

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMANIN SİMÜLASYONU

Makina Müh. Kerem BARTIK

**FBE Makina Mühendisliği Anabilim Dalı İmal Usulleri Programı'nda
Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Erhan ALTAN

İSTANBUL, 2007

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMANIN SİMÜLASYONU

Makina Müh. Kerem BARTIK

**FBE Makina Mühendisliği Anabilim Dalı İmal Usulleri Programı'nda
Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Erhan ALTAN



Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Mesut ÖZGÜRLER



Prof. Dr. Ayşegül AKDOĞAN



İSTANBUL, 2007

İÇİNDEKİLER

SİMGE LİSTESİ	vi
KISALTMA LİSTESİ	xii
ŞEKİL LİSTESİ	xiii
ÇİZELGE LİSTESİ	xxii
ÖNSÖZ.....	xxiii
ÖZET	xxiv
ABSTRACT	xxv
1. GİRİŞ.....	1
1.1 Genel Bilgi.....	5
1.1.1 Nanoteknoloji'nin Amaçları	8
1.1.2 Nanoteknolojinin Kullanım Alanları	9
1.2 Nanoteknolojinin Tarihçesi ve Gelişimi	11
1.3 Nanoteknolojinin Günümüzdeki Durumu	16
1.3.1 Avrupa Birliği.....	18
1.3.2 Amerika Birleşik Devletleri.....	19
1.3.3 Asya	20
1.3.4 Ülkemizdeki Durum	20
1.4 Nanobilim ve Nanoteknoloji Çalışma Alanları	22
1.5 Nanoteknoloji'de Üretim.....	23
1.5.1 Nanokarakterizasyon	23
1.5.2 Nanofabrikasyon.....	25
1.5.3 Mikroskoplar.....	36
2. NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA	46
2.1 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Mekanizması	49
2.1.1 Malzeme İçindeki Kusurlara ya da Hatalara Bağlı İşleme Mekanizması.....	50
2.1.2 Hatasız Kristal Yapıların Teorik Kayma Dayanımı	52
2.1.3 Hatasız Kristal Yapıların Atomik Boyutta İşlenmesi	55
2.1.4 Atomik Kümelerin Nano Ölçekte İşleme Mekanizmaları	56
2.1.5 Sünek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesi.....	58
2.1.6 Sürtünme Yoluyla Abrazif Aşınma ile Talaş Kaldırma	59
2.1.7 Gevrek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesinde Peierls Gerilimi.....	61
2.1.8 Organik Polimerlerin Moleküler Sınır Hatalarına Bağlı Tane Altı İşlemleri	62
2.2 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Yöntemleri	62
2.2.1 Gevrek Malzemelerin Kayma Mekanizmaları ile Sünek Rejimde İşlenmesi.....	64

2.2.2	Nano Ölçekte Talaş Kaldırmada Kesici Takım Malzemesi Özellikleri	67
2.2.3	Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşlemleri İçin Tezgah Özellikleri	68
2.3	Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar	68
2.3.1	Elektron Demeti ve Lazer İşleme Yoluyla Nano Ölçekte Talaş Kaldırma	81
2.3.1.1	Problemin Tanımı ve Varsayımlar	83
2.3.1.2	Hesapsal (Hesaplama) Izgarası.....	85
2.3.1.3	Elektron Demeti Taşınması İçin Monte Carlo Yöntemi.....	86
2.3.1.4	Lazer Isıtma Sistemi	90
2.3.1.5	Isı İletimi.....	91
2.3.2	Proton Demeti ile Nano Ölçekte İşleme: Son İstasyon Tasarımı ve Test.....	103
2.3.2.1	Donanım Tasarımı	104
2.3.2.2	Direncin Pozlandırılması	108
2.3.2.3	Yeni Bir Çözünürlük Standardının Tasarlanması.....	109
2.3.2.4	Yüksek En-Boy Oranlı Yapılar	110
2.3.3	İyon Işınımı Teknikleriyle Polimerik Alt Tabakaların Mikro/Nano Ölçekte İşlenmesi.....	113
2.3.4	Seramiklerin Elmas Lifler (Fiberler) ile Nano Ölçekte Talaşlı İşlenmesi.....	120
2.3.5	Nano Ölçekte Talaş Kaldırılmış Tek Kristalli Silisyumdaki Yüzey ve Alt Yüzey Çatlaklarının Tarama Kuvvet Mikroskobu ve Tarama Lazer Mikroskobu ile Değerlendirilmesi	125
3.	SİMÜLASYON TEKNİĞİNİN İNCELENMESİ.....	131
3.1	Sistem Yaklaşımı ve Simülasyon	131
3.1.1	Sistem ve Simülasyonun Tanımlanması.....	131
3.1.2	Statik Simülasyon Modelleri	134
3.1.3	Dinamik Simülasyon Modelleri.....	134
3.1.4	Deterministik Simülasyonlar	135
3.1.5	Stokastik Simülasyonlar	135
3.1.6	Sürekli Modeller	136
3.1.7	Kesikli Modeller	137
3.1.7.1	Sonraki-Olayların Planlanması (Next-Event Scheduling).....	138
3.1.7.2	Faaliyetlerin Taranması (Activity Scanning).....	140
3.1.7.3	Amaca-Uydurma Yaklaşımı (Object-Oriented Approach).....	142
3.2	Simülasyon Modelinin Formülasyonu.....	143
3.2.1	Problemin Belirlenmesi	143
3.2.2	Verilerin Toplanması ve İşlenmesi.....	144
3.2.3	Bilgisayar Programının Hazırlanması.....	147
3.3	Rasgele Sayıların Üretilmesi ve Test Edilmesi	147
3.3.1	Rasgele Sayıların Elde Edilmesi.....	147
3.3.2	Üretilen Sayıların Rasgeleliğinin Test Edilmesi.....	149
3.3.2.1	Ki-Kare Uygunluk Testi	149
3.3.2.2	Kolmogorov-Smirnov Uygunluk Testi.....	150
3.3.3	Rasgele Sayıların Dönüştürülmesi.....	151
3.3.3.1	Ters Dönüşüm Metodu	152
3.3.3.2	Reddetme Metodu.....	153
3.3.4	Geometrik Dağılım İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi	154
3.3.5	Weibull Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi	155

3.3.6	Poisson Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi.....	156
3.3.7	Üstel Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi.....	157
3.3.8	Beta Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi.....	158
3.4	Monte Carlo Metodu.....	159
3.4.1	Kanonik Toplulukta (sabit NVT) Metropolis Monte Carlo.....	162
3.4.2	İzotermal-İzobarik Topluluğa Genişleme.....	164
3.4.3	Rasgele Yönelimlerin Üretilmesi	164
3.4.3.1	Barker-Watts Metodu	165
3.4.3.2	Local Frame Metodu.....	165
3.4.4	Nano Ölçekte Talaş Kaldırmanın Monte Carlo Simülasyonu	166
3.5	Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu	196
3.5.1	Moleküler Dinamik Modellemenin Temelleri.....	197
3.5.1.1	Faz Uzayı Yörüngeleri.....	197
3.5.1.2	Dinamik Sistemlerin Sınıflandırılması	200
3.5.1.3	Periyodik Sınır Şartları (PBC).....	207
3.5.1.4	Korunum İlkeleri	209
3.5.2	Sonlu Fark Yöntemleri	210
3.5.2.1	Bir Model Çalışması: Euler'in Metodu	211
3.5.2.2	Hatalar.....	212
3.5.2.3	Algoritmik Kararlılık.....	214
3.5.2.4	Moleküler Dinamik İçin Algoritmalar.....	215
3.5.2.5	Enerji Korunumu	221
3.5.2.6	Hesaplanan Yörüngelerin Güvenilirliği.....	221
3.5.3	Atomlararası Potansiyel Modelleri	222
3.5.3.1	İki-cisim Potansiyelleri.....	223
3.5.3.2	Gömülü Atomlar Modelleri (GAM)	225
3.5.4	Moleküler Dinamik Adımları	226
3.5.4.1	Başlangıç Süreci	226
3.5.4.2	Dengeleme Süreci.....	230
3.5.4.3	Yapıların Katı-Sıvı Analizi.....	233
3.5.5	Moleküler Dinamik Simülasyon Kullanılarak Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar	234
3.5.5.1	Nanometrik Taşlamanın Paralel Moleküler Dinamik Simülasyonu.....	282
3.5.5.1.1	Moleküler Dinamik Simülasyonların Algoritması	283
3.5.5.1.2	Uzaysal (Parçacık) Ayrışımaya Dayalı Moleküler Dinamik (PMD)	286
3.5.5.1.3	Nanometrik Taşlama Simülasyonu.....	288
3.5.5.2	Nanometrik Kesimin Mekanîği Üzerine Bir Araştırma ve Sınama Ortamının Geliştirilmesi.....	295
3.5.5.2.1	Nanometrik Kesim Modeli	295
3.5.5.2.2	Kesim Enerjisi ve Kesme Kuvvetleri	296
3.5.5.2.3	Moleküler Eylem Fonksiyonu	298
3.5.5.2.4	Talaş Kaldırılmış Yüzeylerin Üretilmesi.....	300
3.5.5.2.5	Kesici Takım Aşınması.....	302
3.5.5.2.6	Nanometrik Kesim İçin Sınama Ortamı	304
3.5.5.3	Bakırdan Nano Ölçekte Talaş Kaldırmanın MD Simülasyonu	306
4.	SONUÇLAR.....	317

KAYNAKLAR.....	322
ÖZGEÇMİŞ.....	327

SİMGE LİSTESİ

δ	:	İşleme enerjisi yoğunluğu
τ_{th}	:	Teorik kayma gerilimi
μ	:	Rijitlik modülü, kayma modülü
U	:	Atomik aktivasyon enerjisi
U_0	:	Potansiyel eşik enerjisi
b	:	Atomik uzaklık, Burgers vektörü
a	:	Atomik uzaklık
δ_s	:	Özgül kayma enerjisi yoğunluğu
τ_{max}	:	Maksimum kayma gerilimi
a_T	:	Temas alanı yarıçapı
R_i	:	Dalıcının küresel ucu yarıçapı
P_i	:	Dalma yükü
τ_s	:	Kayma dayanımı gerilimi
σ_c	:	Temas alanındaki sıkıştırma gerilimi
P_f	:	Makaslama kaymasını başlatacak yükleme kuvveti
E	:	Boyuna elastiklik modülü
σ_{max}	:	Maksimum radyal çekme gerilimi
σ_{th}	:	Radyal çekme gerilimi elastik bozulma limiti
P_a	:	Ayrılma için dikey yük
ν	:	Poisson oranı
τ_c	:	Peierls gerilimi
ω_e	:	Etkin dislokasyon bölgesi kalınlığı
S	:	Toplam yapışkan temas alanı
P	:	Yüzeye normal kuvvet
k	:	Orantısallık sabiti
H_v	:	Vickers sertliği
F_s	:	Sürtünme kuvveti
μ_s	:	Sürtünme katsayısı
τ_a	:	Temas bölümü yapışma dayanımı
ω_c	:	Kopan talaşın ortalama kalınlığı
k_v	:	Yapışkan aşınma hacmi katsayısı
V_w	:	Aşınma hacmi
d_{cc}	:	Kırılma başlangıcı için kritik nüfuz derinliği, kritik kesme derinliği
K_c	:	Kırılma tokluğu
H	:	Sertlik
P_s	:	Özgül kesme kuvveti

R_a	:	Ortalama yüzey pürüzlülüğü
R_{\max}	:	Maksimum yüzey pürüzlülüğü
a_c	:	Deforme olmamış talaş kalınlığı
A_a	:	Atomik ağırlık
C	:	Özgül ısı
E_e	:	Elektron enerjisi
E_0	:	Elektron demetinin başlangıç (ilk) enerjisi
\dot{E}	:	Elektron demeti giriş gücü
J	:	Ortalama iyonlaşma potansiyeli
k_g	:	Termal geçirgenlik (iletkenlik)
L	:	Geometrinin z -yönündeki boyu
N	:	Toplam element (öge) sayısı, Atom sayısı
N_a	:	Avagadro sayısı (= $6.023 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}$)
n_t	:	Kırılma indeksi gerçel kısmı
\tilde{n}	:	Kırılma indeksi kompleksi
q''	:	Isı akışı
\dot{q}	:	Üretilen ısı
q_0''	:	İş parçası üzerine gelen ilk lazer ısı akışı
q_{gen}	:	Isı üretim oranı
r	:	Radyal eksen
Δr	:	r -ekseni boyunca ızgara aralığı
R	:	Geometrinin r -ekseni yönündeki boyu
$R(\bullet)$:	Dağılma olasılığı artışı
$R_{i \rightarrow t}$:	Orta kısımdaki i 'den t 'ye yansıyan lazer ışınının oranı
R_{an}	:	Random sayısı
R_{lazer}	:	Lazerin düzenli olarak ısıttığı bölgenin yarıçap değeri
R_p	:	Nüfuz eden elektron dizini
S	:	Etkileşim mesafesi
t	:	Zaman
Δt	:	Zaman artışı
T	:	Sıcaklık
V	:	Voltaj, Gerilim
z	:	z -ekseni
Δz	:	z -ekseni yönündeki ızgara aralığı
Z	:	Atom numarası
ϕ	:	Azimutal açısı
κ	:	Soğurma (emilim) katsayısı
λ	:	Elektronların serbest yolu
λ_0	:	Vakum içindeki ışığın dalga boyu
θ	:	Kutup açısı

Θ	:	Dağılım (saçılım) açısı
ρ	:	Katının yoğunluğu
Ω	:	Katı açısı
ψ	:	Biriken enerji
Ψ	:	Normalleştirilmiş elektron enerjisi yoğunluğu
a_i	:	Isıl dağılıma
a/r	:	Kabul-Red oranı
AB	:	Kesme düzlemi uzunluğu boyunca ısı kaynağı
$B_{talaş}$:	Talaş içindeki ısı iletimi oranı
ΔB	:	Isı bölümü için maksimum denkleştirme
D	:	Ayrılma denge enerjisi
F	:	Kuvvet
F_C	:	Kesme kuvveti
F_{fr}	:	Sürtünme kuvveti
F_s	:	Makaslama kuvveti
F_t	:	İtme kuvveti
K	:	Boltzmann Sabiti
$K_0(u)$:	Bessel fonksiyonu
L_{tt}	:	Takım-Talaş arayüzü uzunluğu boyunca sürtünme ısı kaynağı
m_a	:	Bir atomun kütlesi
N_{pe}	:	Peçlet sayısı
N_{tool}	:	Takım içerisindeki atom sayısı
N_{WP}	:	İş parçası içerisindeki atom sayısı
$P(q_0)$:	Boltzmann dağılım Fonksiyonu
q_{pl}	:	Hareket hattındaki ısı kaynağında serbest kalan ısı yoğunluğu
q_{pli}	:	Harekete neden olan düzlemdeki ısı kaynağında serbest kalan ısı yoğunluğu
q_{pls}	:	Hareket düzlemindeki ısı kaynağında serbest kalan ısı yoğunluğu
q_0	:	Üç boyutlu uzayda N taneciklerinin konfigürasyonu
r_a	:	Ara mesafe
r_e	:	Denge mesafesi
R_x	:	Hareket hattındaki ısı kaynağı ile M noktası arasındaki uzaklık
t_c	:	Kesme derinliği
t_{ch}	:	Talaş kalınlığı
v_k	:	Hareket düzlemindeki ısı kaynağı hızı
v_c	:	Kesme hızı
v_{ch}	:	Talaş hızı
v_i	:	i ' ninci atomun hızı
u	:	Morse potansiyel enerjisi

V_{\min}	:	Minimum (en düşük) potansiyel enerji
Δu	:	Morse potansiyel enerjisindeki deęişim
w	:	Kesme geniřlięi
X, z	:	Hareket koordinat sisteminde sıcaklık yükselmesinin meydana geldięi noktanın koordinatları
α	:	Talař açısı
θ_i	:	Sıcaklık yükselmesi
θ_M	:	Herhangi bir noktadaki sıcaklık yükselmesi
λ	:	Isıl (Termik) geçirgenlik
ϕ_c	:	Kesme (Makas) açısı
φ	:	Eęim açısı
r_0, r_{eq}	:	Kütle denge pozisyonu
γ	:	Yay sabiti
E_k	:	Kinetik enerji
E_T	:	Toplam enerji
ω	:	Salınım frekansı
H_H	:	Hamiltonian
H_0	:	Bütünleşik Hamiltonian
H_p	:	Sapmış Hamiltonian
B	:	Açısal momentum
t_0	:	Başlangıç anı
Δ_t	:	Zaman adımı
$\langle E_k \rangle$:	Ortalama kinetik enerji
k_B	:	Boltzmann sabiti
U	:	Potansiyel enerji
C	:	Normalizasyon katsayısı
$\langle T \rangle$:	Denge sıcaklığı
H_x	:	Boltzmann H fonksiyonu x komponenti
e_x	:	Pozisyon için toplam lokal hata
e_v	:	Hız için toplam lokal hata
σ	:	Parçacığın sıfıra olan uzaklığı
ε	:	Parçacığın minimum enerjisi
F_i	:	GAM gömülme enerjisi
$\rho_{h,i}$:	GAM konak yoğunluğu
Φ_{ij}	:	İki cisim potansiyeli
ρ_a	:	Konak yoğunluğu bileşenlerinin atomik yoğunluğu
E_A^*	:	Gerçekleşen normalize toplam enerji
E_D^*	:	İstenen normalize toplam enerji
E^*	:	Normalize toplam enerji

