1869–1880.
- [16] Arroyo, M., Belytschko, T., 2004. Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59, 419–456.
- [17] Arroyo, M., Belytschko, T., 2004. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule, *Physical Review B*, 69(14), 115415.
- [18] Reddy, C.D., Rajendran, S. and Liew, K.M., 2005. Equivalent continuum modeling of graphene sheets, *International Journal of Nanoscience*, 4, 631-636.
- [19] Hemmasizadeh, A., Mahzoon, M., Hadi, E. and Kandan, R., 2008. A method for developing the equivalent continuum model of a single layer graphene sheet, *Thin Solid Films*, 416, 7636-7640.
- [20] Hughes, T. J.R., 1987. *The finite element method*, Prentice-Hall.
- [21] Tserpes, K.I. and Papanikos, P., 2005. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes, *Composites Part B*, 36, 468–477.
- [22] Belytschko, T., Xiao, S.P., Schatz, G.C., and Ruoff, R.S., 2002. Atomistic simulations of nanotube fracture., *Phys. Rev. B*, 65, 235430
- [23] Xu, M., Gracie, R., and Belytschko T., *Multiscale modeling with extended bridging domain method*, Chapter in *Bridging the Scales in Science and Engineering*, Oxford Press. 1-32.
- [24] Yu, M.F., Files, B.S., Arepalli, S., and Ruoff, R.S., 2000. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. *Phys Rev Lett*, 84, 5552–5.
- [25] Zhang, S., Mielke, L.S., Khare, R., Troya, D., Ruoff S.R., Schatz, C.G., and Belytschko T., 2005. Mechanics of defect in carbon nanotubes: Atomistic and multiscale simulation, *Phys. Rev. B*, 71, 115403.
- [26] Tserper, K.I. and Papanikos, P. 2007. The effect of Stone-Wales defect on the tensile behavior and fracture of single-walled carbon nanotubes, *Composite Structures*, 79, 581-589.
- [27] Mielke, L.S., Troya, D., Zhang, S., Li, J.L., Xiao, S., Car, R., Ruoff, R.S., Schatz, C.G., and Belytschko T., 2004. The role of vacancy defects and holes in the fracture of carbon nanotubes, *Chemical Physics Letters*, 390, 413-420.

ÖZGEÇMİŞ

Cengiz Baykasođlu - Lisans öğrenimini 2003 yılında Dokuz Eylül Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği Bölümünde, yüksek lisans öğrenimini 2006 yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Makine Mühendisliği A.B.D.'de tamamlamıştır. 2007 yılından beri İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Makine Mühendisliği A.B.D'de doktora öğrenimine devam etmekte ve aynı üniversitede asistan olarak görev yapmaktadır. Nano mekanik, sonlu elemanlar analizi, biyomekanik, üretim modelleme ve benzetim konularında çalışmaktadır.

Ata Muđan - 1986 yılında İstanbul Teknik Üniversitesi Makina Fakültesi Makine Mühendisliği Bölümünde lisans öğrenimini, 1990 ve 1992 yıllarında University of Michigan, Ann Arbor, Makine Mühendisliği ve Uçak Mühendisliği Bölümlerinde iki ayrı yüksek lisans derecesini, 1995 yılında aynı üniversitede Makine Mühendisliği bölümünde doktora derecesini tamamlamıştır. 1997 yılında İstanbul Teknik Üniversitesi Makine Fakültesinde Yrd. Doç. kadrosuna atanmış, 2002 yılında aynı üniversitede Doç. ünvanını almış, 2008 yılında yine aynı üniversitede Prof. kadrosuna atanmış ve halen aynı üniversitede görev yapmaktadır. Yapısal analiz, hesaplamalı mekanik, sonlu elemanlar analizi, optimum tasarım ve mekatronik konularında çalışmaktadır.