



# Pt-Al/Grafen-KNT Nanoyapılarının Mekanik Performansı; Bir Moleküler Dinamik Simülasyonu

## *Mechanical Performance of Pt-Al/Graphene-CNT Nanostructures; A Molecular Dynamics Simulation*

Ünal Değirmenci<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Bingöl Üniversitesi, Teknik Bilimler MYO, Makine ve Metal Teknolojileri Bölümü, [udegirmenci@bingol.edu.tr](mailto:udegirmenci@bingol.edu.tr)  
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1480-2488>

### MAKALE BİLGİLERİ

*Makale Geçmişi:*

Geliş 04 Kasım 2023  
Revizyon 26 Kasım 2023  
Kabul 27 Kasım 2023  
Online 29 Mart 2024

*Anahtar Kelimeler:*

*Metal-Karbon nanokompozit:  
Mekanik davranış: Deformasyon  
özellikleri: Moleküler Dinamik.*

### ÖZ

Metallerle karbon temelli yapıların bir araya getirilmesi ile oluşturulan hibrit nanokompozitler, malzeme bilimi ve mühendisliğinde heyecan verici bir araştırma alanı oluşturmuştur. Bu kompozitler, metallerin dayanıklılığı ile karbon bazlı yapıların hafiflik ve yüksek mukavemeti arasında bir denge sağlayarak benzersiz mekanik özelliklere sahip olurlar. Bu nedenle yeni Metal –Karbon nanoyapılarına eğilim halen devam etmektedir. Bu çalışmada, Platin ve alüminyum plakalar arasına yerleştirilen kovalent bağlı grafen-karbon nanotüp (KNT) yapılarından oluşan yeni bir Metal-Karbon nanoyapısı sunulmaktadır. Ayrıca, yapının mekanik özelliklerini ve alta yatan deformasyon mekanizmalarını araştırmak için, farklı çaplara sahip KNT (örn. KNT(6x6), KNT(8x8), KNT(10x10), KNT(12x12)) içeren numunelerin çekme ve basınç deneyleri gerçekleştirilir. Sonuçlara göre, G-KNT yapılarının Pt-Al yapısının çekme davranışını her iki doğrultuda (KNT ve Grafen) artırdığı görülmüştür. KNT doğrultusunda çekme yüklemeleri için KNT çapı azaldıkça hibrit yapıların elastik modülü ve maksimum gerilme değerleri artarken grafen doğrultusunda ise maksimum gerilme değerleri ve süneklikleri artmaktadır. Basma dayanımı açısından ise lineer bölgede genel olarak KNT çapı arttıkça dayanımın arttığı yoğunlaşma bölgesinde ise daha küçük çaplı KNT içeren yapıların daha iyi basma dayanımı sergilediği görülmüştür. Bu çalışma ile Pt-Al yapısına kıyasla daha hafif ve daha yüksek çekme dayanımına sahip bir nanoyapı sunulmuştur.

### ARTICLE INFO

*Article history:*

Received 04 November 2023  
Received in revised form 26 November 2023  
Accepted 27 November 2023  
Available online 29 March 2024

*Keywords:*

*Metal-Carbon nanocomposite:  
Mechanical behavior: Deformation  
properties: Molecular Dynamics.*

*Doi: 10.24012/dumf.1386136*

\* Sorumlu Yazar

### ABSTRACT

Hybrid nanocomposites, created by combining metals and carbon-based structures, have created an exciting field of research in materials science and engineering. These nanocomposites have unique mechanical properties, providing a balance between the durability of metals and the lightness and high strength of carbon-based structures. Therefore, the trend towards new metal-carbon nanostructures is still ongoing. In this study, a new metal-carbon nanostructure consisting of covalently bonded graphene-carbon nanotube (CNT) structures placed between platinum and aluminum plates is presented. Additionally, to investigate the mechanical properties and deformation mechanisms of the structure, tensile and compression tests are carried out on samples containing CNTs with different diameters (e.g. CNT(6x6), CNT(8x8), CNT(10x10), CNT(12x12)). According to the results, it was observed that G-CNT structures increased the tensile behavior of the Pt-Al structure in both directions (CNT and Graphene). As the CNT diameter decreases for tensile loading in the CNT direction, the elastic modulus and maximum stress values of the hybrid structures increase, while in the graphene direction, the maximum stress values and ductility increase. In terms of compressive strength, it has been observed that in the linear region, as the CNT diameter increases, the strength generally increases, and in the densification region, structures containing smaller diameter CNTs exhibit better compressive strength. With this study, a nanostructure that is lighter and has higher tensile strength compared to the Pt-Al structure has been presented.

## Giriş

Farklı malzeme bileşenlerinin birleştirilmesiyle oluşturulan hibrit kompozitler, üstün mekanik özelliklere sahip olmaları nedeni ile son yıllarda, malzeme bilimi ve mühendisliği alanında yeni nesil malzemeler olarak büyük önem kazanmaktadır[1, 2]. Özellikle metallerle karbon bazlı yapıların bir araya getirildiği hibrit kompozitler, hem metalin dayanıklılığından hem de karbonun hafifliği ve yüksek mukavemetinden faydalanarak benzersiz özellikler sunmaktadır[3-6]. Grafen, fulleren ve Karbon nanotüp (KNT) gibi karbon içerikli yapılar düşük yoğunluk, yüksek gerilme direnci, yüksek elastik modül ve iyi sünekliğe sahiptirler[7, 8]. Bu nedenle araştırmacılar tarafından gerek birbirleri ile[9, 10] gerekse de metal [11, 12] ve polimer[13-15] gibi diğer yapısal malzemelerle bir araya getirilerek hibrit kompozit formları oluşturulmaya çalışılmıştır.

Hibrit yapılarda, yapıların kararlılığını, mekanik performansını, termal ve elektriksel iletimini artırmak için, farklı karbon yapıların kendileri arasında kovalent bağ oluşturması ile güçlü bir uyumun sağlanması özellikle önemlidir[16-18]. Kovalent bağlı hibrit karbon yapıları örnek olarak KNT-grafen, grafen-fulleren ve grafen-KNT-fulleren hibrit yapıları örnek verilebilir. Bu yapıların bir araya getirilmesi ile yapıların mekanik, termal ve elektronik olarak pek çok özelliği iyileştirilmektedir. Ayrıca, Kemik yaralanmaları sonucu hasarlı kemik dokuları için alternatif süngerimsi kemik doku malzemeleri geliştirmek amacı ile karbon bazlı nano gözenekli köpükler üzerinde çalışılmaktadır [19]. Çelebi vd. [20] rastgele KNT ağların birleşiminden oluşan bir yapı sunup bu yapının mekanik özelliklerini moleküler dinamik (MD) simülasyonları kullanarak incelemişlerdir. Çapraz bağlı KNT'ler arasında kovalent bağ oluşumu ile daha yüksek young modüle sahip bir yapının elde edilebileceği gösterilmiştir. Fan ve ark. [21], kimyasal buhar biriktirme (CVD) tekniği kullanarak 3D grafen/KNT sandviç yapısı elde etmiş ve termal ve mekanik özelliklerini incelemişlerdir. Benzer şekilde, Xu ve ark. [22] da karbon nanotüpler ve grafen levhalar tarafından inşa edilen yapının mekanik ve termal performansını araştırdı. Dimitrakakis ve ark. [23], ise grafen tabakaları arasına dikey olarak yerleştirilmiş KNT'lerden oluşan yeni bir 3D ağ yapısının hidrojen depolama performansını inceledi. Grafen ve KNT yapılarının yanı sıra Grafen-fulleren hibrit yapıları da çalışılmaktadır. Bu kapsamda, Değirmenci et al.[9] grafen birimleri üzerine farklı boyutlarda fullerenlerin bağ yapması ile elde edilen çok sayıda GNR-F (grafen-fulleren) birimlerin rasgele konumlandırılarak birbiri arasında bağ oluşturulması ile yeni bir hibrit yapı modellemiştir ayrıca, bu yapıların mekanik özelliklerini MD simülasyonları ile araştırarak fulleren boyutlarının etkilerini incelemişlerdir. Önerdikleri GNR-F ağ nanoyapılarının, çekme yükünde sünek bir yapıya sahip olduğunu, sıkıştırma tepkisinin ise kayda değer enerji emme kapasitesine sahip köpük benzeri bir davranış sergilediğini göstermişlerdir. Bir başka çalışmada Kırcı [24] ise paralel grafenler arasına kovalent olarak bağlanmış fulleren birimlerinden oluşan yeni bir karbon bazlı hibrit malzeme önermiş ve MD simülasyonları kullanarak termodinamik kararlılıklarını incelemiştir. Ayrıca, sandviç yapı malzeme sisteminin mekanik özelliklerini sıkıştırma testleri gerçekleştirilerek incelenmiştir. Fulleren boyutunun

sıkıştırma tepkisi üzerindeki etkisini araştırmış ve daha büyük fullerenlere sahip numunelerin daha yüksek enerji emme kapasitesine sahip olduğunu göstermiştir. Bunların yanı sıra bu yapıların üçlü hibrit formları da çalışılmaktadır. Örneğin, Değirmenci vd.[25] grafen nanoribbonların KNT birimleri etrafında farklı geometrik desenlerde düzenlenmesiyle yeni bir hibrit gözenekli grafen-karbon nanotüp (G-CNT) hibrit yapıların tasarımı ile termal ve mekanik analizini sunmuşlardır. Ayrıca dolgu birimi olarak fullerenler kullanarak yapıların basınç dayanımı ve enerji soğurma kapasitesini artırmayı amaçlamışlardır. Yapılar dikkate değer termal ve mekanik özelliklere sahiptir.