T^*	:	Normalize mutlak sıcaklık
T_A^*	:	Gerçekleşen normalize mutlak sıcaklık
T_D^*	:	İstenen normalize mutlak sıcaklık
L^*	:	Normalize kübik kap kenar uzunluğu
ρ^*	:	Normalize kübik kap paketlenme yoğunluğu
λ_p	:	Pozisyonel düzen parametresi
$g(r)$:	Radyal dağılım fonksiyonu
δ_D	:	Dirac delta fonksiyonu
r	:	Kesici takım uç yarıçapı
w_c	:	Talaş kaldırma genişliği
A_c	:	Kesme düzlemi alanı
a	:	Elastik modül
B_i	:	Genişleme (Hacim) modülü
b_c	:	Kesme genişliği
D_k	:	Kohezyon (Yapışma) enerjisi
d_c	:	Kesme derinliği
E_i	:	i 'ninci atomun potansiyeli
F_x	:	Kesme kuvveti fonksiyonu,
F_C	:	Kesme kuvveti
$F(r_{ij})$:	i ve j atomları arasındaki atomlararası kuvvet
F_{ti}	:	Kesici takım üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
F_{wi}	:	İş parçası üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
F_{nwi}	:	İş parçası üzerindeki atomlardan kesici takım üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
F_{tti}	:	Kesici takım üzerindeki diğer atomlardan, kesici takım üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
F_{wti}	:	Kesici takım üzerindeki atomlardan, iş parçası üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
F_{wwi}	:	İş parçası üzerindeki diğer atomlardan, iş parçası üzerindeki i 'ninci atoma etkiyen kuvvet
f_{0ij}	:	Deforme olmamış kristaldeki atomlararası kuvvet
f_{ij}	:	Deforme olmuş kristaldeki atomlararası kuvvet
h	:	İntegral adımları
h_c	:	Sönüm geciktirme sabiti
m_{wi}	:	İş parçası atomunun kütlesi,
m_{ti}	:	Kesici takım atomunun kütlesi,
N	:	Atom sayısı,
q_i	:	i 'ninci atomun konum vektörü

P_s	:	Kesme gücü
P_u	:	Sürtünme gücü
p_i	:	i 'ninci atomun momentumu
r_{wi}	:	İş parçasının i 'ninci atomunun yer değiştirme vektörü
r_i	:	Kesici takımdaki i 'ninci atomunun yer değiştirme vektörü
r_{ij}	:	i ve j atomları arasındaki mesafe
r_i^n	:	n 'inci integral adımında i 'ninci atomun yerdeğiştirme vektörü
r_i^{n+1}	:	$n + 1$ 'inci integral adımında i 'ninci atomun yerdeğiştirme vektörü
r_0	:	Denge konumundaki atomik mesafe
U	:	Potansiyel fonksiyonu,
V_c	:	Talaş hızı
V_s	:	Kesme hızı
v_i^n	:	n 'inci integral adımında i 'ninci atomun hız vektörü
v_i^{n+1}	:	$n + 1$ 'inci integral adımında i 'ninci atomun hız vektörü
β_a	:	Makaslama açısı
β_{c1}	:	Sertlik fonksiyonunun doğrusal olmayan sabit katsayısı
β_{c2}	:	Sertlik fonksiyonunun doğrusal olmayan sabit katsayısı
ϕ_c	:	Sürtünme açısı
λ_a	:	Atomlararası sertlik
λ_s	:	Orijin noktasındaki sertlik fonksiyonunun eğimi
σ	:	Birincil gerilim
τ	:	Kayma gerilimi

KISALTMA LİSTESİ

AFM	Atomic Force Microscope
CC	Chip Count (Talaş Miktarı)
DUV	Derin Mor-ötesi Litografi
EDM	Nanoscale Electrical Discharge Machining
ELID	Electrolytic In-Process Dressing
FCC	Yüzey Merkezli Kübik
FEM	Finite Element Method
FSP	Failure Starting Point (Bozulma Başlangıç Noktası)
GAM	Gömülü Atom Modeli
IWGN	Intergency Working Group and Nano Science
KAM	Kolmogorov-Arnold-Moser Motion
KH	Kesme Hatası
LIGA	X-Işını Litografisi
LLNL	Lawrence Livermore National Laboratory
LRMD	Length Restricted Molecular Dynamics (Uzunluk-Sınırlı Moleküler Dinamik)
MCM	Monte Carlo Metodu
MD	Molecular Dynamics
MEMs	Micro-Electro-Mechanics
MFM	Magnetic Force Microscope
NEV	System of constant Number, Energy, Volume of atoms
NSTC	National Science and Technology Council
NVT	System of constant Number, Volume, Temperature of atoms
ODHO	One Dimensional Harmonic Oscillator
PBC	Periyodik Sınır Şartları
PDF	Boltzmann Olasılık Dağılım Fonksiyonu
PEC	Predict-Evaluate-Correct
PMMA	Polymethylmethacrylate
RBS	Rutherford Backscattering
SC	Subsurface Compression (Yüzey Altı Sıkışması)
SCI	Science Citation Index
SEM	Scanning Electron Microscope
SF	Side Flow (Yana Akış)
SLM	Scanning Laser Microscope
SOR	Successive Over Relaxation
SPDT	Single Point Diamond Turning
SPM	Scanning Probe Microscope
STM	Scanning Tunneling Microscope
SZC	Shear Zone Compression (Kayma Bölgesi Sıkışması)
TEM	Transmission Electron Microscope
TFM	Thermal Probe Microscope
UPM	Ultra-Precision Machining
v.d.	ve diğerleri
YH	Yuvarlama Hatası

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1	Bir nanometre çok küçüktür	3
Şekil 1.2	Nanoskobik ebatlar	4
Şekil 1.3	Nanoparçacığın görünüşü	6
Şekil 1.4	Minyatürizasyon	6
Şekil 1.5	İnsan saç telinin çapı ~100.000 nm	7
Şekil 1.6	Toplu iğne başı, 1 mm	7
Şekil 1.7	Nanoteknolojinin kullanım alanları	11
Şekil 1.8	Nanoteknoloji'deki gelişim	17
Şekil 1.9	Yıllara göre dünya'da nanoteknoloji yatırımı	17
Şekil 1.10	(a) IBM laboratuvarlarında yapılan dünyanın en küçük abaküsü, (b) Bu abaküse ait parmak	28
Şekil 1.11	Moleküler seviyedeki bu tasarımlardan sol üstteki bir rulman, sağ üstteki basit bir pompa, sol alttaki moleküler birleştirme için hareket kontrolcüsü ve sağ alttaki ise mikron boyutlarında bir dişlidir	28
Şekil 1.12	Kendiliğinden bir araya gelme yöntemi ile nanotüp üretimi	29
Şekil 1.13	Elektron ışınımı litografisi	32
Şekil 1.14	Nanobaskı litografi prosesinin aşamaları	32
Şekil 1.15	Çeşitli karbon nanotüpü yapıları	33
Şekil 1.16	(a) Koni şeklinde nanotüpler, (b) Nanotüpler ve ortada nanotel	33
Şekil 1.17	Aşağıdan-Yukarı (Bottom-Up) ve Yukarıdan-Aşağı (Top-Down) yaklaşımları arasındaki ilişkinin gösterimi	34
Şekil 1.18	Mikro-üretim Teknolojisi	35
Şekil 1.19	Mikroskopların görüntüleme aralıkları	38
Şekil 1.20	Tarama tünelleme mikroskobu (STM) çalışma prensibi	40
Şekil 1.21	Tarama tünelleme mikroskobu (STM) ile grafit görüntüsü	40
Şekil 1.22	Bakır yüzey üzerindeki demir atomlarının dairesel düzeni	40
Şekil 1.23	Benzen moleküllerini, karbon nanotüpün üzerine ilâştirilerek dişli yapımı	41
Şekil 1.24	C ₆₀ moleküllerinin sahip olduđu elektrik dipol momentinden etkilenen döner elektrik alanı	41
Şekil 1.25	(a) Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) için mikro-üretim iğnesi, (b) Büyütölmüş iğnenin görünüşü, (c) Mikrolens dizilerinin iğne ile hesaplanmasının gösterimi	42
Şekil 1.26	Atomik kuvvet mikroskobunun (AFM) çalışma prensibi	43
Şekil 1.27	Atomik kuvvet mikroskobu (AFM)	44
Şekil 1.28	Atomik kuvvet mikroskobuyla gerçekleştirilen litografi işlemleri	44
Şekil 2.1	Ito v.d. tarafından geliştirilen yüksek hassasiyette elmas takımlı torna tezgahı "Capsule"	48
Şekil 2.2	Cranfield Üniversitesi'nde geliştirilen "Tetraform C"	48
Şekil 2.3	Hocken, Wei Gao v.d. nano ölçekte talaş kaldırma için tasarladıkları deneysel nano ölçekte talaş kaldırma tezgahı	48
Şekil 2.4	Alaşımız çeliklerde talaş kalınlığı-kayma gerilimi ilişkisi	50
Şekil 2.5	Malzemelerde hata dağılımları ve işleme bölgeleri	51
Şekil 2.6	Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları (Oda sıcaklığında)	51
Şekil 2.7	Bölgesel yük altındaki malzemelerin bozulmaları (Oda sıcaklığında)	53
Şekil 2.8	Atomik makaslama kayması ve kayma için atomik bağlanma potansiyeli	54

Şekil 2.9	Katı yüzey etkisi göz önünde bulundurularak elde edilmiş iki atomun arasındaki modifiye Morse serbest potansiyel enerjisi.....	56
Şekil 2.10	Küre ve iş parçasının teması sonucu oluşan gerilim dağılımı	57
Şekil 2.11	Statik sürtünmenin sürtünme ve aşınmaya dayalı mekanizması	60
Şekil 2.12	Cam, Seramik gibi gevrek malzemelerin düzlem leplenmesi ve parlatılması	64
Şekil 2.13	Elmas aşındırıcı taneyle gevrek iş parçasının sünek rejimde işlenmesi	65
Şekil 2.14	Çok kesen ağızlı kesici takımlarla malzeme kaldırma hızı karşılaştırması	65
Şekil 2.15	İlerleme hızının sünek rejimde işleme için kritik nüfuz derinliğine etkisi	66
Şekil 2.16	Boyut etkisine bağlı talaş kaldırma modeli	67
Şekil 2.17	Mn-Zn ferrit tek kristal malzemenin yüzeyinin optik mikrografileri	69
Şekil 2.18	UPM ile özgül talaş kaldırma kuvvetinin kesme derinliğine göre değişimi.....	70
Şekil 2.19	Ueda v.d. kullandıkları UPM (a) tezgah şeması, (b) 600 mm çaplı konkav küresel alüminyum test parçasının işlenmesi.....	70
Şekil 2.20	Talaş oluşumunun deneysel ve FEM analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları	71
Şekil 2.21	Görelî kesme uzunluğuna bağlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması.....	72
Şekil 2.22	Cam iş parçasında çatlak oluşumsuz bitirme işlemiyle elde edilen yüzey	73
Şekil 2.23	Üç farklı alüminyum kristalinde kesme derinliğinin ana kesme kuvveti üzerindeki etkisi.....	74
Şekil 2.24	Üç farklı alüminyum kristalinde kesme derinliğinin yüzey pürüzlülüğü üzerindeki etkisi.....	74
Şekil 2.25	L_d ; uzama bölgesinin kesme hızı ve talaş açısına göre değişimi.....	75
Şekil 2.26	Uç yarıçapı ve kesme hızına bağlı olarak pürüzlülüğün değişimi	75
Şekil 2.27	UPM ile elde edilen talaşların SEM görüntüleri (a) Gevrek rejimde işleme, (b) Sünek rejimde işleme	76
Şekil 2.28	(111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişi	77
Şekil 2.29	Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden düşük olduğundaki nanometrik işlemin şeması	78
Şekil 2.30	Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden yüksek olduğundaki nanometrik işlemin şeması	78
Şekil 2.31	(a) 1 nm , (b) 30 nm deforme olmamış talaş kalınlıklarıyla gerçekleştirilen işleme yönteminde talaş oluşumlarının resmi	79
Şekil 2.32	Taşlama işleminde uygulanan ELID tekniği	79
Şekil 2.33	ELID taşlama tekniğinin şeması.....	80
Şekil 2.34	Elmas tane ile gömülü AlTiC yüzeyinin AFM görüntüsü.....	80
Şekil 2.35	Kuru-EDM işleminin şeması	81
Şekil 2.36	Nano ölçekte talaş kaldırma işlemi şemasal olarak ele alındı. İki farklı buharlaşma yöntemi hesaba katıldı: (a) elektron demeti, iş parçasının üzerine dikey olarak çarpar ve (b) elektron demeti ve lazer ışını karşıt yönlerden, normal bir şekilde iş parçasına çarpar	84
Şekil 2.37	Elektron demeti iletimi, lazer yayılımı, iş parçası içinde ısı iletimini modellemek için kullanılan, ızgara kurulumu	87
Şekil 2.38	İş parçası içinde ışınımsal aktarım şeması.....	90
Şekil 2.39	Altın tabaka içinde biriken, normalleştirilmiş elektron enerjisi	96
Şekil 2.40	(a) $t = 0.9ns$ 'de altın tabaka içinde, sıcaklık dağılımı	99

Şekil 2.41	$t = 0.5ns$ 'de altın tabaka içinde sıcaklık dağılımı.....	100
Şekil 2.42	$t = 1ns$ 'de sıcaklık dağılımı	101
Şekil 2.43	$\Delta r = 1.25nm$ yarıçap ve $\Delta z = 1.25nm$ derinlikle, sonsuz küçük alan civarında, başlangıçtaki geçici sıcaklık	102
Şekil 2.44	CIBA 'da geliştirilen tanecik hızlandırma tesisinin şematik gösterimi	106
Şekil 2.45	$1 \mu m$ 'lik delikten protonların ileri saçılarak Si üzerinde kazınma sonucu meydana gelen şeklin iki boyutlu (2D) krokisi	108
Şekil 2.46	Si üzerinde $1 \mu m$ 'lik delikler için kullanılan proton demetinin noktasal boyutunu saptamak için SEM resmi.....	108
Şekil 2.47	$10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 ince plaka üzerine $2 MeV$ proton ışınını odaklayarak yazılmış olan $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik karelerin SEM fotoğrafı	110
Şekil 2.48	$10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 ince plaka üzerine $2 MeV$ proton ışınını odaklayarak yazılmış olan $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik karelerin SEM fotoğrafı	111
Şekil 2.49	$2 MeV$ proton ışın demetinin odaklanmasıyla $200 nm$ kalınlığındaki SU-8 üzerine yazılan test modelinin SEM fotoğrafı.....	112
Şekil 2.50	(Sol) Şekil 2.49'daki paralel satırların oldukça büyütülmüş hali. (Sağ) Genişliği $90 nm$ olan en küçük çaprazın dikey çubuğunun oldukça büyütülmüş fotoğrafı.....	112
Şekil 2.51	MIBL prosesinin örnek şeması.....	116
Şekil 2.52	(a) $85 keV$, $1 \times 10^{14} iyon/cm^2$ Ca^+ iyonları,(b) $85 keV$, $1 \times 10^{15} iyon/cm^2$ P^+ iyonları, (c) $85 keV$, $1 \times 10^{16} iyon/cm^2$ P^+ iyonlarının ışınlanması ile örneklerin optik mikroskopik sonuçları.....	117
Şekil 2.53	İyonların ışınlanarak hafifçe vurma modunda çapraz kesit analizi ile kaydedilmiş tipik yüzey özelliklerinin karakterize edilmiş PMMA film yüzeyinin AFM görüntüsü.....	117
Şekil 2.54	(Ca-PMMA), (P1-PMMA), (P2-PMMA) ile modellerine ışınlandırılmış düzenli polimetilmetakrilatın (PMMA) temas açısı değerleri.....	119
Şekil 2.55	Tungsten tel üzerinden alınmış numune üzerindeki CVD ile üretilmiş elmas lifin kesiti ve bu lif yüzeyinde oluşan facetaların büyütülmüş hali.....	121
Şekil 2.56	Seramik yüzey üzerine paralel olarak monte edilmiş elmas lifin şeması ve oluklar ile facetalar	121
Şekil 2.57	Optik cam yüzey içindeki oluk kesintileri ve sarmal cam teller (fitiller).....	122
Şekil 2.58	Lifimsi cam döküntüsü oluşturmak için ayrılan oluk yakınındaki şeritleri üretmek için camın sünek akışı ile meydana gelen oluk oluşumunun şeması	123
Şekil 2.59	Sinterlenmiş gözenekli alüminyum oksit yüzeyi.....	124
Şekil 2.60	Gözeneksiz yeniden kristalize edilmiş alüminyum oksit yüzeyi (a) önce ve (b) taşlamadan sonra.....	124
Şekil 2.61	Talaşlı üretimin ana bölümünün şeması	126
Şekil 2.62	Oluk altındaki yüzey altı çatlakların gözlemlenebilmesi için çapraz olarak bölünmenin ve kazınmış yüzeyin hazırlanması.....	127
Şekil 2.63	(a) $47 nm$, (b) $126 nm$, (c) $240 nm$ 'lik kesme derinliklerindeki oluklar için talaşlı işlenmiş yüzeylerin tarama kuvvet mikroskobu (SFM) ile elde edilen resimleri	127
Şekil 2.64	Çapraz bölünmüş ve dağlanmış yüzeydeki yüzey altı çatlakların tarama lazer mikroskobu (SLM) resimleri	128