Karbon temelli yapıların kendi arasında oluşturduğu hibrit yapıların yanı sıra metallerle yapmış olduğu hibrit nano kompozitler de gelişmiş özellikler gösterdiği için büyük ilgi görmektedir. Metal malzemeler içerisinde özellikle alüminyum, hafif ve iyi mekanik özellik göstermesinden dolayı temel kompozit malzeme olarak seçilmektedir. Örneğin, Pal vd.[26] moleküler dinamik simülasyonları kullanarak farklı sıcaklıklar (10 K, 300 K ve 681°C) altında nanokristal (NC) Alüminyum-KNT yapılarının mekanik özelliklerini araştırmışlardır. NC-Al numunesine göre KNT gömülü NC-Al numunelerinde hem mukavemette hem de süneklikte bir artış olduğunu görmüşlerdir. Bir diğer çalışmada, Park vd. [27] MD simülasyonları ile KNT'ler ile güçlendirilmiş Al kompozitlerin gerilme davranışlarını karakterize etmişlerdir. KNT'lerin konfigürasyonlarına bağlı olarak Al'un elastik modülü gibi mekanik özellikleri üzerindeki etkilerini incelemiş ve KNT katkısının artış sağladığı görülmüştür. KNT'lerin yanı sıra grafenlerin alüminyuma katılması ile elde edilen kompozitler üzerine de çalışmalar yapılmıştır. Wang ve ark. [11], grafen-alüminyum kompozitlerin çekme dayanımını incelemiş ve çekme dayanımının, saf alüminyuma göre %62 daha fazla olduğunu belirlemiştir. Shin ve ark.[28] ise birkaç katmanlı grafen ve KNT'leri takviye malzemesi olarak kullanarak alüminyum kompozit yapısının gerilme dayanımını artırmaya çalışmıştır. Bu alanda fulleren-alüminyum kompozitlerin de araştırıldığını görmekteyiz [29, 30]. Ertürk vd. [31] alüminyum bloklar arasına yerleştirilmiş kovalent olarak bağlanmış fulleren-grafen sandviç yapısından oluşan bir yapı oluşturup çekme ve basma gibi mekanik özelliklerini MD simülasyonları ile farklı fulleren boyutu ve yükleme hızlarında incelemiştir. Sonuç olarak, hem çekme hem de basma yüklemeleri için, fullerenlerin boyutu arttıkça hibrit yapının yükleme hızına çok daha duyarlı hale geldiği bulunmuşlardır.

Karbon temelli hibrit yapıların yapısal kararlılığı ve özellikleri üzerine yukarıda belirtilen pek çok çalışmanın yanı sıra karbon metal kompozit yapılarında çalışıldığı görülmektedir. Fakat hala bu alandaki çalışmalar oldukça sınırlıdır. Bu nedenle, bu çalışmada platin ve alüminyum plakalar arasına yerleştirilen kovalent bağlı Grafen-KNT yapılarının MD simülasyonları ile modellenmesi ve mekanik özelliklerinin araştırılması amaçlanmıştır. Bu yeni karbon-metal hibrit nanoyapısı Pt-Al-GKNT (Platin-Alüminyum-Grafen-KNT) olarak adlandırılır. Ayrıca bu çalışmada, Al ve grafen boyutları sabit tutularak KNT çapları ve sayılarının mekanik performans üzerindeki etkisini belirlemek amacıyla, farklı modeller oluşturulmuştur. Bu yapıların deformasyon özellikleri ve mekanik davranışlarını

incelemek için simülasyonlar sıkıştırma ve çekme yüklemesi altında gerçekleştirilmiştir. KNT etkisinin yanı sıra önerilen yapının mekanik özellikleri Pt-Al yapısındaki ile kıyaslanarak mekanik özelliklerdeki gelişme ortaya koyulmaya çalışılmıştır.

## Modelleme ve simülasyon detayları

### Atomistik modelleme

Bu çalışmada önerilen Pt-Al-GKNT hibrit yapıları platin ve alüminyum plakalar arasında grafen levhalara kovalent olarak bağlanmış KNT'ler içeren sandviç yapılı bir kompozit yapıdan oluşmaktadır. Pt-Al-GKNT yapılarına ait örnekler Şekil 1'de gösterilmektedir. Önerilen hibrit yapının atomistik modelleme süreci dört ana aşamadan oluşmaktadır. İlk aşamada grafenlerin (GNR'ler) ve karbon nanotüplerin (KNT) atomistik koordinatları ayrı ayrı üretilir. Bu aşamada 20x20 nm boyutlarında tek katmanlı 2 adet grafen ve farklı çaplarda 10nm boyundaki KNT yapılarının Visual Molecular Dynamics (VMD) [32] yazılımı kullanılarak atomik koordinatları elde edilmiştir. İkinci adımda, grafen levhalar arasında dikey olarak belirli sayılarda KNT yerleştirilerek ısı kaynak işlemi yardımı ile kovalent bağ oluşturularak G-KNT yapıları oluşturulmuştur. Bir sonraki aşamada, grafen levhaların hem üst hem de alt serbest yüzeylerine 2.5nm kalınlığında referans [33]'de verildiği üzere alüminyum ve karbon atomları arasındaki bağ uzunluğu 0.024nm olacak şekilde mesafe bırakılarak iki alüminyum levha oluşturulur. Böylece Al-G-KNT yapıların atomik modeli oluşturulmuştur.

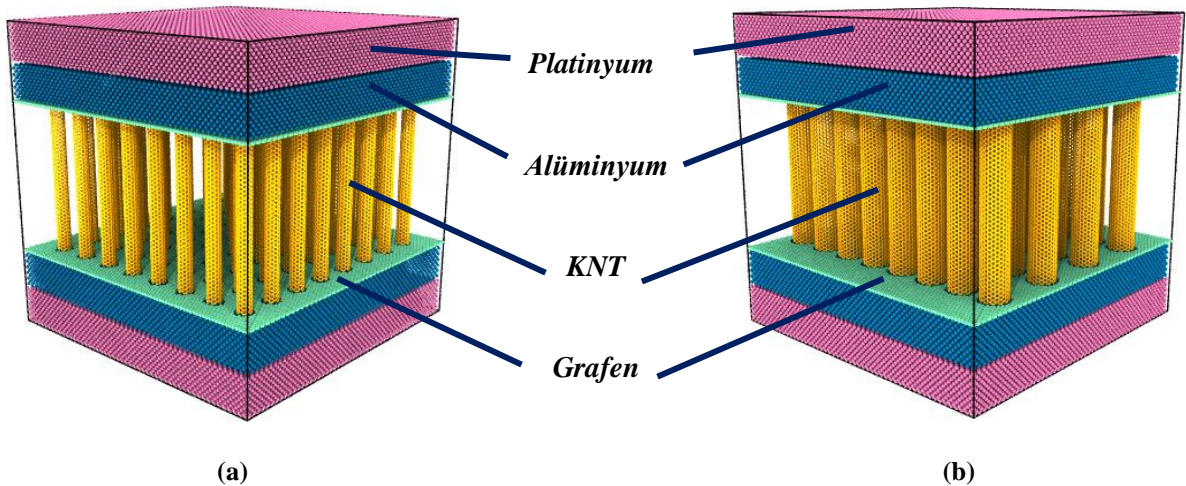
Pt-Al-GKNT yapıları ise Al-G-KNT modellerinde Al levhalarının oluşturulmasına benzer şekilde Al levhaların her iki yüzeyine 2.5 nm kalınlıklarında Pt levhası oluşturularak elde edilmiştir. Son aşamada ise yapı oda sıcaklığında (300 K) minimize edilerek dengelenir ve kararlılığı incelenir. Hibrit nanoyapılara ait örnek resimler Şekil 1'de gösterilmektedir. Bu çalışmada, farklı KNT boyutlarının etkisini görebilmek için uzunlukları eşit olan dört farklı KNT tipi (KNT6x6, KNT8x8, KNT10x10 ve KNT12x12) kullanılarak aynı atomik yoğunluğa sahip dört farklı Pt-Al-GKNT yapısı üretilmiştir. Bu amaçla, yaklaşık olarak eşit atom yoğunluğunu sağlayabilmek için Grafen'lerin boyutları ve KNT'lerin sayısı küçük çaplı KNT'lerden çok sayıda büyük çaplı KNT'lerden ise daha az sayıda olacak şekilde düzenlenmiştir. Yapılarda kullanılan karbon nanotüplere ait çap değerleri ve atom sayıları Tablo 1'de verilmiştir.

KNT ve grafen levhalar arasında oluşturulan kovalent bağ, tavlama işlemi olan ısı kaynak yöntemi [9, 34] kullanılarak gerçekleştirilir. Bu tavlama işlemi grafen levhalar ile KNT sınırındaki bağlantı bölgelerine yüksek sıcaklıklar uygulanması ile gerçekleştirilir. Grafen ve KNT arasında oluşturulan bağlar ve bağlantı bölgeleri örneği Şekil 2'de gösterilmektedir.

Analiz esnasında ısı kaynak işlemi daha düşük sıcaklık ve zaman aralığında gerçekleştirerek hızlandırmak için, KNT'lerin grafen levha ile kesiştiği dairesel bölgelerde grafenlerden atomlar çıkarılarak deformasyonlar oluşturulur. Bu sayede oluşturulan sarkık bağlarla daha kolay yeni bağlar oluşturabilmek mümkündür.

Tablo 1. Modellere göre kullanılan KNT'lere ait çap değerleri ve atom sayıları

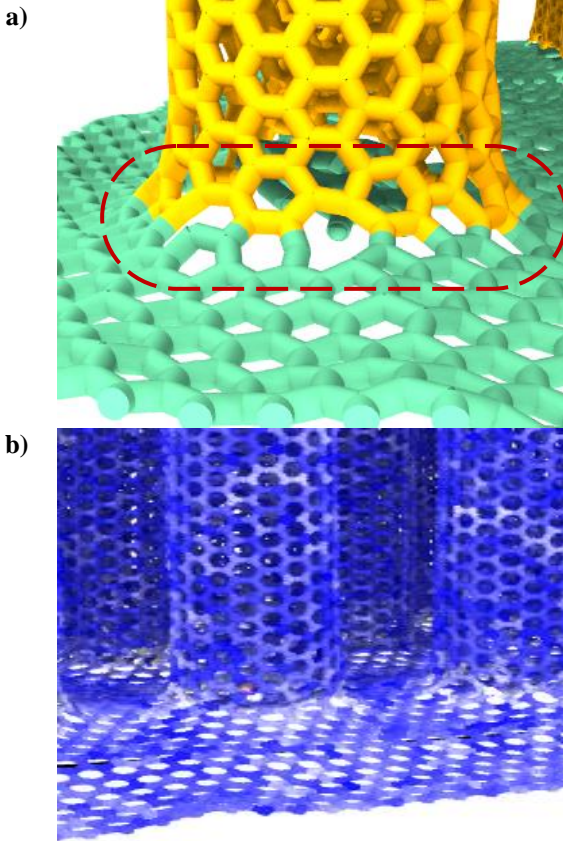
Modeller	Grafen boyutu (nm)	KNT Çapı (nm)	Doğrultuya göre KNT Sayısı		KNT sayıları	KNT Atom sayıları
			X	Y		
Pt-Al-GKNT6x6	20x20	0.816	8	8	64	62976
Pt-Al-GKNT8x8	20x20	1.086	8	6	48	62976
Pt-Al-GKNT10x10	20x20	1.356	8	5	40	65600
Pt-Al-GKNT12x12	20x20	1.626	8	4	32	62976



Şekil 1. Temsili Pt-Al-GKNT yapıları (a) Pt-Al-GKNT(6x6), (b) Pt-Al-GKNT(12x12).

## Simülasyon Detayları

Termal kaynak ve mekanik testlerin MD simülasyonları için, Sandia National Laboratories tarafından geliştirilen bir açık kaynak kodu olan Büyük Ölçekli Atomik/Moleküler Büyük Paralel Simülatör (LAMMPS), kullanılır[35]. Atomlar arasındaki etkileşimi sağlamak için interatomik potansiyeller kullanılır. Metal atomları (Pt-Pt, Al-Al ve Pt-Al) arasındaki kuvvet hesaplamaları için uygun bir potansiyel dosyasına sahip Gömülü Atom Yöntemi (EAM) kullanılır. Karbon atomları (Grafen ve KNT) arasındaki etkileşim için ise Uyarlanabilir Moleküler Reaktif Ampirik Sınır Serisi (AIREBO), potansiyeli kullanılır. AIREBO potansiyeli Brenner vd. tarafından geliştirilen REBO potansiyeline burulma ve LJ etkileşimlerinin eklenmesi ile elde edilen bir potansiyeldir[34, 36]. Ayrıca, AIREBO potansiyeli analiz esnasında yapıda oluşan ve kopan bağları simule edebildiği için dinamik bir sistem topolojisini iyi bir şekilde temsil etmektedir[37]. Bu nedenle yeni bağların oluşumunu doğru bir şekilde tahmin edebildiği için tercih edilmiştir. Karbon ve Platin atomları arasındaki hibrit etkileşimler için Lennard jones potansiyeli [38] kullanılırken karbon ve alüminyum atomları arasındaki hibrit etkileşimler için Mors potansiyeli kullanılır [39]. Termal kaynak prosedüründe sistemin termal dengesini sağlamak için Nosé-Hoover termostat ve kanonik topluluk (NVT) sistemi, termodinamik özellikler olarak tanımlanır.



Şekil 2. KNT(10x10) ve grafen tabakaları arasında oluşturulan kovalent bağlar, a) ilk model bağ görünümü, b) deformasyon anındaki bağ görünümü.

Grafen tabakaları ile KNT'ler arasında kovalent bağları oluşturmak için grafen ve ona karşılık gelen KNT bölgesine termal kaynak işlemi uygulanır.

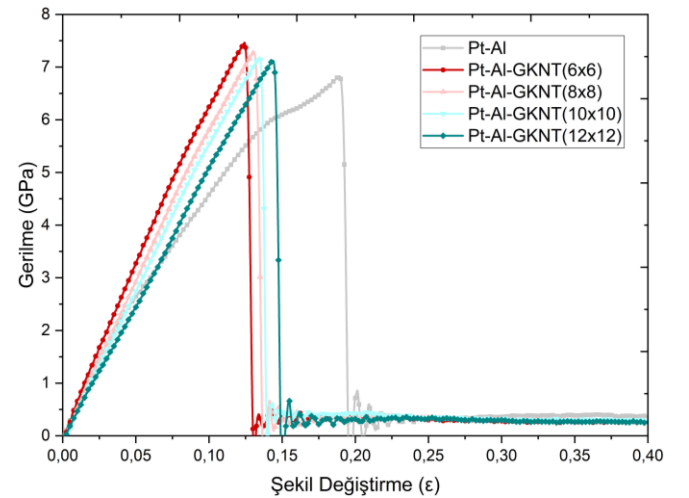
Isıl kaynak işleminde ilk olarak termal gevşemeyi gerçekleştirmek için ortam oda sıcaklığında (300K) 40 pikosaniye (ps) tutulur. Ardından füzyondaki atomların sıcaklığı kademeli olarak (her kademe için 300K) referans sıcaklığa (1200 K) yükseltilir. Kaynak bölgesindeki atomlara kovalent bağ oluşumu için enerji sağlamak üzere 50 ps süreyle bu sıcaklıkta sabit tutulur. Daha sonra, sıcaklığı 30 ps içinde 1200 K'den 300 K'ye düşürmek için aşamalı soğutma yapılır. Son olarak, 300 K'de 40 ps için rahatlatılır. Böylece bağlantı bölgelerindeki bağların stabilitesi incelenir [18]. Isıl kaynak işlemi sonunda KNT'ler ve grafenler arasında oluşan bağlar Şekil 2'de gösterilmektedir.