Şekil 2.65	170 <i>m/dak.</i> kesim hızlarında talaşlanmış oluklar için; yüzey çatlağının oluk derinliği oranıyla, alt yüzey çatlaklarının derinliğindeki değişimler.....	129
Şekil 2.66	700 <i>m/dak.</i> kesim hızlarında talaşlanmış oluklar için; yüzey çatlağının oluk derinliği oranıyla, alt yüzey çatlaklarının derinliğindeki değişimler.....	129
Şekil 3.1	Deterministik simülasyon modeli	135
Şekil 3.2	Stokastik simülasyon modeli	136
Şekil 3.3	Durum değişkenini sürekli sistemdeki değişimi.....	137
Şekil 3.4	Durum değişkeninin kesikli sistemde değişimi	137
Şekil 3.5	Adımsal-Olay artırımı için akış diyagramı	141
Şekil 3.6	Amaca-Uydurma yaklaşımı	143
Şekil 3.7	Simülasyon modelleme yönteminin akış diyagramı.....	145
Şekil 3.8	Rasgele değişken elde edilmesinin akış diyagramı ile gösterimi	152
Şekil 3.9	Varsayılan yoğunluk fonksiyonu.....	153
Şekil 3.10	Reddetme yönteminin açıklanması.....	154
Şekil 3.11	(a) Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarında, tek eksenli Gerilim testinde atomların sayısıyla, hesapsal zamandaki değişim; (b) Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarında, kesim hızıyla hesapsal zamandaki değişim	169
Şekil 3.12	İlgilenilen çeşitli bölgeleri gösteren, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunun şematik diyagramı	170
Şekil 3.13	Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonundan iki bölge gösteren şematik diyagram.....	173
Şekil 3.14	İki ana ısı kaynağının birleştirilmiş etkileri için genel koordinat sistemiyle, ısı akımı modelinin şematik diyagramı	175
Şekil 3.15	Nanometrik kesimde sıcaklık tahmini için, kesim alanındaki gözlem bölgesini gösteren şematik diyagram	178
Şekil 3.16	Morse gerilimiyle, harmonik salınımın karşılaştırılması.....	179
Şekil 3.17	Tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonunda, kesim zamanıyla (a) kesim kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki (hareketli ortalama değerleri) değişim.....	180
Şekil 3.18	Tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonunda, kesim zamanıyla (a) kesim kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki (hareketli ortalama değerleri) değişim.....	181
Şekil 3.19	Ortogonal (Dikey) Kesim İçin Merchant'ın (1945) Kuvvet Daire Diyagramı...	182
Şekil 3.20	Komanduri ve Hou'dan sonraki termal modelle, moleküler dinamik simülasyonunun sonuçları arasında, takım ucunun yanındaki kesim bölgesinde üretilen sıcaklığın karşılaştırılması	183
Şekil 3.21	Komanduri ve Hou'dan sonraki termal modelle, moleküler dinamik Simülasyonunun sonuçları arasında, takım ucunun yanındaki kesim bölgesinde üretilen sıcaklığın karşılaştırılması	183
Şekil 3.22	Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında moleküler dinamik simülasyon	186
Şekil 3.23	Alüminyumun nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonunda, kesim bölgesindeki sıcaklık değişimi	186
Şekil 3.24	Alüminyumun nanometrik kesiminin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu	187
Şekil 3.25	Alüminyumun Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, (a) kesim kuvvetindeki değişim, (b) itme kuvvetindeki değişim	188

Şekil 3.26	Kesim zamanıyla nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, kesim bölgesindeki sıcaklıktaki değişim	189
Şekil 3.27	Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 10° , Kesim hızı $5ms^{-1}$).....	190
Şekil 3.28	Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 30° , Kesim hızı $5ms^{-1}$).....	190
Şekil 3.29	Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 45° , Kesim hızı $5ms^{-1}$).....	191
Şekil 3.30	$5ms^{-1}$ kesim hızında, farklı meyil açıları için, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, (a) kesme kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki değişim.....	192
Şekil 3.31	$5ms^{-1}$ kesim hızında, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, her birim genişlikte kesme kuvvetindeki ve her birim genişlikte itme kuvvetindeki değişim.....	192
Şekil 3.32	$5ms^{-1}$ kesim hızında, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla kuvvet oranındaki değişim	194
Şekil 3.33	$5ms^{-1}$ kesme hızıyla nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, her birim genişlikte sürtünme kuvvetindeki ve her birim genişlikte makaslama kuvvetindeki değişim	194
Şekil 3.34	$5ms^{-1}$ kesim hızında, alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, makaslama açısındaki değişim	195
Şekil 3.35	$5ms^{-1}$ kesim hızında, alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, özgül enerjideki değişim	195
Şekil 3.36	Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, kesim bölgesindeki sıcaklığın değişimi	196
Şekil 3.37	Bir boyutlu ODHO'nun hareketi	198
Şekil 3.38	$(2mE_T)^{1/2}$ ve $(2E_T/\gamma)^{1/2}$ yarı eksenlerine sahip faz uzayı yörüngesi	199
Şekil 3.39	Dinamik sistemlerin sınıflandırılması ve faz uzayında hareket hiyerarşisi	201
Şekil 3.40	İki serbestlik derecesine sahip hareketin yay sabitleri oranına bağlı olarak faz uzayı yörüngeleri	203
Şekil 3.41	Karalı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları.....	206
Şekil 3.42	Faz uzayı içine sıkışmış faz noktası örneği	208
Şekil 3.43	ODHO için Euler yönteminin kullanılması	212
Şekil 3.44	Kesme ve yuvarlama hatalarının sonlu fark algoritmasına etkisi	214
Şekil 3.45	Hız Verlet algoritmasının şematik gösterimi	217
Şekil 3.46	Normalize Lennard-Jones potansiyeli ve kuvvetinin uzaklığa göre değişimi	224
Şekil 3.47	Aynı tür atom için Maxwell-Boltzmann hız dağılım fonksiyonu.....	232
Şekil 3.48	Farklı kristal yönelmelerinde ortaya çıkan iş parçası deformasyonları	234
Şekil 3.49	Ikawa v.d. göre talaş kaldırma parametrelerinin kuvvet ve özgül enerjiye etkileri.....	236
Şekil 3.50	Bakır malzemesinin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu.....	236
Şekil 3.51	Mikro talaşlamayı simüle etmek için FEM ağı.....	237
Şekil 3.52	Nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları.....	238
Şekil 3.53	Silisyumun nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma modeli.....	239
Şekil 3.54	Rentsch ve Inasaki'nin nano ölçekte talaş kaldırma işleminde tane sınırlarının etkilerini inceledikleri moleküler dinamik modeli.....	239

Şekil 3.55	Kesim bölgesinin moleküler dinamik simülasyonu.....	240
Şekil 3.56	Moleküler dinamik simülasyon ile tahmin edilen talaş oluşumu	240
Şekil 3.57	Kesme derinliği ve kesici kenar yarıçapının talaş oluşumuna etkisi	241
Şekil 3.58	Atomistik kayma sisteminde deformasyon rejimlerinin değişimi, takım sağdan sola ilerlemektedir	242
Şekil 3.59	Özel kayma koşulları altında rejim bölgeleri geçişi	242
Şekil 3.60	Talaş kaldırmada kullanılan kesici takımın pozitif, 0° ve negatif talaş açılarının gösterimi	245
Şekil 3.61	(a) -75°, (b) -60°, (c) -45°, (d) -30° ve (e) -15° negatif talaş açılı takımları kullanılarak gerçekleştirilen nanometrik işlemin MD simülasyonu	245
Şekil 3.62	Değişik kristal oryantasyonları ve kübik malzemeler için kesme yönleri.....	247
Şekil 3.63	(a)-(d) (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	248
Şekil 3.64	(a)-(d) (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{2}11]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	249
Şekil 3.65	(a)-(d) (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	250
Şekil 3.66	(a)-(d) (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[001]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	251
Şekil 3.67	(a)-(d) (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	253
Şekil 3.68	(a)-(d) (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[100]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları.....	254
Şekil 3.69	(a)-(e) Farklı kesme derinlikleri (0,81–1,62 nm), farklı kristal yapıları ve farklı kesme yönleri için kesme ve itme kuvvetlerindeki, kuvvetler oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimler	255
Şekil 3.70	(a)-(e) 1,62 nm kesme derinliğinde, farklı talaş açıları, farklı kristal yapıları ve farklı kesme yönleri için kesme ve itme kuvvetlerindeki, kuvvetler oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimler	257
Şekil 3.71	Gevrek malzemelerin nanometrik işlenmesinde çıkış bozulmasının moleküler dinamik simülasyonu	258
Şekil 3.72	Sünek malzemelerin nanometrik işlenmesinde çıkış bozulmasının moleküler dinamik simülasyonu	258
Şekil 3.73	Çıkış bozulması, olumsuz makaslama (kayma) ve ‘foot’ oluşumunun meydana geldiği talaşın mikroskopik görüntüsü	259
Şekil 3.74	(a) -15°, (b) 0°, (c) 15°, (d) 30°, (e) 45° ve (f) 60° talaş açılı takımlarla sünek iş parçası malzemesinin nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşaması moleküler dinamik simülasyonu.....	259

Şekil 3.75	(a) -15° , (b) 0° , (c) 15° , (d) 30° , (e) 45° ve (f) 60° talaş açılı takımlarla gevrek iş parçası malzemesinin nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşaması moleküler dinamik simülasyonu.....	260
Şekil 3.76	Çıkış bozulmasında ölçülebilen boyutların şematik gösterimi.....	260
Şekil 3.77	Talaş açısı ile (a) 'Pivot' Boyutlarında, (b) çapak boyutlarında ve (c) çapak boyutları oranı ve kuvvet oranındaki değişimler.....	262
Şekil 3.78	Sünek malzemelerin nanometrik kesiminde kesme derinliğinin çıkış bozulması üzerine etkisi.....	263
Şekil 3.79	(a) Alüminyum, (b) Silisyum malzemesinin nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonu.....	264
Şekil 3.80	Farklı kesme genişliklerinde gerçekleştirilen nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonu.....	264
Şekil 3.81	İki farklı kesme genişliğinde oluşan atomların dağılımı. (a) $1,1 \text{ nm}$; (b) $3,26 \text{ nm}$; takım talaş açısı -30° ; kesme derinliği $1,1 \text{ nm}$	265
Şekil 3.82	Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının w_c/d_c oranına bağlı dağılımları	266
Şekil 3.83	Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının talaş açısına bağlı değişimleri.....	267
Şekil 3.84	Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının kesme derinliğine bağlı değişimleri.....	267
Şekil 3.85	(a) $0,4 \text{ nm}$; (b) $0,6 \text{ nm}$; (c) $0,9 \text{ nm}$ gibi farklı kesme derinliklerinde gerçekleştirilen nanometrik kesmenin moleküler dinamik simülasyonu	268
Şekil 3.86	(a) $1,5 \text{ nm}$; (b) 2 nm ; (c) $2,67 \text{ nm}$ uç yarıçaplı takımlar kullanılarak $0,6 \text{ nm}$ kesme derinliğinde gerçekleştirilen nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonu	268
Şekil 3.87	Değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları	269
Şekil 3.88	Taşlama kuvveti ve taşlama hızı arasındaki ilişki	270
Şekil 3.89	Tanenin taşlama anındaki malzeme yapısındaki oluşumlar	271
Şekil 3.90	Taşlama sıcaklığının resmi	271
Şekil 3.91	Taşlama işlemindeki bası gerilmesinin durumu	272
Şekil 3.92	Taşlama işlemindeki kayma gerilimi durumu	272
Şekil 3.93	Takım aşınmasının moleküler dinamik simülasyonu	273
Şekil 3.94	C ve Si atomlarının süblimleşme enerjilerinin sıcaklıkla değişimi	274
Şekil 3.95	Nano ölçekte talaş kaldırma işlemi için kullanılan tek kristalli bakırın moleküler dinamik simülasyon modelinin şeması	275
Şekil 3.96	Nano ölçekte talaş kaldırmanın simülasyonunun 1000. zaman adımından yandan görünüşü.....	275
Şekil 3.97	1000. zaman adımında bakır iş parçası merkez kesitindeki atomların konumları..	276
Şekil 3.98	1000. zaman adımında bakır iş parçası merkez kesitindeki (a) gerinim, (b) gerilim eşitlikleri.....	276
Şekil 3.99	Başlangıç anından (a), çıkış-çapak oluşumuna kadar olan tüm kesim işleminin moleküler dinamik simülasyonu.....	277
Şekil 3.100	Başlangıç anından (a), çıkış-çapak oluşumuna kadar olan tüm kesim işleminin moleküler dinamik simülasyonu.....	278
Şekil 3.101	Kesici takım üzerine etkiyen kuvvetler ve talaş oluşum bölgesi içindeki gerilim alanları.....	279

Şekil 3.102 Farklı deforme olmamış talaş kalınlıklarıyla yapılan kesme işleminde elde edilen kesme ve itme kuvveti değerleri	279
Şekil 3.103 Farklı kesme derinliklerinde kesme işlemi esnasında talaş içindeki A bölgesinde oluşan gerilimler.....	280
Şekil 3.104 Bası gerilmeleri etkisi altındaki çatlağın şematik gösterimi.....	281
Şekil 3.105 Farklı yarıçaplardaki takımlarla yapılan kesme işlemi esnasında talaş içindeki B bölgesinde oluşan gerilimler	281
Şekil 3.106 Nanometrik taşlamanın moleküler dinamik simülasyonu için kullanılan model ..	284
Şekil 3.107 Paralel moleküler dinamiğin uzaysal ayrışımı (SD).....	287
Şekil 3.108 Paralel moleküler dinamiğin parçacık ayrışımı (PD)	288
Şekil 3.109 Supercomputer Onyx2’de hesaplanan paralel moleküler dinamiğin performansı	288
Şekil 3.110 Nanometrik taşlamanın simülasyon sonuçları.....	290
Şekil 3.111 $200ms^{-1}$ hızındaki itme kuvveti F_y ve kayma kuvveti F_x	290
Şekil 3.112 Alçak frekanslı bileşenlerdeki itme kuvvetinin ve kayma kuvvetinin FFT sonuçları	291
Şekil 3.113 İş parçasının moleküllerinin birinci ve ikinci tabakada takımın altında kesim süresince taranması	291
Şekil 3.114 33 ps sonraki $200ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları	291
Şekil 3.115 48 ps sonraki 0° talaş açısı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları	292
Şekil 3.116 Takıma dik bileşke kuvvet	293
Şekil 3.117 33 ps sonraki $200ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları	294
Şekil 1.118 33 ps sonraki $20ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları	294
Şekil 3.119 Nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyon modeli.....	296
Şekil 3.120 Tek kristal yapılu Silisyum ile nanometrik talaş kaldırma boyunca kesme kuvvetlerinde meydana gelen değişim	297
Şekil 3.121 Nanometrik kesim için doğrusal olmayan bir moleküler dinamik simülasyon modeli	299
Şekil 3.122 Nanometrik kesim işlemi süresince potansiyel enerjideki değişim.....	300
Şekil 3.123 Nanometrik talaş kaldırma işleminin moleküler dinamik simülasyonları.....	301
Şekil 3.124 Nanometrik kesim için 3 boyutlu moleküler dinamik simülasyon modeli	302
Şekil 3.125 Farklı zaman adımlarında moleküler dinamik simülasyonun görüntüleri.....	303
Şekil 3.126 Talaş kaldırılmış yüzeyin topografyası	305
Şekil 3.127 Yüzey sertlik analizi.....	306
Şekil 3.128 Nanometrik kesim için geliştirilen denek-taşı tipi aşırı duyarlı talaş kaldırma makinesinin taslağı	306
Şekil 3.129 İş parçasının ve kesici takımın -45° meyil açısıyla, bakır (100) yüzeyinin nanometrik kesiminden önceki başlangıç şekli	307
Şekil 3.130 Bakır (100) yüzeyinin, -45° meyil açılı sert bir takım ile 180 , 18 ve $1.8ms^{-1}$ kesim hızlarında, nanometrik kesiminin, moleküler dinamik simülasyonundan sonraki nihai şekli.....	311
Şekil 3.131 İş parçasının, yüklü durumdaki takımla moleküler dinamik (MD) $120ps$ ’de ($150k$ MD adımları) çalışırken 180 , 18 ve $1.8ms^{-1}$ kesim hızlarında gevşemesinden sonraki şekli.....	312