Atomik modeller oluşturulduktan sonra serbest enerji profilleri izlenerek numunelerin termodinamik stabilitesini incelemek için atomistik modeller, Nose-Hoover termostatı ve izotermal-izobarik (NPT) topluluğu kullanılarak 100 ps boyunca oda sıcaklığı şartlarında termalize edilir. Bu aşamada atom başına düşen toplam enerji değerleri zamana bağlı olarak izlenir. Numunelerin termodinamik uygulanabilirliği sağlandıktan sonra mekanik testlere geçilir. Mekanik testlerde çekme ve basma yükleri numunelerin sıcaklığı NVT entegrasyonu ile  $0.001 \text{ ps}^{-1}$  yükleme hızında oda sıcaklığı şartlarında sabit tutularak uygulanır. Analizler sonucunda her iki yükleme durumu için Young modülü (E), akma gerilimi ( $\sigma_y$ ) ve nihai gerilim ( $\sigma_u$ ) değerleri hesaplanarak mekanik özellikleri karşılaştırılır. Ayrıca mekanik analizler KNT'lerin enine (Y) ve boyuna (Z) doğrultuları için ayrı ayrı gerçekleştirilerek doğrultu etkileri de incelenmiştir.

## Sonuçlar ve tartışma

### Çekme Davranışı

Bu çalışmada ilk olarak nanoyapıların termodinamik olarak kararlı olduklarını incelemek için 300 K'de enerji profilleri yeterince uzun bir süre incelenmiştir. Önerilen yapıların enerji değerlerinin hemen hemen sabit kaldığı görülmektedir. Ayrıca, önerilen ilk tasarıma kıyasla belirgin bir yapısal değişiklik olmaması, termodinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Yapıların kararlı olduğu anlaşıldıktan sonra mekanik testler gerçekleştirilmiştir.



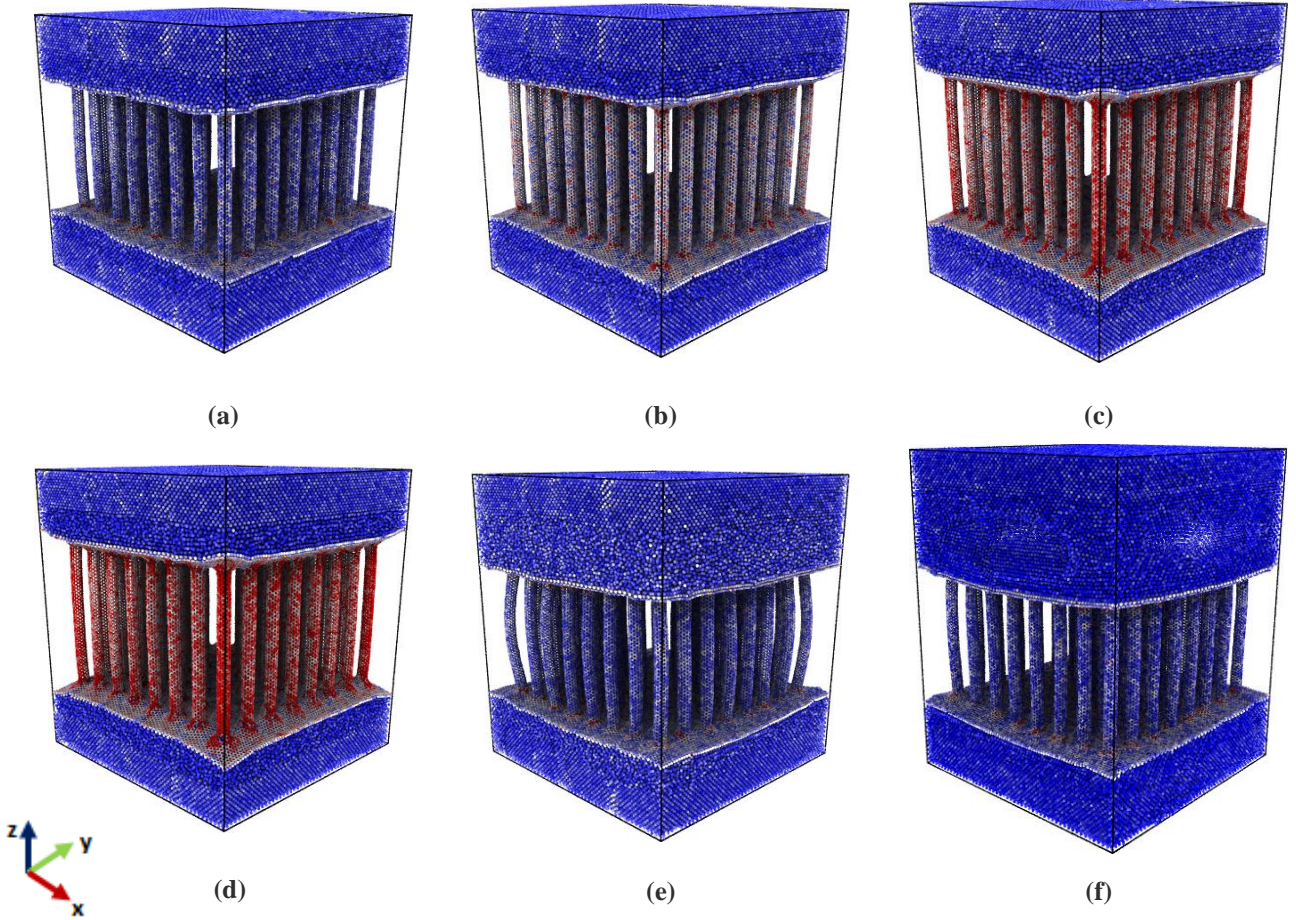
Şekil 3. Pt-Al-GKNT yapılarının Z doğrultusundaki (KNT doğrultusu) çekme gerilme-şekil değiştirme eğrileri.

Platin-alüminyum(Pt-Al) kompozit yapısı ile dört farklı KNT içeren Pt-Al-GKNT yapılar için MD simülasyonlarından elde edilen çekme gerilme-şekil değiştirme eğrileri, Şekil 3'te verilmiştir. Yapıların KNT doğrultusundaki gerilme şekil değiştirme eğrileri incelendiğinde Pt-Al yapılarına GKNT yapısının eklenmesi ile elde edilen Pt-Al-GKNT yapıların sünekliği azalsa da mekanik dayanımlarının arttığı görülmüştür. Modellerde yer alan KNT çapı arttıkça lineer ve maksimum gerilme bölgesinde çekme dayanımının azaldığı sünekliğin ise arttığı gözlemlenmiştir. Bu durum yapıdaki KNT çaplarının artmasına bağlı olarak sayılarındaki azalmadan kaynaklanabilir. Maksimum gerilme mukavemeti açısından en yüksek değer küçük fakat çok sayıda KNT içeren Pt-Al-GKNT(6x6) yapısına aittir. Tokluk açısından yapılar arasında büyük değişimler gözlemlenmemiştir. Süneklik açısından ise KNT (12x12) içeren yapının daha iyi olduğu görülmüştür.

GKNT yapılarının ve KNT boyutlarının mekanik özellikler üzerindeki etkilerinin daha iyi anlaşılabilmesi için Tablo 2'de verilen elastik modülü, akma mukavemeti ve maksimum gerilme değerleri incelendiğinde GKNT yapılarının Pt-Al yapısının elastik modülü ve maksimum gerilme değerini artırmış olduğu görülmektedir. Ayrıca akma gerilmesi ve akma şekil değiştirme değerleri de artmıştır. Bu artışın KNT'ün sert yapısından ve KNT ve grafenler arasında oluşturulan güçlü bağlardan

kaynaklandığı düşünülmektedir. Karbon yapılarının sert kimyası malzemenin maksimum şekil değiştirme değerini düşürerek sünekliğini azaltmıştır[28, 40]. Elastik modülü ve maksimum gerilme değeri KNT çapının azalması ve buna bağlı olarak KNT sayısının artması ile artmıştır. Benzer şekilde maksimum gerilme değerleri KNT çapının azalması (sayısının artması) ile artarken akma gerilmesi ve akma şekil değiştirmesi azalmaktadır. Elastik modülü ve maksimum gerilme değeri açısından en yüksek değer Pt-Al-GKNT(6x6) yapısına aittir. Akma gerilesi açısından ise Pt-Al-GKNT(12x12) yapısı daha iyi değerler göstermektedir.