Şekil 3.132 İş parçasının $120ps$ için gevşemesine izin verildikten sonraki sıcaklıkla karşılaştırmalı olarak; kesim simülasyonundan sonra iş parçasındaki yerel sıcaklığın (K) uzaysal dağılımı	314
Şekil 3.133 (001) yönelimdeki yüzeyle, 12000 atomlu önemli derece büyük bir dizgenin nano işleme simülasyonu.....	314
Şekil 3.134 (a) Yüzey -45° meyil açılı takımla, Şekil 3.175'deki geometride, $18ms^{-1}$ hızla işlenirken, itme F_z ve kayma kuvveti F_x (b) Yüzey -45° meyil açılı takımla işlenirken, itme F_z ve kayma kuvveti F_x	315

ÇİZELGE LİSTESİ

Tablo 1.1	Toplam makale sayısının nüfusa oranı	22
Tablo 1.2	Karbon nanotüplerin elastisite modülü, çekme dayanımı ve yoğunluğunun diğer bazı malzemelerle karşılaştırılması	33
Tablo 1.3	Mikro üretim prosesleri ve uygulama alanları	35
Tablo 1.4	Takım tezgahları ve takım konumlama ekipmanları ile ölçüm cihazlarının çözünürlüğü ya da konumlama doğruluğu	37
Tablo 3.1	500ms ⁻¹ kesim hızında, tek kristalli alüminyumun nanometrik kesiminin moleküler dinamik ve Monte Carlo Simülasyonlarında kullanılan, iş parçası ve takım boyutları, kesim parametreleri, Morse gerilim parametreler	185
Tablo 3.2	500ms ⁻¹ ’de, 10° meyil açısıyla Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarının karşılaştırılması.....	188
Tablo 3.3	5ms ⁻¹ kesim hızında tek kristalli Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda kullanılan geleneksel parametreler.....	190
Tablo 3.4	Farklı meyil açılarıyla, yani, 10°, 30° ve 45°, 5ms ⁻¹ ’de Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunun sonuçları	193
Tablo 3.5	Farklı meyil açılarıyla, 5ms ⁻¹ ’de Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunun sonuçları	195
Tablo 3.6	Moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılan birim sistemi	227
Tablo 3.7	Talaş kaldırma parametrelerinin yüzey kalitesine ve yüzey altı deformasyonuna etkisi, talaş kaldırma hızı: 200 m/s	236
Tablo 3.8	<i>d/R</i> oranının 0,1–0,3 aralığındaki değerleri için farklı kesme derinliklerinde ve takım uç yarıçapı değerlerinde MD simülasyonu sonuçları	244
Tablo 3.9	Farklı talaş açıları ile gerçekleştirilen nanometrik taşlamanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları	246
Tablo 3.10	Farklı kristal oryantasyonları ve kesme yönleri için dislokasyon oluşum ve yayılım tipi ile kuvvet değişimindeki standart sapma değerleri	255
Tablo 3.11	Farklı oryantasyonlarda, farklı kesme yönlerinde ve farklı kesme derinliklerinde 10° talaş açılı takım kullanarak gerçekleştirilen nano ölçekte talaş kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları.....	256
Tablo 3.12	Farklı kristal oryantasyonlarda, farklı kesme yönlerinde ve farklı talaş açılarındaki takımlar kullanılarak 1,62 nm kesme derinliğinde gerçekleştirilen nano ölçekte talaş kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları	256
Tablo 3.13	Sünek malzemeler için ‘Pivot’ boyutları	261
Tablo 3.14	Bozulma sonrası çapak boyutları	261
Tablo 3.15	Sünek ve gevrek malzemeler için boyutlar oranı, bileşke kuvvet oryantasyonu, kesme yönüne bağımlı negatif talaş açısı ve kuvvet oranı	262
Tablo 3.16	Nanometrik kesimin parametreleri ve moleküler dinamik simülasyon koşulları .	285
Tablo 3.17	Çalışma alanı ve simülasyon parametreleri	309
Tablo 3.18	İş parçasının kesimden ve gevşemeden sonraki potansiyel enerjileri.....	313

ÖNSÖZ

Nanoteknoloji hızlı bir şekilde 21. yüzyılın endüstriyel devrimi olarak biçimlenmektedir. Nanoteknoloji, yediğimiz gıda ürünlerinden, giydiğimiz kıyafetlere, kullandığımız ilaçlardan, bilgisayarlarımızın gücüne, kullandığımız otomobillerden, yaşadığımız evlere kadar hayatımızın her noktasını etkileyecektir. Uzun vadede nanoteknolojinin etkisi tarihte buhar gücünün, elektriğin veya transistörlerin kullanımı kadar belirgin olacaktır.

Nanoteknoloji mevcut mühendisliklerin makro anlamda yaptıkları çalışmaların nano seviyeye indirilmesidir. Maddenin nanometre ölçeğinde; yani atomik, moleküler yapılar düzeyinde denetlenmesi yoluyla yeni malzeme, cihaz ve sistemlerin tasarlanmasını ve üretilmesini konu alan bir teknoloji dalıdır. Nanoteknoloji, temelde moleküler ve atomik düzeyde malzeme ile uğraşmaktadır ve bu uğraş sonucunda özellikleri, istenen işlemleri yerine getirmek üzere insan eli ile tasarlanan ve moleküler veya atomik düzeyde denetlenebilen yepyeni malzemeler, yapılar, organizmalar, sistemler ve cihazlar yaratılmaktadır. Minyatürüzasyon olarak tanımlanabilecek bu eğilim birçok mühendislik çalışmasının temelini oluşturmaktadır. Minyaturizasyonun sadece kullanılan parçaların daha az yer kaplamasından çok daha önemli getirileri vardır. Minyaturizasyon üretimde daha az malzeme, daha az enerji, daha ucuz ve kolay nakliye, daha çok fonksiyon ve kullanımda kolaylık olarak uygulamada kendini göstermektedir. Peki daha küçük boyutlara inmeyi bu kadar özel kılan nedenler nelerdir? İşte bu nokta cevapların daha karmaşıklaştığı ve dallanıp budaklandığı noktadır. Burada çok önemli bir unsur var ki o da nanoteknolojinin sadece minyatürleştirmek olmadığıdır.

Nanoteknoloji terimi, belli bir endüstri dalını belirtmez, moleküller ve atomlar gibi doğanın en küçük yapı taşlarını kullanarak elde edilen bilimsel ve teknolojik gelişmeleri niteler. Nanoteknoloji, bugün metrenin bir milyarda biri arasında değişen malzemelerin üretimi ve bu malzemeleri kullanarak üretilen sistemlerin kullanımıyla alakalı teknolojidir; yeni bir alandır. Nanoteknoloji sayesinde sanayide, bilişim teknolojilerinde, sağlık sektöründe ve daha birçok alanda yeni ürünler geliştirilecek, günümüzün üretim süreçleri ve yöntemleri değişecektir. Bu teknolojiye yatırım yapılan ülkelerde ekonomik değerler yaratılacak ve toplumların yaşam kalitesi gelişecektir.

Bu amaçla, kendimi hiç bilmediğim “nanoteknoloji” dünyası içinde bulmama neden olan, önümüzdeki yıllarda hayatımıza girecek “nanoteknoloji” özellikle de çalışma alanım dolayısıyla talaş kaldırmanın nano seviyelere indirilmesi hakkında alt yapı oluşturmamı sağlamak amacıyla bu konuya yönelmemi öneren ve desteğini esirgemeyen saygıdeğer hocam Prof. Dr. Erhan ALTAN’a, eserin ortaya çıkması sırasında beni destekleyen aileme ve arkadaşlarıma en içten teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmanın, ülkemiz endüstrisine, geleceğin mühendislerine ve araştırmacılarına yararlı olmasını dilerim. Saygılarımla,

Ocak, 2007

Kerem BARTIK
Makina Mühendisi

ÖZET

Nanoteknoloji, çok genel tanımıyla, istisnai şekilde küçük (yaklaşık atom boyutlarında) yapıların ticari bir amaca hizmet edebilecek şekilde düzenlenmesidir. Başka şekilde tanımlamak gerekirse: Maddeler üzerinden 100 nanometre ölçeğinden küçük boyutlarda gerçekleştirilen işleme, ölçüm, modelleme ve düzenleme gibi çalışmalar nanoteknoloji çalışmaları olarak nitelenir. Nanoteknolojinin önemi, atomlar ve moleküller seviyesinde çalışarak, gelişmiş ve/veya tamamen yeni fiziksel, kimyasal, biyolojik özelliklere sahip yapılar elde edilmesine imkan sağlamasından kaynaklanmaktadır. Teknik açıdan açıklamak gerekirse, malzeme özellikleri ve cihazların çalışma prensipleri, genel olarak 100 nm'den büyük boyutları temel alarak yapılan varsayımların sonucunda ortaya çıkarılmış geleneksel modelleme ve teorilere dayanmaktadır. Kritik uzunluklar 100 nm'nin altına indiğinde ise geleneksel teori ve modeller ortaya çıkan özellikleri açıklamakta çoğu zaman yetersiz kalmaktadır. Nano boyutlara geldiğinde kuantum gibi farklı fizik kuralları işlemeye başlıyor, geleneksel malzeme özellikleri değişiyor, yüzey davranışı bütün malzemeyi daha baskın bir şekilde etkiler hale geliyor. Kısaca yepyeni bir dünya meydana geliyor. Bu sayede nano boyutlardaki malzemelerin özellikleri kontrol edilerek, farklı özellikler ihtiva eden yepyeni malzemeler dizayn edilebilme olasılığı ortaya çıkıyor.

Yüksek teknolojinin ihtiyaçlarını karşılamak için mikro ve nano ölçekte talaşlı imalat yapmak zorunlu hale gelmiştir. Günümüzde, tezgahların pozisyonlama hassasiyetlerinin gelişimi sonucu, sabit diskler, teleskop ve lazer aynaları ile mercekleri, mikro-elektromekanik parçalar gibi yüksek hassasiyet isteyen ürünlerin tek kesen ağızlı elmas taşlama taşları kullanılarak nano ölçekte imalatının gerçekleştirilmesi mümkündür.

Bu çalışmada; nanoteknoloji ve nano ölçekte talaş kaldırma konu edilmektedir. Nanoteknolojinin günümüzdeki yeri ve önemi hakkında kısa bir bilgi verilip, nano ölçekte talaş kaldırma tekniği ve nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmaları ile parametrelerini incelemek için kullanılan simülasyon yöntemlerine değinildikten sonra, bu simülasyon yöntemleri ile yapılmış olan araştırmalar literatür bazlı verilmektedir.

Anahtar Kelimeler: Nanoteknoloji, Nano Ölçekte Talaş Kaldırma, Monte Carlo, Moleküler Dinamik

ABSTRACT

Nanotechnology, in general sense, is the rearrangement of tiny (approximately in the dimensions of an atom) structures to serve as a function in trade. In other words, the processes among materials less than 100 nanometers range, including measurement, machining, modelling and arrangement, are called nanotechnology. The importance of this kind of technology emphasizes the fact that, experiments on atoms and molecules made it possible for physical, chemical or biological structures to develop or reform. Technically, material characteristics and working specialities of instruments in general rely on the models and theories of traditional processes greater than 100 nanometres. When amounts get smaller than 100 nanometres, those traditional models are not enough. Nano dimensions bring out different physic rules like Quantum, traditional material qualities change and surface structures begin to effect the whole material. In short, a brave new world comes into existence. By this way, the materials caring nanometric characteristics can be controlled and it enables nanometric design.

In order to meet the challenges of high technology, micro and nanometric production is a must. Today's technology makes nanometric cutting of discs, telescopes or laser mirrors possible with sensitive positioning and diamond knives.

In this thesis study, the subject matter is nano technology and nanometric design. Brief information is given about nanometric cutting, its mechanisms. After pointing out certain simulation methods, researches based on these methods are told in detail.

Keywords: Nanotechnology, Nanoscale machining, Monte Carlo, Molecular dynamics

1. GİRİŞ

Materyallerin çelikten yüz kat daha güçlü ama altıda biri ağırlıkta; nakliye işlemlerinin hem ucuz hem de sesten hızlı; bilgisayarların, günümüzde kullandığımız bilgisayarlardan milyonlarca kez daha güçlü ve daha etkili; kanser tedavisinde kullanılan ilaçlardan her yerde fazla fazla bulunabildiğini düşünebiliyor musunuz? Tüm bunlar, gözü dönmüş bir hayalperestin tahminleri değil, aksine son derece ciddi ve saygın bilim adamlarının, hızla gelişmekte olan bu yeni bilim dalını, yani nanoteknolojiyi tarif ederken vardıkları sonuçların yansımaları.

Bu tür tahminleri imkânsız ya da mantıksız görebilirsiniz. Ama görmeyin! Wright Kardeşlerin 1903 yılındaki ilk uçuş deneyiminden, 10 yıldan daha kısa bir süre önce, Royal Society Başkanı Lord Kelvin, “havadan daha ağır uçan makinelerin olması imkânsızdır” açıklamasını kendisinden son derece emin bir tavırla yapmıştı. 1943 yılında ise, IBM’in Yönetim Kurulu Başkanı Thomas Watson, şu meşhur sözleri sarf etmiştir: “Dünya pazarında muhtemelen sadece beş bilgisayara yer var”. Hatta saygıdeğer Albert Einstein da şu sözleri söylerken büyük bir yanılğı içerisindeydi: “Nükleer enerjiyi elde etmek için en ufak bir gösterge bile yok”. Nanoteknoloji’nin ardındaki bilim tam manasıyla gerçek; o şimdiden hayatımızda; durmadan gelişiyor, yayılıyor ve büyüyor; hem de yaşam biçimimizi tepeden tırnağa değiştirmek için gün sayıyor.

Kelime anlamı tam olarak nanoteknoloji, maddenin atom seviyesinde bilinçli olarak işlenmesiyle, daha gelişmiş ve tepeden tırnağa değişmiş materyaller, araçlar ve sistemler elde etme olarak tanımlanabilir. Bunun ne anlama geldiğini tam olarak anlayabilmek için, şunları düşünmemizde yarar var: Maden kömürü ve elmas, aynı materyalden, yani karbon atomdan meydana getirilmiştir. Ne var ki, bu atomlara uygulanan aranjman, bu atomların kullanım biçimlerini ve değerlerini doğrudan etkilemiştir. İkisi de aynı maddenin uzantısı oldukları halde, biri pahalı olmayan bir yakıt kaynağı olurken, bir diğeri pahalı bir nişan yüzüğüne dönüştürülmüştür.

Buradaki hassas nokta, maddenin moleküler bileşiminin ta kendisidir. Atomu işlemeyi başarabilirsek, hemen hemen her üründe, oyunun kuralı baştan aşağı değişir. Yediğimiz yemekten, giydiğimiz elbiseler; ürettiğimiz ürün ve materyallerden, çalıştığımız ve yaşadığımız binalara; kullandığımız araba ve uçaklardan, kendi vücutlarımızın kompozisyonuna kadar

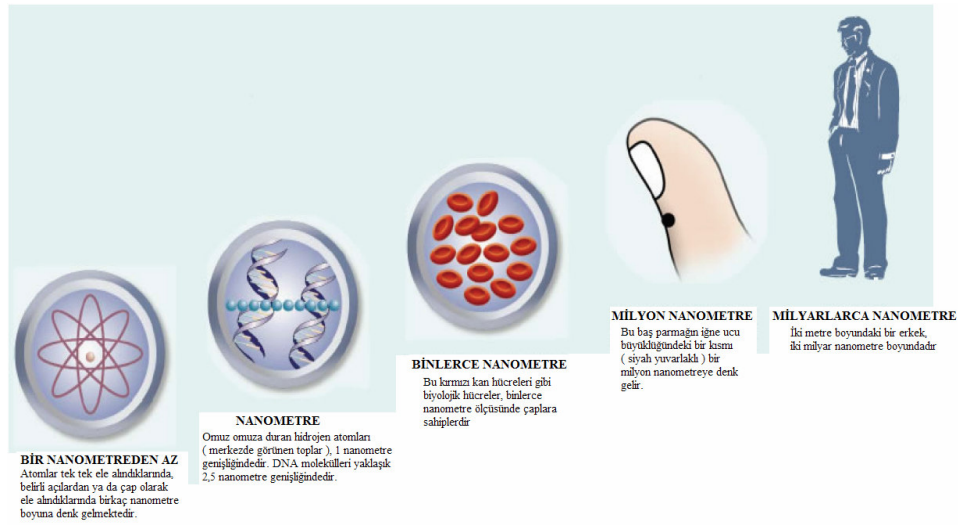
etrafımızdaki her şey atomlardan oluşmaktadır ve nanoteknoloji'nin etkilerinden nasibini alacaktır.

Nanoteknoloji bilimi, maden kömürü içindeki atomları yeniden işleyerek elmas haline dönüştürmeyi henüz başarabilmiş olmasa da, hızla geliştiği ve iş dünyasını önümüzdeki birkaç yıl içinde – ve yakın gelecekte sular seller gibi kapsayacak olduğu kesindir. Nanoteknolojiyi, kendi iş dünyanıza nasıl entegre edeceğinize, nanoteknolojiyi işinize nasıl dâhil edeceğinize ya da bir işbirliği olanağını nasıl kurgulayacağınıza karar vermek için, bu furyanın sakinleşmesini beklemeyi tercih ediyor olabilirsiniz, ancak nanoteknolojiyi, bir Star Trek filminden fırlamış, onun için hazırlanmanıza yetecek daha birçok yılın önümüzde olduğunu hayal ettiğiniz bir konsept olarak algılama hatasına düşmeyin. Kulağa çok uzak yılların bir mahsulü gibi gelse de, on yıl içinde, nanoteknoloji, imalat, sağlık, enerji, tarım, iletişim, nakliyat ve elektronik gibi sayısız endüstriyi etkiliyor olacaktır.

Genel anlamıyla bakıldığında, nanoteknoloji, atomları ve molekülleri tek tek işleme ve yeniden düzenleme yoluyla kullanışlı, materyal, araç ve sistem yaratma sanatı ve bilimidir [62].

Nano terimi (Bodur anlamına gelen Yunanca *nanos* kelimesinden türetilmiştir), bir şeyin bir milyarda biri anlamına gelmektedir. Dolayısıyla, bir nanometre, bir metrenin bir milyarda biridir ve bu da yaklaşık olarak, on hidrojen atomunun genişliğine eşittir. Görüntüsünün nasıl olduğunu merak edecek olursak, bu cümle de kullanılan “i” harfinin üstündeki “nokta”nın genişliği, yaklaşık olarak bir milyon nanometredir. Bu örnek, size tam bir fikir vermediyse, bir inç'in 16000 mil olduğunu varsayarsak, bir nanometre, bir inç'e eşittir. Veya alfabedeki her harf, on nanometre boyunda basılabiliyorsa, *Britannica Ansiklopedisinin tamamı* (30.000 sayfalık yoğun baskının tamamı), bir iğnenin topuzuna sığacak bir alan üzerine kopyalanabilir. Şekil 1.1'de bazı standart nesnelere ve ebatlarını, nanometre bazında göstermektedir. Aynı zamanda Şekil 1.2'de görüldüğü üzere, eğer atomu ufak bir misket farz edersek, kompleks bir molekül bizim yumruğumuz kadardır. Bunu biraz daha açalım. Atomlar bakterilerin 1/10000 büyüklüğündedir. Bakteriler ise bir sivrisineğin 10.000 'de 1'i kadardır. Atom çekirdeği atomun kendisinin 100.000'de biri kadardır. Atomla çekirdeği arasındaki fark ise bir ateşle nükleer reaksiyon arasındaki fark gibidir.

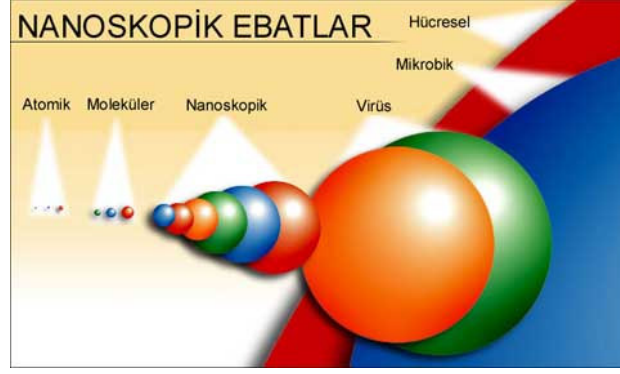
Nanoteknolojiyi doğru şekilde anlamak için gerekli olan en önemli unsurlardan biri de, onun tam olarak ne olduğunu ve ne olmadığını fark etmektedir. Bu tezde, nanoteknolojiden bahsederken, 0.1 nanometreden 100 nanometreye kadar olan uzunluk ölçülerindeki araştırmaların ve teknolojik gelişmelerin eşsiz yapı, araç ve sistemler yaratmak için kullanılması belirtilmiştir. Pek çok örnekte, gerçek yapılar, araçlar ve sistemler çok daha büyük olacaktır ancak hem nano ölçüde oluşturulacakları için hem de nanoteknoloji, tüm bu şeyleri yeni ve/veya gelişmiş fonksiyonlarla donatacağı için, “nanoteknoloji” olarak sınıflandırılacaklardır [62].



Şekil 1.1 Bir nanometre çok küçüktür [89]

Bu geniş tanımlama, iki tane çok önemli kategoriye de kapsamaktadır: nano ölçümleme ve nano işleme. Bilimsel toplumun geniş bir kesimi, bunlardan birincisinin, yani nano ölçümlemenin, 0.1 nanometreden (hidrojen atomunun büyüklüğü), 100 nanometreye (bir virüsün büyüklüğü) kadar uygulanabildiğini kabul etmiştir. Bu ebat dağılımını seçme gerekçesi, sadece bürokratik bir teknik durumundan ibaret değildir. Sayısız materyal, tek başlarına 100 nanometrenin altında bir ölçüye daraltıldıklarında, kuantum mekanik güçlere bağlı olarak, atomik seviyede sergilenen bir dizi benzersiz özellik göstermeye başlıyorlar.

Bu kuantum mekanik etkiler nedeniyle, maddeler daha iletken bir hale gelebilir, ısıyı daha iyi transfer edebilirler ya da mekanik özellikleri modifiye edilebilir hale getirilebilirler.



Şekil 1.2 Nanoskobik ebatlar [62]

Nanoteknoloji'nin bir diğer tarafı da, yani aslında gerçekten heyecan verici tarafı, nano işlemedir; bir diğer deyişle, nesnelere aşağıdan yukarıya tüm atomlarını işleyerek yeniden inşa etmesidir. Nano işleme, iki kategoriye ayrılabilir: nano üretim ve kendi kendine oluşum. Nano üretim, (bir diğer adıyla, nano ölçekte mühendislik) el yapımı aletlerle, ürünlerin, yapıların ve proseslerin atomik olarak gerçekleşen kesin şekillendirilme ve yapılandırma işlemlerini tarif etmektedir. Kendi kendine oluşum ise, diğer taraftan ele alındığında, atom ve moleküllerin, kendiliğinden düzenlenen bir biçime bağlı kaldığı bir süreci tanımlamaktadır. Bu işleyişte, belirli atom ve moleküller ebatlarına, şekillerine, bileşimlerine ya da kimyasal özelliklerine göre birbirlerine bağlanmaktadır. Örneğin, ana doğada, bir ağacın, kendisini çevreleyen hava, su ve kirin içindeki moleküllerden kendisini oluşturması, kendiliğinden oluşumun bir örneği olabilir.

Nanoteknoloji yeni olmasına rağmen, cihazların işlevsel varlığı ve yapıların nanometre boyutu yeni değildir. Bu tür yapılar, yaşamla birlikte var olmaya başlamıştır. Ancak insanların ilk olarak nano ölçekli maddelerin avantajlarını kullanıp uygulamaya ne zaman başladıkları kesin olarak belli değildir. Milattan sonra 4. yüzyılda Roman cam üreticilerinin, nano boyutlu metalleri içeren camlar yaparak, bu konuda ilk uygulamayı yaptıkları bilinmektedir.

Nanoteknoloji alanında, başta NASA olmak üzere dünyanın pek çok büyük araştırma merkezleri ve önde gelen teknoloji enstitüleri milyonlarca dolarlık bütçelerle araştırmalarını büyük bir hızla sürdürmektedirler. Yapılan tüm çalışmalardan sonra yapılan araştırmalar sonucunda iki önemli bulgu ortaya çıkmıştır. Bunlardan birincisi: Malzemelere, nano yapılandırma ile yeni özellikler ve alışılmadık dışında yeni performanslar kazandırılabilir. Malzemelerin her özelliğine ait karakteristikleri ve kritik boyutları vardır. Nano boyuta inildikçe bu özellikler ortaya çıkar ve

bunlar ikinci bulgunun temelini oluşturmaktadır. Birçoğu nanometrik olan karakteristik boyutlarda, maddelerin fiziksel ve kimyasal yapıları farklı özellikler gösterir.

İkinci bulgu; nanoteknolojik alandaki gelişmelere katkıda bulunacak disiplinlerin tanınmasına yönelik olmuştur. Nanoteknoloji çalışmaları; elektrik, makine, kimya mühendisliğinde olduğu kadar; üniversitelerin fizik, kimya departmanlarında da yürütülmektedir. Bir alanda yapılan nanoteknolojik gelişmelerin ve araştırmaların farklı bir alandaki araştırmacı tarafından anlaşılması ve sürdürülmesi zordur. Bu yüzden, farklı dallardaki araştırmacılar bir araya gelip birlikte çalışmalıdır.

Nanoteknoloji; benzeri görülmemiş özelliklerdeki yeni aygıtları üretmek için, atomların ve moleküllerin bilinen özelliklerini kullanacaktır. Eğer bilim adamları, bağımsız atomları ve molekülleri bir yapılanmada belli ölçülerde ve sürede bir araya getirebilirlerse, bu buluş "programlanabilir kendinden inşa ve türeyen makineler çağı"nın başlangıcı olacaktır. Bu yeni teknolojinin çok geniş bir kullanım alanı olacaktır. Bu alanlar; mikro makineler, optik-elektronik elemanların üretimi ve bir araya getirilmesi, nano boyutlu kaplamalar, mono katman katalizörlerle tepkimelerin kontrolü, nano boyutlu elemanlar arası bağlantılar, mikro-nano cerrahi, hücre, doku ve moleküler (DNA gibi) hasar belirlenmesi ve onarımı. Yüzey karakterizasyonu ve modifikasyonu, mikroorganizmaların taşınması, DNA-modifikasyonu olarak özetlenmektedir [7].

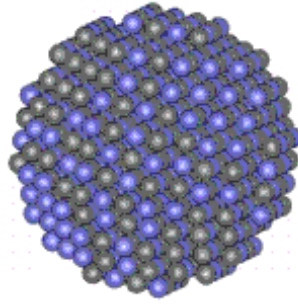
1.1 Genel Bilgi

Nanoteknoloji mevcut mühendisliklerin makro anlamda yaptıkları çalışmaların nano seviyeye indirilmesidir. Maddenin nanometre ölçeğinde; yani atomik, moleküler yapılar düzeyinde denetlenmesi yoluyla yeni malzeme, cihaz ve sistemlerin tasarlanmasını ve üretilmesini konu alan bir teknoloji dalıdır. Nano ön eki küçüklüğün ifadesidir; Yunan alfabesinde milyarinci anlamına gelir ve nanoteknoloji alanında kullanılan ölçü birimi metrenin milyarda biri olan 'nanometre'dir. Diğer bir deyişle nanoteknoloji, yapıların ve cihazların nanometrik ölçüde (0,1-100 nm arasında) gelişimini ve pratik uygulamalarını içeren bilimdir. Buna göre 'küçük'; yani nano boyutlu yapının, detaylı yapısını çıplak gözle algılayabilmemiz için kendi büyüklüğünden on milyon kez daha büyütülmüş olması gerekir. Yan yana dizilmiş 10 hidrojen atomunun bir

nanometre uzunluğunda yer kaplayacağı ya da DNA moleküllerinin 2,5 nanometre genişliğinde olduğu düşünülürse bu teknolojinin hangi boyutlarda iş görmek üzere tasarlanıp geliştirildiği de anlaşılır. Nanoparçacıklar, onlarca atomdan ya da molekülden meydana gelen gruplardır. Çok çeşitli boyutlarda ve şekillerde olabilirler. Moleküllerden ya da kristallerden farklı olarak bir gruplaşma oluşturmuş atom grupları nanoparçacıkların temelini oluşturmaktadır [81].

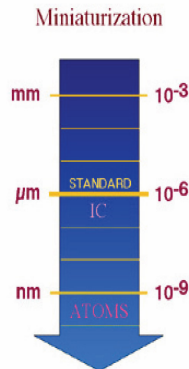
'100 nm', nanoteknolojide önemli bir boyuttur. Çünkü bu limitin altında, kuantum fiziği yasalarında belirlendiği üzere, maddelerin yeni özellikleri gözlemlenebilmektedir.

Nanoteknoloji, temelde moleküler ve atomsal düzeyde malzemeyle uğraşmaktadır ve bu uğraş sonucunda özellikleri, istenen işlemleri yerine getirmek üzere insan eliyle tasarlanan ve moleküler veya atomik düzeyde denetlenebilen yepyeni malzemeler, yapılar, organizmalar, sistemler ve cihazlar yaratılmaktadır.

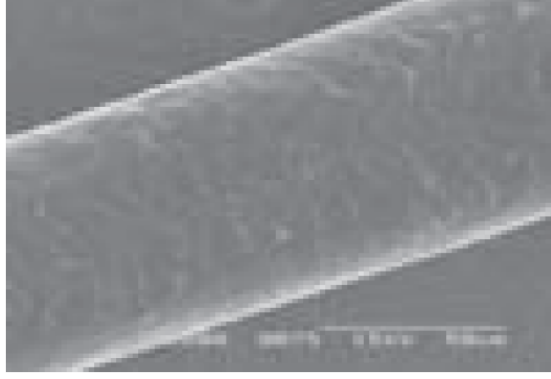


Şekil 1.3 Nanoparçacığın görünüşü [81]

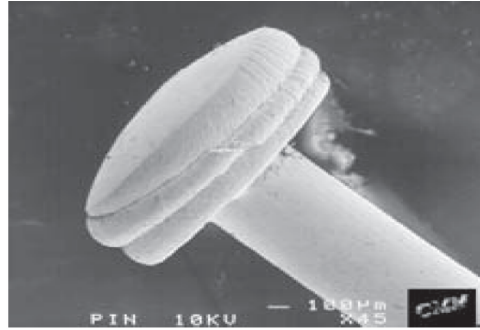
- **$1 \text{ m} = 10^3 \text{ mm} = 10^6 \mu\text{m} = 10^9 \text{ nm}$**



Şekil 1.4 Minyatürizasyon [8]



Şekil 1.5 İnsan saç telinin çapı ~100.000 nm [8]



Şekil 1.6 Toplu iğne başı, 1 mm [8]

Nanoteknoloji, metrenin milyarda biri gibi küçük bir alana; atom, bilgi, madde düzenleme ve yerleştirme mantığına dayanır. Bu mantıkla, nanoteknoloji ile dar bir alana veya küçücük bir parça üzerine bugünkü teknolojinin yirmi katı daha fazla oranda bilgi sığdırılması söz konusudur.