Şekil 4'te KNT doğrultusunda çekme yüklemesine maruz kalan Pt-Al-GKNT yapısının deformasyon mekanizmasının örnek bir gösterimi verilmiştir. Pt-Al-GKNT(6x6) yapısına ait KNT doğrultusundaki deformasyon durumları incelendiğinde  $\epsilon=0.124$  şekil değiştirme değerine kadar gerilmelerin arttığı görülmektedir. Gerilmelerin büyük çoğunluğunu KNT'ler taşımaktadır. KNT'ler içerisinde sınırlarda yer alan KNT'lerde daha yüksek gerilmeler oluşmuştur. En yüksek gerilmeler KNT'lerde oluşsa da  $\epsilon=0.124$  değerinden sonra kopmaların Al bölgesinde gerçekleştiği görülmüştür. Kopmanın Grafen ve KNT bağlantı noktalarında gerçekleşmemesi bu iki yapı arasında güçlü kovalent bağların oluşturulduğunu göstermiştir[31]. Deformasyon görüntülerinden de bu bağların yüksek gerilme taşıdığı ve düzenli olduğu görülmektedir.



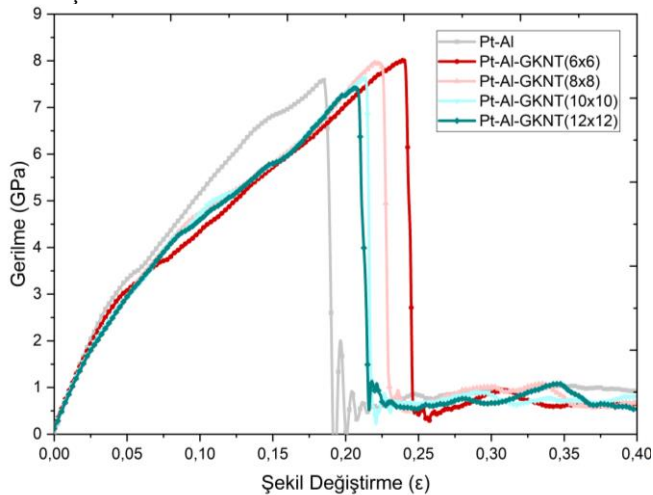
Şekil 4. KNT doğrultusunda çekme yüklemesine maruz kalan Pt-Al-GKNT(6x6) numunesine ait deformasyon durumları, (a) 0.02, (b) 0.06, (c) 0.10, (d) 0.12, (e) 0.14 ve (f) 0.26.

Tablo 2. KNT doğrultusu (z) boyunca çekme yüklemesine maruz kalan yapıların mekanik özellikleri.

Modeller	Elastik Modül (GPa)	Akma Gerilmesi (GPa)	Akma Şekil Değiştirmesi	Maksimum Gerilme (GPa)	Maksimum Şekil Değiştirme
Pt-Al	51.515	3.081	0.0638	6.831	0.189
Pt-Al-GKNT(6x6)	67.659	4.242	0.0653	7.465	0.124
Pt-Al-GKNT(8x8)	62.871	4.115	0.0697	7.290	0.131
Pt-Al-GKNT(10x10)	58.961	4.770	0.0854	7.187	0.135
Pt-Al-GKNT(12x12)	51.153	6.485	0.130	7.125	0.144

Göze çarpan bir diğer önemli husus ise Şekil 4. e'de ( $\epsilon=0.140$ ) gözlemlendiği gibi sınırlarda yer alan KNT'lerdeki burkulma davranışdır. Bu durum, yapıdaki gerilmelerin  $\epsilon=0.124$  değerine kadar artması ve bu değerden sonra yapıdaki kopmaların gerçekleşmesi ile gerilen KNT bağlarının bir yay davranışı sergileyen salınım hareketinden kaynaklanmaktadır. Bu salınım davranışı ile KNT'ler, yapıyı tekrar eski konumuna dönmeye zorlayan çekme yönüne zıt yönlü kuvvetin etkisi ile önce basma yüküne maruz kalarak burkulma davranışı sergiler ardından ise salınımların sönümlenmesi ile tekrar eski konumuna dönerek düzleşmektedir. KNT'lerin düzleştiği Şekil 4. f'de görülmektedir.

Deformasyon görüntülerinden de bu bağların yüksek gerilme taşıdığı ve düzenli olduğu görülmektedir. Diğer yapıların deformasyon görüntüleri incelendiğinde benzer bir karakter sergiledikleri ve gerilmelerin KNT bölgesinde yoğunlaştığı görülmüştür. KNT çapı arttıkça yapıların maksimum gerilme dayanımları azalırken yapıda kopmanın gerçekleştiği strain değerleri artmaktadır. KNT(8x8), KNT(10x10) ve KNT(12x12) için sırasıyla kopma  $\epsilon=0.131$ ,  $\epsilon=0.135$  ve  $\epsilon=0.144$  değerinde alüminyum bölgesinde gerçekleşmiştir. Küçük çaplı KNT'lerin yer aldığı yapıların daha yüksek gerilme değerlerine direnç göstermesi küçük çap ve düşük atom sayılarından dolayı diğer yapılara kıyasla çok sayıda KNT içermesidir.



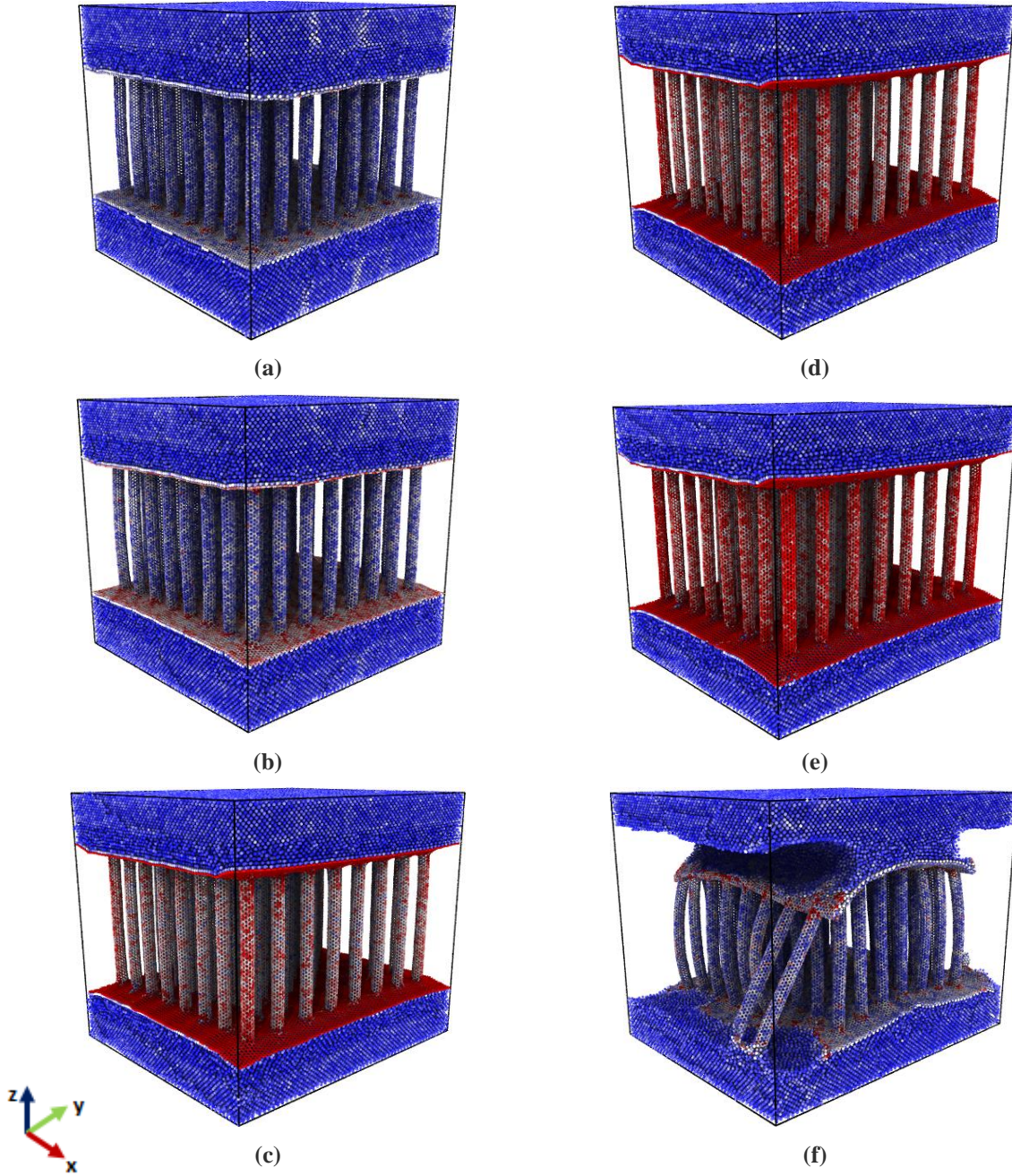
Şekil 5. Pt-Al-GKNT yapılarının Y doğrultusundaki (grafen doğrultusu) çekme gerilme-şekil değiştirme eğrileri.