Nanoteknoloji tamamen çok boyutlu bir disiplin olarak adlandırılabilir. Kimya, fizik, yaşam, tıp bilimi, mühendislik disiplini adına güvenilir katkıları olmakla birlikte, genel mühendisliklerin ve pozitif bilimlerin tamamını kapsamaktadır.

Nanoteknoloji özet anlamıyla; atomik-moleküler boyutta maddenin mühendisliğinin yapılarak yepyeni özelliklerinin açığa çıkarılmasıdır. Nanometre ölçek olarak metrenin milyarda birini ifade etmektedir. Bir nanometrede yan yana dizilmeyle ortalama 5-10 atom bulunur. Bir kenarı 2.5 nm boyutlu bir küp, yaklaşık 1000 atom ihtiva eder. Nano boyutlara inildiğinde madde makro-boyutlardan çok daha farklı fiziksel, kimyasal ve biyolojik özellikler kazanmaktadır. Nano-sistemlerin fabrikasyonu, karakterizasyonu ve değişimi ile daha önce varlığı bilinmeyen

çeşitli fonksiyonlar ortaya çıkarılarak; bunların verimli bir şekilde insanlığın kullanımına sunulması ile hayat standartlarında önemli ilerlemeler kaydedileceği açıktır. Nano seviyelerde görüntüleme, mekanik kuvvetler uygulayabilme ve mekanik özellik tayini, nano saniyelerde başlayıp biten çeşitli işlemlerin yakalanabilmesi ve izlenmesi, nano-ölçeklerde kimyasal analiz gibi analitik inceleme tekniklerindeki ilerlemeler beraberinde, nanoteknoloji bilimini mühendisliğe ve oradan da uygulamalara ulaştırmış ve sensörlerde, hafıza elemanlarında, tıpta etkili yeni cihazların ortaya çıkmasını sağlamıştır.

Nanobilim ve nanoteknolojinin odak noktaları; düşük boyutlarda çalışmanın yanında, atomik boyutlarda görüntülemede deneysel yöntemlerin geliştirilmesi, nano boyutlarda ölçüm yapabilme teknikleri, düşük boyutlarda malzeme üretebilme ve malzeme yapısını atomik boyutlarda kontrol edebilme ve bu amaçlara yönelik cihazların geliştirilme yöntemleridir [70].

Peki, daha küçük boyutlara inmeyi bu kadar özel kılan nedenler nelerdir? İşte bu nokta cevapların daha karmaşıklaştığı ve dallanıp budaklandığı noktadır. Burada çok önemli bir unsur var ki o da nanoteknolojinin sadece minyatürleştirmek olmadığıdır. Nano boyutlara gelindiğinde kuantum gibi farklı fizik kuralları işlemeye başlıyor, geleneksel malzeme özellikleri değişiyor, yüzey davranışı bütün malzemeyi daha baskın bir şekilde etkiler hale geliyor. Kısaca yepyeni bir dünya meydana geliyor. Bu sayede nano boyutlardaki malzemelerin özellikleri kontrol edilerek, farklı özellikler ihtiva eden yepyeni malzemeler tasarlanabilme olasılığı ortaya çıkıyor [86].

1.1.1 Nanoteknoloji'nin Amaçları

- Nanometre ölçekli yapıların analizi,
- Nanometre boyutunda yapıların fiziksel özelliklerinin anlaşılması,
- Nanometre ölçekli yapıların imalatı,
- Nano hassasiyetli cihazların geliştirilmesi,
- Nano ölçekli cihazların geliştirilmesi,
- Uygun yöntemler bulunarak nanoskopik ve makroskopik dünya arasındaki bağın kurulmasıdır [90].

1.1.2 Nanoteknolojinin Kullanım Alanları

Medikal Alan: Nanoteknoloji pastasında en büyük dilime gözünü diken sağlık sektörüdür. Henüz, oluşumunun başındayken bile, nanoteknolojinin nimetlerinden en çok faydalanan alan olarak göze çarpıyor.

Medikal alandaki gelişmeler; mikro cerrahi, DNA modifikasyonu, yapay kas lifleri gibi konularda yoğunlaşıyor.

Sağlığı tehdit edici nedenler çoğunlukla moleküler ve hücresel boyutlarda zarar verdiği için bunları çözümlenebilecek tedavi şekillerinin de moleküler ve hücresel boyutta olması gerektiği kanısında olan bilim adamları, çalışmalarını bu konu üzerine yoğunlaştırmışlardır. Buradan hareketle çözüm amaçlı bazı varsayımlar ortaya koymuşlar. Bunlar; damarlarımızda dolaşan nanorobotların kan dolaşımı ile vücudun istenilen bölgesine gidip hasar görmüş doku veya organları, sağlam olanlara zarar vermeden onarabilecekleri, tıkanan damarları, yine aynı yolla, açabilecekleri ve bunların yanı sıra vücudumuzda dolaşan nanorobot sürüleri sayesinde ek bir bağışıklık sistemi kazandırabilecek olmalarıdır.

Bütün bunların ışığında, nano gelecekte medikal alanda bizi moleküler düzeyde savaşan doktor robotların beklediğini söyleyebiliriz.

Malzeme Bilimi: Malzeme bilimi alanında nanotüpler, nanotoplar ve nanoçubuklar, nanoteknolojinin bu alandaki ürünleridir. Genel olarak diğer alanlarda kullanılacak nano ölçekli malzemelerin oluşturulmasıyla ilgilenen malzeme bilimi, aynı zamanda nanoteknolojinin günümüzde kullanılan ilk ürünlerinin oluşturulmasındaki büyük katkısıyla da öne çıkıyor.

Gelecekte üretilecek hafif ve sağlam nitelikli malzemeler savunma sanayiinden, uçak yapımına, uzay araçlarından, astronot kıyafetlerine kadar birçok alanda kullanılacaktır.

Savunma Sektörü: Zırh yapımında kullanılması planlanan nanoteknolojik malzemeler sayesinde zırhlar, çok daha sağlam ve çok daha hafif olacaktır. Şüphesiz bu bütün dünya ülkelerinin sabırsızlıkla beklediği bir gelişmedir.

Uzay ve Havacılık Sektörü: Kuşa benzer kanatlarıyla yakıt harcamadan uçabilecek uçaklar, yere düştüğü zaman kendi kendini onarıp, tekrar havalanabilecek hava taşıtları, uzay araçlarında kullanılması planlanan hafif ve sağlam malzemeler sayesinde bugün yaşanan problemler de ortadan kalkacaktır. Düşünün ki Mars'ta arızalanan bir uzay aracı kimseye ihtiyaç duymadan kendi kendini tamir edip yoluna devam edecek.

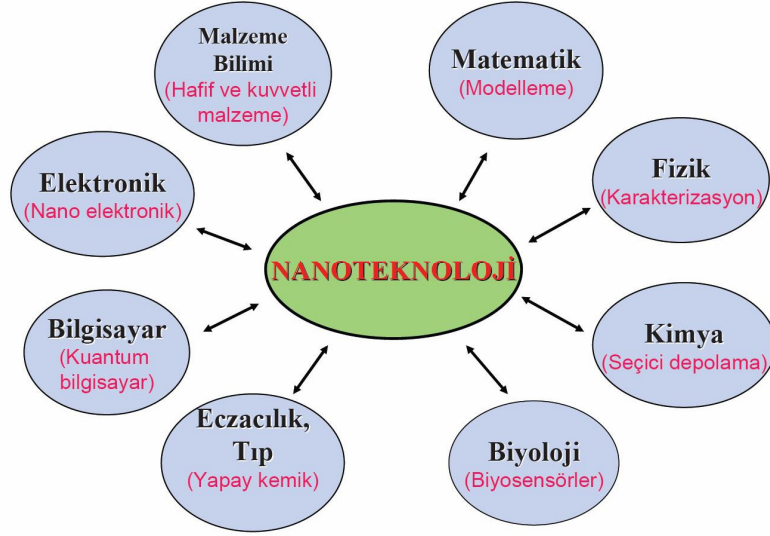
Bilgisayar Teknolojileri: Nanoteknolojinin kullanım alanlarından biri olarak önerilen kuantum bilgisayarlarının geliştirilmesi ile günümüzün en modern bilgisayarları ile kıyaslanamayacak seviyelerde işlem gücü elde etmek mümkün olacaktır. Yıllar önce üretilen ilk bilgisayarlar bir oda büyüklüğündeydi, hızları ve işlemcileri bugünkü bilgisayarlarla kıyaslanamayacak kadar yavaştı. Bugün ise GHz hızındaki işlemciler kullandığımızı göz önünde bulundurursak geldiğimiz noktaya şaşırılmamak mümkün değil. Ama nano boyuttaki malzemeler sayesinde 20 yıl sonraki işlemciler hakkında yorum yaptığımızda ki bunlar artık hayal değil, 60 yılda kat edilen yolun nanoteknoloji sayesinde 20 yılda fazlasıyla aşılacağına inanılması pek de güç değildir [89].

Bu konuda en çok nano malzemeler gelecek vaat etmektedir. Çok hafif ve dayanıklı olacak olan bu malzemelerden yapılacak araba, uçak ve uzay araçları ile çok az enerji tüketimiyle daha uzun ve güvenli yolculuklar yapılabilecektir. Ayrıca doğada mevcut olan birçok teknoloji hayata geçirilebilecektir. Örneğin; lotus çiçeği yaprağının hiç ıslanmaması ve kirlenmemesi özelliğinden yararlanılarak kirlenmeyen, ıslanmayan kaşıklar, çatal, tabaklar, elbiseler üretililebilecektir. Bu teknolojinin uzun vadede kullanılacağı alanlar şunlardır:

- Mikroskobik moleküler bilgisayarlar, enformasyon teknolojisi dünyasında bir devrim yaratacaklardır. Moleküler bilgisayarlar sadece hesap ve işlem yapmayacaklar, aynı zamanda kendilerini de çoğaltabileceklerdir.
- Bütün eşyalar atomlarına kadar ayrılıp tekrar daha yararlı malzemelerin üretilmesinde kullanılabileceğinden mükemmel bir geri dönüşüm sağlanmış olacaktır.
- Dünyadaki çevre kirlenmesinin engellenmesi ve mevcut kirlenmiş kaynakların otomatik olarak temizlenmesi mümkün olabilecektir.
- İlaç sektöründe nanoteknoloji alanında sanal olarak hastalıkların önüne geçilmesi ve yaşlanmanın yavaşlatılması mümkündür. Özel bir bilgisayar tarafından kontrol edilen ve vücudumuzun yapay bağışıklık sistemini oluşturacak nanorobotların üretilmesi; moleküler

seviyede hücrelerin tamir edilmesi, DNA'yı işleyebilecek hatta yaşlanmayı durdurabilecek robotların üretilmesi de teorik olarak mümkündür.

- Vücuda gönderilecek programlanabilir makinelerin kullanımları çok genişleyebilecektir. Hatta bu makineler; vücuda ek bir bağışıklık sistemi de kazandırabilirler. Hedef hücrelerin özellikleri programlandığında, örneğin, grip virüslerine saldırabilecek ve bünye hastalanmadan virüs istilasını durdurabileceklerdir.
- Asfalt yerine yüksek etkinlikli ve kendini türetebilecek solar hücrelerden oluşan yollar yapılabilecek, bu şekilde dünyada enerji tasarrufu sağlanabilecektir.
- Moleküler gıda sentezi ile kıtlık ve açlığın önlenmesi mümkün olabilecektir.
- Nanoteknoloji çevre konusunda da kullanılabilir. Yapılan uygulamalarla, temiz su kaynaklarını kirleten maddeler ayrıştırılabilecek ve denize dökülen petrol çözülerek temizlenebilecektir.
- Atom seviyesinde üretim yapılacağından çevreye verilecek zarar minimuma indirilecektir [91].



Şekil 1.7 Nanoteknolojinin kullanım alanları [8]

1.2 Nanoteknolojinin Tarihçesi ve Gelişimi

Milattan sonra 4. yüzyılda Roman cam üreticilerinin, nano boyutlu metalleri içeren camlar yaparak, bu konuda ilk uygulamayı gerçekleştirdikleri bilinmektedir. Bu dönemde nano boyutlu metaller içeren camlardan yapılmış olan Lycurgus kupası, Londra'daki British Müzesi'nde

sergilenmektedir. Bu, kral Lycurgus' un ölümünü resmetmekle birlikte gümüş ve altın nanoparçacıkları içerir. Kupa; ışıkla temas ettiği zaman yeşilden kırmızıya doğru renk değişimi gösterir. Camın içinde metal parçacıklarının kullanılması ile yapılan bu uygulama ortaçağ kiliselerinin pencerelerinde de kullanılmıştır.

1661'de İrlandalı kimyacı Robert Boyle tarafından yayınlanan makalede atom kümelerinin önemi anlatılmıştır. Boyle'un bu makalesinde, Aristotle'nin maddenin dört ana elementten (toprak, ateş, su, hava) oluştuğuna dair tezi eleştirilmiştir. Boyle, bunun yerine maddenin küçük parçacıklarının, farklı yollarla birleştiğini savunmuştur.

Işığa duyarlı gümüş nanoparçacıkların üretimi 18. ve 19. yüzyıllarda nano boyutlu uygulamaların gelişimini sağlamıştır. Fotoğraf filmi, gümüş bromür gibi gümüş bileşimlerini içeren, emülsiyon, ince bir jelâtin katmanıdır. 18. yüzyılın sonlarına doğru, İngiliz bilim adamları Theomas Wedgewood ve Humprey Davy, gümüş nitrat ve gümüş klorür kullanarak görüntü üretmişlerdir. Ancak bu görüntülerin ömrü çok uzun sürmemiştir. 19. yüzyılda birkaç Fransız ve İngiliz bilim adamı, bu problem üzerine çalışmalar yapmışlardır. Daha sonra elektromanyetik teoriyle ilgilenen bilim adamı Clark Maxwell, 1861 yılında ilk renkli fotoğrafı üretmiştir. 1883 yılında Amerikalı kâşif George Eastman gümüş bileşimlerini içeren emülsiyonla kaplı, uzun ve ince fotoğraf filmini üretmiştir. Daha sonra, bunu esnek ve bükülebilir bir film halinde geliştirmiştir ve bu şekilde aynı filme birkaç fotoğraf sığmasını sağlamıştır. Bu da nano ölçekli madde üretimine dayanan nanoteknolojinin, yeni olmadığını gösterir.

1857'de Micheal Faraday, metal parçacıklarının, camların rengini nasıl etkilediğine dair bir yazı yayınlamıştır. Gustav Mie, camların renginin, içerdiği metal çeşidi ve büyüklüğüne göre nasıl değiştiğini araştıran ilk bilim adamı olmuştur. Bu araştırma ile ilgili yazısı, 1908'de Almanya' da fizik dergilerinde yayınlanmıştır.

Richard Feynman, 1965 yılında fizik dalında, kuantum elektrodinamiği ile ilgili yaptığı nanoteknoloji projesiyle Nobel ödülü almıştır. Zamanının en iyi teorik fizikçilerinden biri olan Feynman, kendi konularında yaptığı araştırmalarla çok fazla dikkat çeken bir bilim adamı olmuştur. Bilimin çok çeşitli alanlarında, önemli araştırmalar yapmıştır. 1960'da, Amerikan Fizik Topluluğu'nun bir toplantısında, 'There is plenty of room at the bottom' (Temelde Birçok Oda

Var) konulu bir konferans vermiştir. Bu konuyla Feynman, nano ölçekli maddelerin potansiyelinden ve varlığından bahsederek, yeni bir spekülasyona neden olmuştur. Birkaç atom genişliğinde, elektron ışınları ile oyulmuş çizgiler tasarlamıştır. Tasarlanan bu çizgiler ise bugün, silikon çipleri yapımında kullanılmaktadır. Feynman, atomların tek tek üretilmesi ile farklı özellikler taşıyan yeni küçük yapıların oluşturulmasının mümkün olabileceğini savunmuştur. Feynman'ın bu görüşü, bugün tarama tünelleme mikroskoplar (STM) varlığında gerçekleştirilmektedir. Daha güçlü bilgisayarlar üretmek için element olarak kullanılacak nanometrik ölçümdeki elektrik devrelerinin yapılandırılmasını tasarlamıştır. Günümüzde nanoteknoloji araştırmacıları da biyolojik sistemlerdeki nanoyapıların farkına varmıştır. Feynman'ın o yıllarda savunduğu tezlerin çoğu gerçekleşmiştir. Kendi zamanındaki bilim adamları Feynman'ın savunduğu fikirleri önemsememiştir.

Bu yıllarda nanoteknolojik yapılandırmaya dair başka düşünceler de oluşmuştur. 1957'de IBM'de çalışan fizikçi, Ralph Lauder, nano boyuttaki elektronik yapılarla ilgili bir takım fikirler ortaya sunmuştur. Lauder bu fikirleriyle, yapılar üzerindeki kuantum-mekanik etkilerin önemini vurgulanmıştır.

Feynman, nanoteknolojik çalışmalarla ilgili konferansını 1960'da vermesine rağmen, nanoteknolojinin deneysel çalışmaları 1950 ve 1960'lı yıllarda küçük metal parçalar üzerinde gerçekleştirilmiştir. Fakat o yıllarda bu tür çalışmalar 'nanoteknoloji' adı ile gündeme gelmemiştir.

1956'da Uhlir, geçirgen silikon yapı ile ilgili ilk incelemesini yapmıştır. Ancak 1990'a kadar bu malzeme ile ilgili herhangi bir çalışma gerçekleştirilememiştir.

Bu alanda diğer bir çalışma, alkali metal nanoparçacıkların üretimi olmuştur. Bu uygulama sodyum ve potasyum metallerinin buharlaştırılmasından sonra bu malzemelerin daha soğuk yapılar üzerinde soğutulması ve yoğunlaştırılması sonucu yapılmıştır.

1960'larda, ferroakışkan denilen, manyetik akışkan maddeler geliştirilmiştir. Bu maddeler nano ölçekli manyetik parçacıkların, akışkan içerisindeki dağılması ile oluşmuştur. Bu parçacıklar, yüzey aktif ajanları ve akışkan taşıyıcılar varlığında, öğütülerek bu boyuta getirilmiştir.

1960'lardaki yapılan diğer bir araştırma da elektromanyetik titreşim konusunun incelenmesi olmuştur. Bu araştırma, kolloid olarak adlandırılan nano boyuttaki metal parçacıkların içine elektron iletimini kapsamaktadır. Bu parçacıklar; potasyum ve sodyum asitleri gibi pozitif metal iyonları ve negatif moleküler iyonları içeren katıların, termal olarak bozunmasıyla üretilir.

1970'lerde, sodyum metal iyonlarıyla yapılan kütleli spektroskopik çalışmalar sayesinde metal nanoparçacıkların bazı yapısal özellikleri keşfedilmiştir. 1978'de Herman ve arkadaşları, sodyum atomlarından oluşan sodyum kümelerinin iyonlaşma potansiyelini hesaplamıştır. Bu çalışma, kümelerin iyonlaşma potansiyeli ile ilgili olan Jellium modelinin gelişimi için bir ön çalışma niteliğindedir.

1980'lerde nanoyapılı maddelerin fabrikasyonu için uygun metotlar ortaya çıkmış olmasına karşın bu yıllarda nanoteknolojik uygulamaların gelişimi çok fazla gözlenmemiştir. 1981'de yüksek güçte lazer kullanılıp sıcak plazma içinde metal buharlaştırılmış ve metal kümelerinin yapımı için yeni bir metot geliştirilmiştir. 1985'de bu metot kullanılarak fulleren (C_{60}) sentezi yapılmıştır.

Bu yıllarda, IBM Araştırma Laboratuvarı'ndaki araştırmacılar, G. K. Binnig ve H. Rohrer, tarama tünelleme mikroskopunu (STM) geliştirmişlerdir. 1986'da, bu çalışma ile Nobel Ödülü'ne layık görülmüşlerdir. Tarama tünelleme mikroskopunu ve atomik kuvvet mikroskopunun (AFM) icadı ile birlikte, nanoyapıların atomik kontrolü, karakterizasyonu ve gözlemi için yeni önemli cihazların yapılmasına olanak sağlanmıştır.

1987'de, B. J. Vanwees ve H. Vanhowten, akım-voltaj eğrilerini incelemişlerdir. Cambridge Üniversitesi'nde de buna paralel çalışmalar yapılmıştır. Aynı dönemlerde, T.A. Fulton ve G. J. Dolan, Bell Laboratuvarları'nda, tek elektron transistörünü yapmışlardır. Bu dönemde, fabrikasyon metotlarının geliştirilmesi ile 10 nm boyuttaki yapıların üretimi sağlanmıştır. Bu on

yıl içerisinde, metal, manyetik ve manyetik olmayan maddelere alternatif olarak, üstün özellikli nanoyapılı katmanlar üretilmiştir. Nanometre boyutlu bu katmanlar, bilgisayardaki manyetik depolama aygıtları üzerinde önemli uygulamalar yapılmasını sağlamıştır.

1980'lerin sonunda, fotonik kristaller teorik olarak formüle edilmiş olmasına rağmen, ilk üç boyutlu periyodik fotonik kristal 1991'de Yablonovitch tarafından üretilmiştir. 1990'larda, Lifima, karbon nanotüpünü yapmış ve C_{60} yapısı içinde ferromanyetizma ve süper iletkenlik bulunmuştur.

Karbon nanotüpüne dayanan alan etkili transistör de bu zamanlarda ortaya çıkmıştır. Moleküllerin metal yüzeyler üzerinde kendi kendine bir araya gelmesi (self-assembly) ile ilgili çalışmalar geliştirilmiştir. "Self-assembly" teorisi moleküllerin kendiliğinden metal yüzeyler üzerinde bağlanmasına açıklık getirerek, yüzeyler üzerinde moleküllerin istenilen sıraya göre dizilmesini sağlamıştır. Tiyol ve disülfid bileşimlerinin altın üzerinde birleşmeleri, bu konuda yapılan en yaygın uygulamadır.

1996'da Ulusal Bilim Kurumu liderliğinde, birkaç devlet kurumu birleşerek bir komisyon oluşturmuşlar, nanoteknolojinin dünyadaki yerini araştırmak ve gelişmelerini incelemek üzere çalışmalar yapmışlardır. Bu komisyon devletin nanoteknoloji araştırmaları için kapital ayırması ile ve nanoteknoloji araştırmalarının bölgesel olarak yürütülmesi amacıyla devlet tarafından desteklenmiştir.

Tüm bu çalışmalardan sonra yapılan araştırmalar sonucunda iki önemli bulgu ortaya çıkmıştır. Bunlardan birincisi: Malzemelere, nanoyapılandırma ile yeni özellikler ve alışılmadık dışında yeni performanslar kazandırılabilir. Malzemelerin her özelliğine ait karakteristikleri ve kritik boyutları vardır. Nano boyuta inildikçe bu özellikler ortaya çıkar ve bunlar ikinci bulgunun temelini oluşturmaktadır. Birçoğu nanometrik olan karakteristik boyutlarda, maddelerin fiziksel ve kimyasal yapıları farklı özellikler gösterir.

İkinci bulgu; nanoteknolojik alandaki gelişmelere katkıda bulunacak disiplinlerin tanınmasına yönelik olmuştur. Nanoteknoloji çalışmaları; elektrik, makine, kimya mühendisliğinde olduğu

kadar; üniversitelerin fizik, kimya departmanlarında da yürütülmektedir. Bir alanda yapılan nanoteknolojik gelişmelerin ve araştırmaların farklı bir alandaki araştırmacı tarafından anlaşılması ve sürdürülmesi zordur. Bu yüzden, farklı dallardaki araştırmacılar bir araya gelip birlikte çalışmalıdır. Nanoteknolojinin karmaşık yapısı bunu gerektirmektedir. Örneğin Feynman, nanoyapılı cihazlar tasarlamak için çok fazla biyoloji bilgisi edinmek gerektiğini savunur. Diğer bir örnek; nanoyapılar tasarlayan bir fizik bilimci aminoasit ve proteinin yapısını bilmeden bunu gerçekleştiremez.

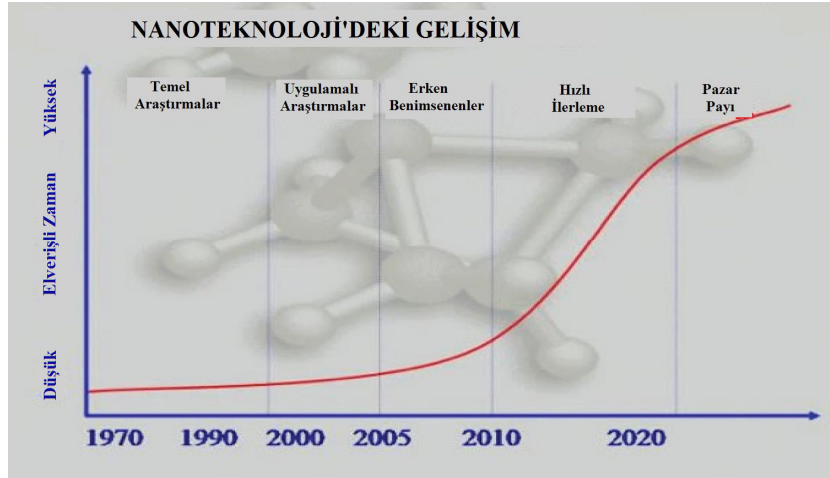
Nano yapıları malzemelerin uygulama potansiyeli, bu konuya olan ilginin büyüklüğünün en büyük nedenidir. Bu potansiyelin sonucu olarak günümüzde nanoteknolojinin ticari olarak birçok uygulaması görülmektedir.

- Yüksek manyetik dirençli nanoyapılı malzemeler ticari uygulamalarda kullanılmaya başlanmıştır.
- Manyetik teyplerin, depolama kapasitelerinin artırılması amacıyla nano boyutlu yapılandırılmaları, en aktif araştırma alanlarından.
- Bir diğer önemli araştırma konusu, bilgisayarların temel yapısı olan anahtarların boyutunun nanoteknolojik uygulama ile küçültülmesidir.
- Malzemelerin mekanik özellikleri üzerinde nanoyapılandırmanın rolü ve etkisi, diğer potansiyel uygulama alanıdır.
- Farklı tipteki nanoyapıların oluşumu için kullanılan fabrikasyon metotları da nanoteknolojik araştırmanın diğer bir boyutudur.
- Gaz sensörlerinden bilgisayar hızını artırıcı anahtarların elementlerine kadar uygulama alanı olan karbon nanotüpleri gibi, geniş bir araştırma alanına sahiptir [52].

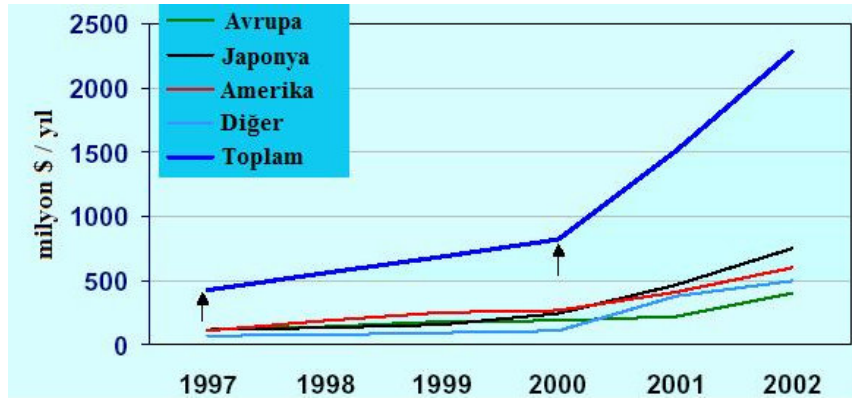
1.3 Nanoteknolojinin Günümüzdeki Durumu

Dünya nanoteknoloji pazarının 2010-2015 yıllarında yıllık yaklaşık 1 trilyon doları bulması beklenmektedir. Bu alanda 2020 yılına kadar 4 evrenin olacağı varsayılmaktadır. 2003'e kadarki ilk evrede nanotoz ve parçacıkları bunlara bağlı ince filmleri ve seramik, plastik malzemelerden oluşan pasif nanoyapılar; 2005'deki ikinci evrede transistörlerde, yükselticilerde, ilaç endüstrisi gibi yerlerde kullanılan aktif nanoyapılar; 2010'da 3 boyutlu nanoyapılar ve bunları oluşturma

teknikleri ve 2020'deki son devrede moleküler nanoteknoloji görülecektir. Konuya dünyada en büyük yatırımı ABD yapmaktadır. 1993 yılında kurulan Ulusal Bilim ve Teknoloji Konseyinin – NSTC bir birimi olan Nanobilim Çalışma Gurubu IWGN 1999 Ağustos ayında ilk genel raporunu hazırlayarak nanoteknolojide araştırma yönlerini açıklamıştır. Aynı yıl nanoteknolojiye 255 milyon dolar yatırım yapılmıştır. Ulusal nanoteknoloji yatırımı, 2003 yılı için 710 milyon dolar olarak kararlaştırılmıştır. Bu yatırımı 650 milyon dolar ile Japonya, 400 milyon dolar ile Avrupa geneli takip etmektedir. Şekil 1.9'da yıllara göre dünya nanoteknoloji yatırımı görülmektedir:



Şekil 1.8 Nanoteknoloji'deki gelişim [92]



Şekil 1.9 Yıllara göre dünya'da nanoteknoloji yatırımı [77]

Nanoteknoloji alanında, başta NASA olmak üzere dünyanın pek çok büyük araştırma merkezleri ve önde gelen teknoloji enstitüleri milyonlarca dolarlık bütçelerle araştırmalarını büyük bir hızla sürdürmektedirler.

Kolorado Bilim Konferansı'nda, 2004 yılı içerisinde, bir tuz zerresi üzerine monte edilebilecek nano parçacıkların ilk yürüyen çip yapımında kullanılabileceği, bu çalışmada başarılı olduğu takdirde gelecek adımın; sinek büyüklüğündeki bir robot böcek yapımı olduğu dünya basınına açıklanmış ve bu büyük bir ilgiyle karşılanmıştır. Bilgisayar alanında bu gelişmelere paralel olarak, malzeme bilimindeki araştırmalarla çelikten çok daha sağlam fakat çok daha hafif ve esnek, nano boyutlarda karbon borular yapılmıştır. Üretim maliyeti günlük hayatta kullanılmasına şimdilik imkân vermeyen karbon boruların gittikçe ucuzlaması, imalat alanında bir devrim yaratacaktır. Başka örnek olarak deniz suyunu temizleme ve tuzdan arındırma amacıyla üretilen nano makineler, aktifleştirilmiş karbon atomlarından, genişlikleri metrenin milyarda biri kadar olan "mikro borular" üretmekte kullanılabileceklerdir. Elektrik akımıyla harekete geçirilen bu borular, deniz suyundaki sodyum ve klor atomlarını ayrıştırabileceklerdir. Bu teori de şu an proje aşamasına geçmiş durumdadır. A.B.D Boston Üniversitesi'nde bağımsız bir grup araştırmacı konu üzerinde çalışmalarına başlamıştır [77].

1.3.1 Avrupa Birliği

Avrupa Birliği'nin 1994 ve 1998 yılları arasında yürütmüş olduğu 4. Çerçeve programı kapsamında nanoteknoloji alanında araştırma yapan yaklaşık 80 firma desteklenmiş, 1998 ve 2002 yıllarını kapsayan 5. Çerçeve programı kapsamında ise bu alana yapılan destek miktarı yıllık 45 milyon Euro civarında olmuştur. Geniş bir yelpazede yapılan destekler arasında nano-elektronik cihazlar, karbon nanotüpler, biyo-sensörler, moleküler tanımlama sistemleri, nano-kompozit malzemeler ve yeni mikroskop teknolojileri öne çıkmaktadır.

Nanoteknolojinin birçok alanda yenilikçi (inovatif) ürünler geliştirilmesi için gelecek vaat etmesi sebebiyle, 2002-2006 yıllarını kapsayacak şekilde yürütülen 6. Çerçeve Programı'nda Nanoteknoloji öncelikli alan olarak yer almış ve bu alanda yürütülecek çalışmaları desteklemek üzere 1.3 milyar Euro bütçe ayrılmıştır. 6. Çerçeve Programının tematik öncelikli bu alanı: nanoteknoloji ve nano bilim çalışmalarını, bilgi tabanlı çok işlevli malzemeler ile yeni üretim

prosesleri ve araçlarının geliştirilmesini kapsar. Nanoteknoloji öncelikli alanının iki ana hedefi vardır.

Birincisi yenilikçi nanoteknoloji ürünlerinin günümüzün endüstriyel sektörlerine tanıtılması, ikincisi ise yeni malzeme, yeni araç ve yeni ürünlerin geliştirilmesi ile yeni endüstri kolları ve sektörleri yaratılmasını teşvik etmek olarak özetlenebilir. Ayrıca Avrupa Birliği ülkelerinin birçoğunda nanoteknoloji alanında gerçekleştirilen araştırma ve geliştirme çalışmalarını destekleyen ulusal programlar bulunmaktadır.