Yapıların Grafen doğrultusundaki (Y) çekme dayanımları incelendiğinde (Şekil 5)  $\epsilon=0.025$  şekil değiştirme değerine kadarki lineer bölgede tüm modellerin benzer davranış gösterdiği görülmüştür. Gerilmeler arttıkça Pt-Al yapılarına kıyasla G-KNT'li yapılarda gerilmenin eğimi azalmış sünekliliği ve tokluğu artmıştır. Bu bölgedeki gerilme düşüşünün grafenlerde yer alan bölgesel bağ kopmalarından kaynaklandığı düşünülmektedir. Yapıda yer alan KNT'lerin çapı düştükçe maksimum gerilme dayanımı ve şekil değiştirme değeri artmaktadır. Maksimum gerilme değeri açısından en yüksek değer küçük çaplı KNT'lerin yer aldığı Pt-Al-GKNT(6x6) yapısında elde edilmiştir. KNT çapı arttıkça maksimum gerilme değerlerinin düştüğü görülmüştür. Tokluk ve süneklilik açısından incelendiğinde yine en iyi sonuçlar en düşük çaplı KNT içeren yapılarda görülmüştür. Gerilme değerlerindeki düşüşler ise kademeli olarak gerçekleşmiştir. Gerilme değerleri Tablo 3'de verilen sayısal değerler üzerinden incelendiğinde elastik modüllerinin hemen hemen aynı olduğu bulunmuştur. G-KNT yapılarının varlığı ve KNT çapının artması akma gerilmesi ve akma şekil değiştirmesini azaltmıştır. Maksimum gerilme değeri ise G-KNT varlığı ve KNT çapının azalması ile artmıştır.

Pt-Al-GKNT(6x6) yapısının grafen doğrultusundaki (y doğrultusu) çekme yükü altındaki deformasyon görüntüleri Şekil 6'da verilmiştir. Deformasyon görüntüleri incelendiğinde gerilmelerin çoğunlukla yapıdaki grafenlerde biriktiği görülmüştür. Grafen ve KNT'ler arasında oluşturulan kovalent bağlardan dolayı KNT'lerde de gerilmeler yüksektir. Bu durum aynı zamanda arada oluşturulan kovalent bağların gücünü de ortaya koymaktadır. Deformasyon görüntüleri de bu bağların yüksek gerilme taşıdığı ve düzenli olduğunu doğrulamıştır. Şekil değiştirme değerlerinin  $\epsilon=0.239$ 'a kadar artması ile beraber gerilmelerin arttığı görülmüştür. KNT'ler içerisinde uçlarda yer alan KNT'lerde daha yüksek gerilmeler oluşmuştur. Maksimum gerilme değerinden sonra yapıdaki kopmalar grafen ve Al bölgesinden başlamak üzere gerçekleşmiştir. Farklı çaplarda KNT içeren yapıların deformasyon görüntüleri incelendiğinde benzer bir karakter sergiledikleri ve çoğunlukla gerilmeleri grafenlerin taşıdığı görülmüştür. KNT çapı arttıkça maksimum dayanımın ve şekil değiştirme değerlerinin azaldığı görülsede kopmalar benzer şekilde grafen ve alüminyum bölgesinde gerçekleşmiştir.

Tablo 3. Grafen doğrultusu (Y) boyunca çekme yüklemesine maruz kalan yapıların mekanik özellikleri.

Modeller	Elastik Modül (GPa)	Akma Gerilmesi (GPa)	Akma Şekil Değişirnesi( $\epsilon$ )	Maksimum Gerilme (GPa)	Maksimum Şekil Değişirme( $\epsilon$ )
Pt-Al	58.622	3.325	0.0572	7.220	0.185
Pt-Al-GKNT(6x6)	59.129	3.086	0.0505	8.035	0.239
Pt-Al-GKNT(8x8)	58.621	2.941	0.0498	7.974	0.221
Pt-Al-GKNT(10x10)	58.583	2.857	0.0476	7.645	0.213
Pt-Al-GKNT(12x12)	58.178	2.821	0.0472	7.445	0.206

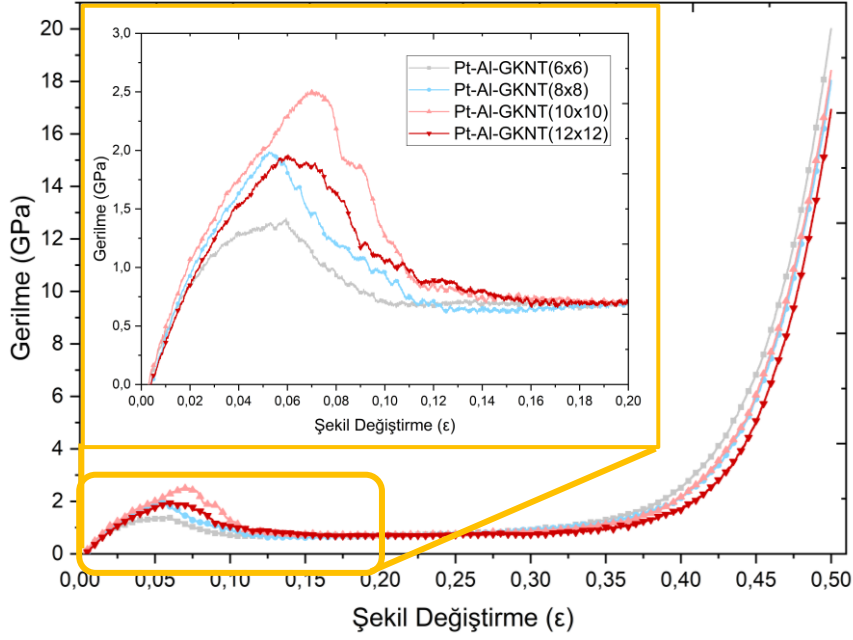


Şekil 6. Pt-Al-GKNT(6x6) yapısının Y doğrultusundaki (grafen doğrultusu) çekme gerilme-şekil deęiřirme eęrileri, (a) 0.02, (b) 0.06, (c) 0.16, (d) 0.20, (e) 0.24 ve (f) 0.26.

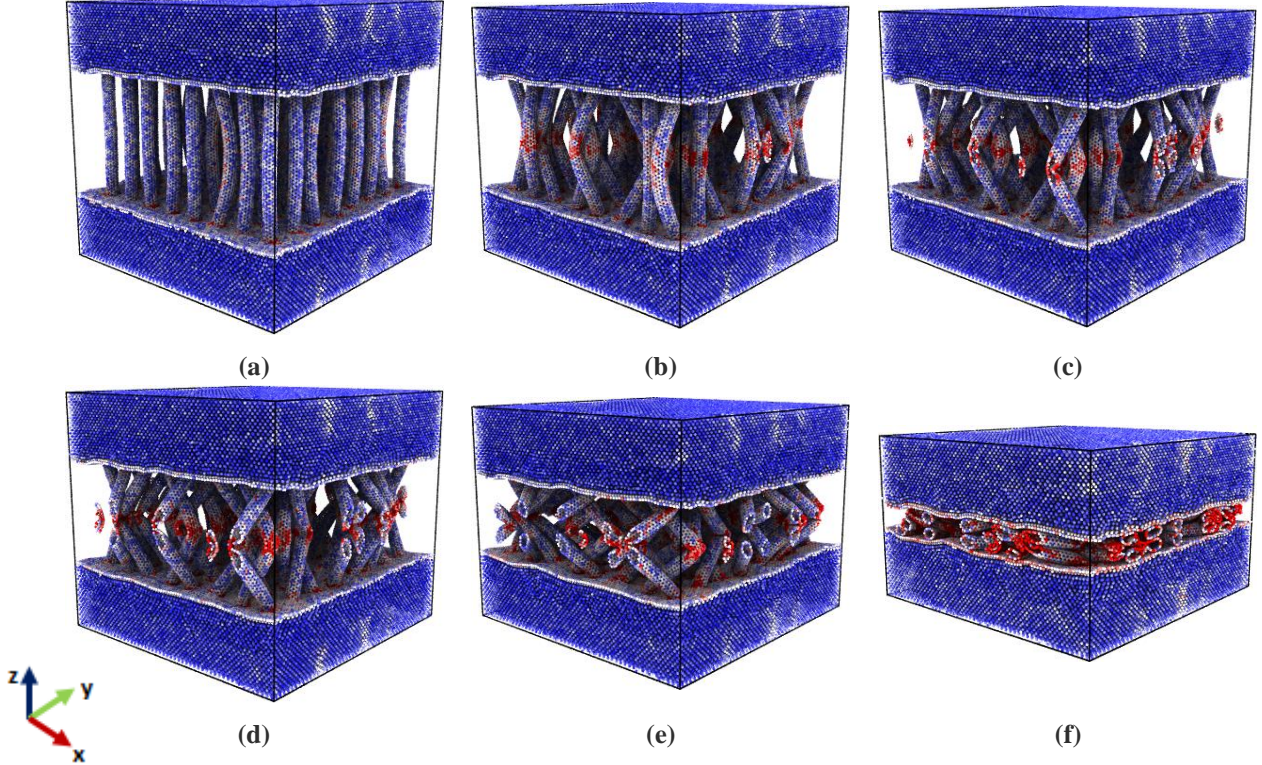
## Basma Davranışı

Kovalent olarak bağlanmış grafen-KNT sandviç yapısının Pt-Al yapısı ile birleştirilmesinin bir sonucu olarak basma performanslarını incelemek için, Farklı Pt-Al-GKNT yapılarının karşılaştırmalı basınç gerilme-şekil değiştirme eğrileri Şekil 7’de verilmiştir. Davranışlar incelendiğinde üç farklı bölge gözlenmiştir. İlk bölgede yapıdaki gerilmelerin lineer olarak  $\epsilon=0.06-0.08$  (GKNT6x6–GKNT10x10) değerine kadar arttığı görülmüştür. Ardından gerilmeler belirli bir değere kadar düşmekte ( $\epsilon=0.15$ ) ve sonrasında  $\epsilon=0.35$  değerine kadar yapı şekil değiştirirse de gerilmeler

yatay kalmaktadır. Bu değerden sonra gerilmelerin arttığı yoğunlaşma bölgesinin olduğu görülmüştür. KNT boyutları açısından yapılar değerlendirildiğinde lineer bölgede belirli bir değere kadar KNT’lerin çapı arttıkça taşınan gerilme değerlerinin ve KNT dayanımlarının daha yüksek olduğu görülmüştür. Fakat KNT10x10’dan daha büyük çapta KNT kullanılması durumunda ise değerler düşmektedir. Yoğunlaşma ve sertleşme bölgesinde ise daha küçük çaplı KNT’lerde kısmen de olsa daha büyük gerilmeler oluşmaktadır.



Şekil 7. Pt-Al-GKNT yapılarının Z doğrultusundaki (KNT doğrultusu) basma gerilme-şekil değiştirme eğrileri.



Şekil 8. Pt-Al-GKNT(6x6) yapısının Z doğrultusundaki (KNT doğrultusu) basma gerilme-şekil değiştirme eğrileri, (a) 0.02, (b) 0.06, (c) 0.08, (d) 0.10, (e) 0.20 ve (f) 0.40.



Gerilmadaki davranışların daha iyi anlaşılabilmesi için malzemelerin gerilme görüntüleri incelenmiştir (Şekil 8). Yapıda oluşan ilk gerilmeler alüminyumdan ziyade en dar kesite sahip KNT'lerde oluşmuştur. Gerilmelerin artması ile birlikte KNT'lerde eğilmelerin başladığı ve  $\epsilon=0.06-0.08$  değerine kadar arttığı görülmüştür. Bu değerden sonra KNT'lerde meydana gelen yanal deformasyonlardan dolayı gerilmeler hızlıca düşmektedir. Ardından grafikte yer alan yatay bölgede şekil değişimine bağlı KNT'lerin etrafında bulunan boşlukların kapandığı görülmüş bu sebeple gerilmeler oluşmamıştır. Boşluklar kapandıktan sonra yoğunlaşma bölgesindeki gibi gerilmelerin tekrar arttığı görülmüştür. Farklı KNT çaplarına sahip yapılar incelendiğinde büyük çaplı KNT içeren yapılarda ilk bölgedeki gerilme azalışları daha büyük şekil değiştirmelerde gerçekleşmiştir. Bunu nedeni KNT sayılarının azalmasına rağmen etki alanlarının genişlemesinden kaynaklandığı düşünülmektedir. Pt-Al-GKNT12x12 yapısında ise etki alanları artmasına rağmen KNT sayılarındaki azalmanın daha etkili olmasından dolayı lineer bölgede gerilme değerleri tekrar düşmüştür.

## Sonuç

Özetle, bu çalışmada, platin ve alüminyum levhalar arasında yerleştirilmiş kovalent olarak bağlı Grafen KNT yapılarından oluşan yeni bir nanoyapı sunulmuştur. Ayrıca, numunelerin termodinamik stabiliteyi kontrol edildikten sonra MD simülasyonları ile mekanik özellikleri araştırılmıştır. Grafen ve KNT yapıları arasında güçlü kovalent bağlar oluşturulmuştur. Önerilen bu yapı saf Pt-Al yapısına kıyasla çekme yüklemesi altında daha yüksek elastik modül, maksimum gerilme ve şekil değiştirme değeri sergilemektedir. Yapı doğası gereği an izotropik bir davranış sergilemektedir. Ayrıca, KNT çapının yapının mekanik dayanımı üzerindeki etkileri de araştırılmıştır. Küçük çaplı KNT'lerin çekme ve basma dayanımının daha iyi olduğu görülmüştür. Yapılarda yer alan KNT sayılarının da çap boyutları gibi mekanik dayanımı etkilemekte ve çapları küçük olsa da çok sayıda KNT içeren yapılarda dayanım daha iyidir. Önerilen bu çalışma ile Pt-Al yapısına kıyasla daha hafif ve daha yüksek çekme dayanımına sahip bir nanoyapı ortaya koyulmuştur. İlerleyen çalışmalarda, KNT uzunluklarının yapının mekanik davranış üzerindeki etkileri araştırılarak ideal KNT boyutları belirlenebilir. Bunun yanı sıra farklı KNT diziliminin etkileri ve hidrojen depolama özelliklerinin araştırılması da ilgi çekici bir konu olabilir.

## Etik kurul onayı ve çıkar çatışması beyanı

Hazırlanan makalede etik kurul izni alınmasına gerek yoktur.

## Kaynaklar

- [1] A. Pujari *et al.*, "Carbon Hybrid Materials—Design, Manufacturing, and Applications," *Nanomaterials*, vol. 13, no. 3, doi: 10.3390/nano13030431.
- [2] K. Xia, H. Zhan, and Y. Gu, "Graphene and Carbon Nanotube Hybrid Structure: A Review," *Procedia IUTAM*, vol. 21, pp. 94-101, 2017/01/01/ 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.piutam.2017.03.042>.

- [3] Y. Shi *et al.*, "Strengthening and deformation mechanisms in nanolaminated single-walled carbon nanotube-aluminum composites," *Mater. Sci. Eng. A.*, vol. 764, p. 138273, 2019/09/09/ 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138273>.
- [4] J. Hou, W. Du, G. Parande, M. Gupta, and S. Li, "Significantly enhancing the strength + ductility combination of Mg-9Al alloy using multi-walled carbon nanotubes," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 790, pp. 974-982, 2019/06/25/ 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.03.243>.
- [5] D. H. Nam, S. I. Cha, B. K. Lim, H. M. Park, D. S. Han, and S. H. Hong, "Synergistic strengthening by load transfer mechanism and grain refinement of CNT/Al-Cu composites," *Carbon*, vol. 50, no. 7, pp. 2417-2423, 2012/06/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.01.058>.
- [6] M. S. L. Hudson, H. Raghubanshi, D. Pukazhselvan, and O. N. Srivastava, "Carbon nanostructures as catalyst for improving the hydrogen storage behavior of sodium aluminum hydride," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 37, no. 3, pp. 2750-2755, 2012/02/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.03.006>.
- [7] C. Soldano, A. Mahmood, and E. Dujardin, "Production, properties and potential of graphene," *Carbon*, vol. 48, no. 8, pp. 2127-2150, 2010/07/01/ 2010, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2010.01.058>.
- [8] Z. Zhou, X. Wang, S. Faraji, P. D. Bradford, Q. Li, and Y. Zhu, "Mechanical and electrical properties of aligned carbon nanotube/carbon matrix composites," *Carbon*, vol. 75, pp. 307-313, 2014/08/01/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.04.008>.
- [9] U. Degirmenci and M. Kirca, "Design and mechanical characterization of a novel carbon-based hybrid foam: A molecular dynamics study," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 154, pp. 122-131, 2018/11/01/ 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.06.039>.
- [10] Z. Ozturk, C. Baykasoglu, and M. Kirca, "Sandwiched graphene-fullerene composite: A novel 3-D nanostructured material for hydrogen storage," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 15, pp. 6403-6411, 2016/04/27/ 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.03.042>.
- [11] J. Wang, Z. Li, G. Fan, H. Pan, Z. Chen, and D. Zhang, "Reinforcement with graphene nanosheets in aluminum matrix composites," *Scripta Materialia*, vol. 66, no. 8, pp. 594-597, 2012/04/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2012.01.012>.
- [12] Z. Zhao *et al.*, "Mechanical, thermal and interfacial performances of carbon fiber reinforced composites flavored by carbon nanotube in matrix/interface," *Composite Structures*, vol. 159, pp. 761-772, 2017/01/01/ 2017, doi: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.10.022>.

- [13] U. Degirmenci, A. S. Erturk, M. B. Yurtalan, and M. Kirca, "Tensile behavior of nanoporous polyethylene reinforced with carbon-based nanostructures," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 186, p. 109971, 2021/01/01/ 2021, doi: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2020.109971>.
- [14] E. Coşkun, E. A. Zaragoza-Contreras, and H. J. Salavagione, "Synthesis of sulfonated graphene/polyaniline composites with improved electroactivity," *Carbon*, vol. 50, no. 6, pp. 2235-2243, 2012/05/01/ 2012, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2012.01.041>.
- [15] Y. Zhang *et al.*, "Load transfer of graphene/carbon nanotube/polyethylene hybrid nanocomposite by molecular dynamics simulation," *Composites Part B: Engineering*, vol. 63, pp. 27-33, 2014/07/01/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2014.03.009>.
- [16] J. Y. Wu, J. Y. He, and Z. L. Zhang, "Fracture and negative Poisson's ratio of novel spanned-fullerenes nanotube networks under tension," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 80, pp. 15-26, 2013/12/01/ 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2013.04.033>.
- [17] A. G. Nasibulin *et al.*, "A novel hybrid carbon material," *Nature Nanotechnology*, vol. 2, no. 3, pp. 156-161, 2007/03/01 2007, doi: 10.1038/nnano.2007.37.
- [18] M. Kirca, X. Yang, and A. C. To, "A stochastic algorithm for modeling heat welded random carbon nanotube network," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 259, pp. 1-9, 2013/06/01/ 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.02.014>.
- [19] D. Chakravarty *et al.*, "3D Porous Graphene by Low-Temperature Plasma Welding for Bone Implants," *Advanced Materials*, <https://doi.org/10.1002/adma.201603146> vol. 28, no. 40, pp. 8959-8967, 2016/10/01 2016, doi: <https://doi.org/10.1002/adma.201603146>.
- [20] A. T. Celebi, M. Kirca, C. Baykasoglu, A. Mugan, and A. C. To, "Tensile behavior of heat welded CNT network structures," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 88, pp. 14-21, 2014/06/01/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2014.02.040>.
- [21] Z. Fan *et al.*, "Thermal and electrical properties of graphene/carbon nanotube aerogels," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 445, pp. 48-53, 2014/03/20/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2013.12.083>.
- [22] L. Xu, N. Wei, Y. Zheng, Z. Fan, H.-Q. Wang, and J.-C. Zheng, "Graphene-nanotube 3D networks: intriguing thermal and mechanical properties," *Journal of Materials Chemistry*, 10.1039/C1JM13799A vol. 22, no. 4, pp. 1435-1444, 2012, doi: 10.1039/C1JM13799A.
- [23] G. K. Dimitrakakis, E. Tylianakis, and G. E. Froudakis, "Pillared Graphene: A New 3-D Network Nanostructure for Enhanced Hydrogen Storage," *Nano Letters*, vol. 8, no. 10, pp. 3166-3170, 2008/10/08 2008, doi: 10.1021/nl801417w.
- [24] M. Kirca, "Design and analysis of sandwiched fullerene-graphene composites using molecular dynamics simulations," *Composites Part B: Engineering*, vol. 79, pp. 513-520, 2015/09/15/ 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2015.04.050>.
- [25] U. Degirmenci and M. Kirca, "Carbon-based nano lattice hybrid structures: Mechanical and thermal properties," *Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.*, vol. 144, p. 115392, 2022/10/01/ 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115392>.
- [26] S. Pal, P. N. Babu, B. S. K. Gargeya, and C. S. Becquart, "Molecular Dynamics simulation based investigation of possible enhancement in strength and ductility of nanocrystalline aluminum by CNT reinforcement," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 243, p. 122593, 2020/03/01/ 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122593>.
- [27] D. M. Park, J. H. Kim, S. J. Lee, and G. H. Yoon, "Analysis of geometrical characteristics of CNT-Al composite using molecular dynamics and the modified rule of mixture (MROM)," *Journal of Mechanical Science and Technology*, vol. 32, no. 12, pp. 5845-5853, 2018/12/01 2018, doi: 10.1007/s12206-018-1133-5.
- [28] S. E. Shin, H. J. Choi, J. H. Shin, and D. H. Bae, "Strengthening behavior of few-layered graphene/aluminum composites," *Carbon*, vol. 82, pp. 143-151, 2015/02/01/ 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.10.044>.
- [29] K. Choi, J. Seo, D. Bae, and H. Choi, "Mechanical properties of aluminum-based nanocomposite reinforced with fullerenes," *T. NONFERR. METAL SOC.*, vol. 24, pp. s47-s52, 2014/07/01/ 2014, doi: [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(14\)63287-8](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(14)63287-8).
- [30] F. A. Yunusov, T. V. Larionova, E. V. Bobrynina, T. J. Ma, and O. V. Tolochko, "Aluminum-based composite reinforced with fullerene soot," *Mater. Today: Proc.*, vol. 30, pp. 640-644, 2020/01/01/ 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.01.449>.
- [31] A. S. Erturk, Y. O. Yildiz, and M. Kirca, "Mechanical behavior of a novel carbon-based nanostructured aluminum material," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 193-209, 2018/03/01/ 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.commat.2017.12.033>.
- [32] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, "VMD: Visual molecular dynamics," *Journal of Molecular Graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33-38, 1996/02/01/ 1996, doi: [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5).
- [33] J. F. Shackelford and W. Alexander, *CRC materials science and engineering handbook*. CRC press, 2000.
- [34] F. Y. Meng, S. Q. Shi, D. S. Xu, and R. Yang, "Size effect of X-shaped carbon nanotube junctions," *Carbon*, vol. 44, no. 7, pp. 1263-1266, 2006/06/01/ 2006, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.10.049>.

- [35] S. Plimpton, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics," *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, 1995/03/01/ 1995, doi: <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
- [36] X. Yang, F. Qiao, X. Zhu, P. Zhang, D. Chen, and A. C. To, "Coalescence of parallel finite length single-walled carbon nanotubes by heat treatment," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 74, no. 3, pp. 436-440, 2013/03/01/ 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2012.11.006>.
- [37] M. Höhnerbach and P. Bientinesi, "Accelerating AIREBO: Navigating the Journey from Legacy to High-Performance Code," *Journal of Computational Chemistry*, vol. 40, no. 14, pp. 1471-1482, 2019/05/30 2019, doi: <https://doi.org/10.1002/jcc.25796>.
- [38] B. H. Morrow and A. Striolo, "Morphology and Diffusion Mechanism of Platinum Nanoparticles on Carbon Nanotube Bundles," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 111, no. 48, pp. 17905-17913, 2007/12/01 2007, doi: 10.1021/jp071474o.
- [39] Y.-H. Lin, T.-C. Chen, P.-F. Yang, S.-R. Jian, and Y.-S. Lai, "Atomic-level simulations of nanoindentation-induced phase transformation in mono-crystalline silicon," *Applied Surface Science*, vol. 254, no. 5, pp. 1415-1422, 2007/12/30/ 2007, doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2007.06.071>.
- [40] S. E. Shin and D. H. Bae, "Deformation behavior of aluminum alloy matrix composites reinforced with few-layer graphene," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 78, pp. 42-47, 2015/11/01/ 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.08.001>.