1.3.2 Amerika Birleşik Devletleri

Amerika Birleşik Devletleri'nde 1999 yılında yayınlanan ulusal nanoteknoloji bildirgesi ile ülkenin nano teknoloji alanındaki öncelikleri belirlenmiş ve bu konuda yapılan AR-GE çalışmaları için bütçeler ayrılmıştır. 2000 yılında nanoteknoloji alanında yapılan AR-GE çalışmalarına hükümet tarafından sağlanan destek 420 milyon dolar civarında iken 2001 yılı bütçesinde bu alana ayrılan pay yaklaşık 520 milyon dolar'a ulaşmış, 2003 yılı için ise yaklaşık 700 milyon dolar olarak belirlenmiştir.

Aralık 2003 tarihinde Başkan Bush 2005 yılından başlayarak 4 yıl süreyle nanoteknoloji alanında gerçekleştirilen araştırma ve geliştirme projelerinde kullanılmak üzere 3,7 milyar dolar tutarında fon ayrılmasını onaylamıştır. Amerika Birleşik Devletleri'nde yürütülen çalışmalar, nano yapı malzemeler, moleküler elektronik, nanoparçalar, biyo-sensörler ve biyo-enformatik, kuantum bilgisayarlar, ölçüm ve standart geliştirme çalışmaları, nano ölçekte teori, modelleme ve simülasyon, nano robotlar gibi alanlarda yoğunlaşmıştır. Bu çalışmalar Ticaret Departmanı (DOC), Savunma Departmanı (DOD), Enerji Departmanı (DOE), Ulaşım Departmanı (DOT),NASA, Ulusal Sağlık Enstitüsü (NIH) ve Ulusal Bilim Kurumu (NSF) gibi kurumlar tarafından desteklenmektedir.

ABD'de nanoteknoloji üzerine kurulan firmaların sayısı 2002 yılında bir önceki yıla oranla iki kat artmıştır ve bu eğilimin 2004 yılında da tekrar etmesi beklenmektedir.

1.3.3 Asya

Asya ülkeleri içinde nanoteknoloji'ye yatırım yapan ülkelerin başında Japonya gelmektedir. Japonya dünyada ABD'den sonra nanoteknoloji alanında en fazla AR-GE harcaması yapan ikinci ülke konumundadır. Nanoteknoloji üzerine yapılmakta olan yatırımın her yıl %15 ile %20 oranında artmakta olduğu Japonya'da nanoteknoloji tanımı dünyanın geri kalan ülkelere oranla çok daha geniş kapsamlıdır. Moleküler seviyede yapılan birçok araştırma (örnek vermek gerekirse, DNA üzerine yapılan araştırmalar) nanoteknoloji tanımı içerisinde yer almaktadır. Ayrıca NEC ve Sumitomo gibi firmalar karbon nanotüpler alanında çalışmalar yürütmekte, araştırmalar gerçekleştirmektedir.

Asya ülkeleri içerisinde Japonya'yı takip eden ülkeler arasında Çin ve Kore öne çıkmaktadır. Çin ülkede yürütülen nanoteknoloji odaklı birçok araştırma ve geliştirme çalışmasını Çin Bilimler Akademisi kanalıyla yürütmektedir. Bu ülkede yürütülen çalışmaların birçoğu yarı iletken üretme teknikleri ve nanoteknoloji tabanlı elektronik cihazlar üzerine yoğunlaşmaktadır. Araştırma merkezlerine ek olarak nanoteknoloji kullanılarak üretilen ürünlerin ticarileşmesine imkân sağlamak amacıyla çalışan birçok kuruluş bulunmaktadır.

Kore nanoteknolojinin mikro elektronik uygulamaları alanında yoğunlaşmıştır. Nanoteknoloji çalışmalarının sürdürüldüğü birçok üniversite ve araştırma merkezi olduğu gibi Kore'nin en büyük şirketlerinden biri olan Samsung mikro elektronik uygulamalar ve mikro elektromekanik sistemler (MEMS) üzerine araştırmalar yürütmektedir.

Tayvan, Singapur, Tayland Hindistan ve Vietnam nanoteknoloji'yi öncelikli alan olarak belirlemiş ve uygun çerçeveyi belirlemek için adımlar atmaktadır [83].

1.3.4 Ülkemizdeki Durum

Nanoteknoloji Türkiye'de yeni yeni gündeme gelmeye başlayan konudur. Ama Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü, İzmir Y.T.E, Gazi Üniv. ve Bilkent Üniv., Anadolu Üniversitesi İleri Teknolojiler Araştırma Birimi gibi merkezlerin bu alanda çalışmaları var. Ancak ülkemizdeki nanoteknoloji araştırmalarının çoğu kuramsal ve bireysel düzeyde. Avrupa Birliği'nin 6. Çerçeve Programı sayesinde nanoteknoloji araştırmalarımız yeniden yapılanma ve ivme kazanmış

bulunuyor. Bu arada nanoteknoloji, TÜBİTAK tarafından hazırlanan Vizyon 2023 Programı'na öncelikli alanlardan biri olarak alınmış bulunuyor.

Bilkent Üniversitesi Fizik Bölümü'nde 1989 yılından beri nanoteknolojiyle ilgili düşük boyutlu kuantum yapılarından elektron taşınımı, tarayıcı tünelleme mikroskobu (STM) ve atomik kuvvet mikroskobu (AFM) uç-yüzey arası etkileşimler ve nanotriboloji, nanotüp ve atom zincirleri konularında yoğun kuramsal araştırmalar yapılmaktaydı. Ayrıca, 2 boyutlu elektron sistemlerinin özelliklerini kullanan GaAS teknolojisi zaman kaybedilmeden yakalanmış, T.C. Savunma Sanayi Müsteşarlığı tarafından desteklenen İleri Araştırmalar laboratuvarı kurulmuştu. Günümüzde, bu laboratuvarında, teknolojinin sınırında çok önemli opto-elektronik ve elektronik aygıtlar yapılmakta, STM ve AFM bazlı mikroskoplarda yeni teknolojiler geliştirilmektedir.

Nanoteknoloji'de uygulamaların önem kazanması sonucu, kuramla deneysel çalışmaların sıkı bir işbirliği yapması ve belli hedeflere odaklanan disiplinler arası araştırma çalışmalarının yapılması zorunlu hale geldi. Bunun yanında iyi yetişmiş deneyimli uzman gereksinimi de ortaya çıktı. Nanoteknoloji konusunu geniş bir kapsamda ele almak, bazı kritik konularda gerekli teknolojiyi geliştirmek, uzman yetiştirmek üzere hazırlanan Ulusal Nanoteknoloji Araştırma Projesi'ni T.C. Devlet Planlama Teşkilatı 11 milyon YTL kaynakla desteklemeye karar vermiştir. Projeye, Bilkent Üniversitesi ve özel diğer kuruluşlar yaklaşık 4 milyon YTL kaynak sağlayacak. Toplam maliyetinin 30 milyon YTL olacağı öngörülen proje, yeni inşa edilecek 4000 m²'lik laboratuvar binasında faaliyete geçecek. Ayrıca Bilkent Üniversitesi Fizik Bölümü'nde mevcut 15 milyon YTL değerindeki araştırma alt yapısı ve teçhizat, proje araştırmalarında kullanılacak.

Ülkemizde çok değerli araştırmacılar mevcuttur. Mesela, Prof. Salim Çıracı'nın, yakıt pilleri üzerine yazdığı bir makale İran'daki bir sitede bile ilk sayfadan verilmişti. Filmlerde gördüğümüz akıllı kumaşları yine bir Türk Mehmet Bayındır gerçekleştirdi. Kısa vadede Türkiye'de askeri amaçlar için üretilmesi düşünülüyor. Yine bir başka araştırmacı Doç. Dr. Ahmet Oral, dünyanın en küçük Hall Sensörlerini yine Türkiye'de yapıyor. Ayrıca kurduğu iki şirket ile yurtdışına Türk yapımı taramalı tünelleme mikroskopları ve atomik kuvvet mikroskopları satmaktadır. Dünyanın en küçük Türk Bayrağını üreterek hem tanıtım yapıldı hem bu alanda neler yapılabileceği gösterildi. Bu hall sensörlerinin şimdiki amacı ise kimyasal, biyolojik saldırıları önceden tespit etmektir. Sonra, bu alanda belki de en tanınmış Türk olan Prof. Ekmel Özbay ise negatif kırınım

indeksli malzemelerin varlığını deneysel olarak dünyada ilk defa gösterdi. Science dergisi ocak ayında kendisinden bu konuda makale rica etti. Aralık ayında çok az bilimciye verilen Avrupa Descartes Bilim ödülünü kazandı [48].

Science Citation Index (SCI) tarafından taranan uluslar arası dergilerde 1996-2006 yılları arasında yayımlanan makalelerin içerisinde, başlığında veya anahtar sözcüklerinden “nano” terimi geçen makaleler aşağıdaki tablo’da gösterilmiştir [80].

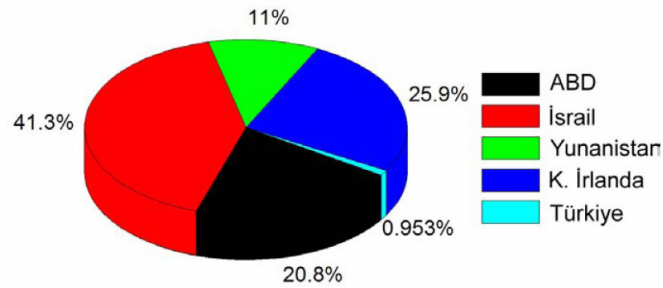
1.4 Nanobilim ve Nanoteknoloji Çalışma Alanları

Nanofabrikasyon; yukarıdan-aşağı geçiş (top-down) tekniği kullanılarak,100 nm’den daha küçük yapıdaki maddelerin, görüş alanının ötesindeki litografik teknikler varlığında elektron ışını ve X-ray cihazı varlığında üretilmesini içerir [93].

Nanometroloji; 100 nm altındaki tam ve hatasız ölçümler için, yeni ölçüm tekniklerinin bulunmasına yönelik çalışmalar yapar [93].

Tablo 1.1 Toplam makale sayısının nüfusa oranı [80]

Ülkeler	Makale Sayısı	h-index	Nüfus (milyon)	Ar-Ge ye aktarılan kaynak (milyon \$)
ABD	50263	246	295	1524
İsrail	2095	63	6.2	50
Yunanistan	948	34	10.5	?
K. İrlanda	848	41	4	?
Türkiye	545*	22	69.7	?



Fonksiyonel nanoteknoloji; nanoyapılı malzemelerin gelişmiş optik, elektronik ve manyetik özellikler içermesi için uygulamalar yapar. Bu uygulama kuantum yasaları temelinde yapılan nanoelektronikleri içerir [93].

Nano-elektromanyetik sistemler, cihazlar ve makineler; nano alanda bugünkü mikro makinelerin ve hareketli mikro parçaların geliştirilmesini içerir. Örneğin bu alanda tasarlanan protein motorlar lineer ya da eksenli harekete uygundur. Nanoteller, prizler ve motorlar çeşitli uygulamalarıdır.

Moleküler nanoteknoloji; moleküler tanı teknolojisidir. Araştırmaların çoğu, fiziksel bilimlerin insan yaşamı üzerindeki uygulamalarını içerir. Hücresel boyutta gen terapisi, ilaç analizi, nano makinelerin tasarımı, yapıların tekrar yerleşimini içerir [93].

Nanoparçacıklar, nanokatalizörler; nanoparçacık yapıdaki katalizörlerin, özelliklerini ve proseslerini anlamayı, bunların modellemesini ve fabrikasyonunu inceler [93].

Nanoyapılı maddeler; maddelerin 100 nm'den daha küçük yapıdaki gelişimi; yapılarının daha güçlü, daha dayanıklı ve korozyona dirençli olmasını sağlar. Bu yapılar nanotüpler, biyomalzemeler, ince filmler, antikorozyon kaplayıcılarıdır [93].

İleri nanoteknoloji; aşağıdan-yukarı (bottom-up) geçiş prensibiyle yapıları üretir. Elektronik cihazlar kullanarak kendi kendine bir araya toplanmayı (self-assembly) ve atomik ve moleküler işlenmeyi kapsar [93].

1.5 Nanoteknoloji'de Üretim

1.5.1 Nanokarakterizasyon

Günümüzde kullanılan üretim teknikleri, moleküler anlamda çok kaba tekniklerdir. Döküm, taşlama, tornalama vs. atomların büyük kitleler halindeki üretimine dayanmaktadır. Yapı taşı olan atomlar tek tek alınıp istenildiği gibi, üstelik de ucuza mal olacak şekilde birleştirilebilmektedir. Bu gelişme özellikle bilgisayar sektöründe önümüzdeki yıllarda kullanıldığında tümüyle daha temiz, daha dayanıklı, daha hafif ve daha hassas ürünlerin üretilmesi mümkün olacaktır [7].

Kapsamlı nanoteknolojik ilerlemeler için ekonomik destek, nanoyapıların karakterize edilmesi ve değerlendirilmesi için alet sisteminin geliştirilmesi, çok önemli faktörlerdir.

Nanoyapıları anlamak için, atom çekirdeklerinin nasıl birbirine bağlanıp atom bloklarını nasıl meydana getirdiklerini belirlemek gerekmektedir. Birçok nano yapı kristalindir. Kristal yapının analizi ile hücre içindeki atom pozisyonları tespit edilmektedir. Kristal yapının özel durumları nanoyapılar için önemlidir. Bunun yanında katalitik reaktivlik ve adsorbsiyon enerjisi de nanoyapıları etkilemektedir [52].

Nanoteknolojiyle ilgili iki kavram daha vardır; mikro-montaj ve kendi kendine çoğalma. Mikro montaja olan ihtiyaç, moleküler robot sanayiine olan ilgiyi artırmaktadır. Bu şekilde, moleküler boyutta ve hassasiyette robotlar üretilmesi söz konusu olacaktır. Bu nanomakineler aslında günlük hayatta kullanılan aletlerin ve sistemlerin çok küçük birer kopyaları olacaktır.

Nanomakinelere en iyi örnek; tüm canlıların hücrelerinde bulunan ve hemen hemen her çeşit proteini üretebilen ribozomlardır. Ribozomlar oldukça küçük organellerdir (sadece birkaç mikrometre küp boyutunda) ve aminoasitleri hassas çizgisel bir sırayla arka arkaya dizer ve proteinleri oluştururlar. Bu işlem için ribozomun belirli bir aminoasidi seçebilme tekniği vardır. Bunu özel bir tür taşıyıcı RNA molekülünün yardımıyla yapar. Ribozomun bu işlemde izleyeceği sıra ona haberci RNA (mRNA) tarafından bildirilir. İşte ribozomların bu işleyiş prensibi, mühendislik alanında uygulanabildiğinde nanoteknoloji hayatımızın her yönüne hitap edecektir.

Nanoteknolojik üretim yapabilmek için bilim adamlarının üzerinde çalıştığı üç temel adım vardır:

1. Bilim adamlarının bağımsız atomları tek tek kontrol edebilmek için tek bir atomu tutup istenen noktaya getirebilmeyi sağlayacak bir tekniğin geliştirilmesidir.
2. İkinci adım nano ölçekli gözlem yapabilen, atomları ve molekülleri isteğe göre kontrol etmeye programlanabilen "derleyiciler" üretmektir. Uygun bir zaman çerçevesinde eşya üretebilmek için trilyonlarca derleyicinin kullanılmasıdır.
3. Üçüncü adım olarak ise, yeterli sayıda derleyiciyi elde etmek için sayısız kez "çoğaltmaya", "kopyalamaya" programlanabilecek "çoğaltıcıların" geliştirilmesidir. Otomatik bir şekilde belirli bir ürünü üretmek için bu nanomakinelerin trilyonlarcası bir

arada çalışarak alışılmış üretim kalıplarını değiştirecek, üretim maliyetini neredeyse sıfıra indirebilecek, bol üretim yapılabilecek ve ürünler hiç olmadıkları kadar ucuz ve sağlam olabilecektir.

Atomları ve molekülleri taşıyacak, yerleştirecek küçüklükteki ilk robot kolun yapılması ile nanoteknolojinin ilk aşaması gerçekleşmiş olacaktır. Böyle minyatür bir robot kolunun, ürettiği robot kolları da kendi benzerlerini ve diğer nano ölçekli aygıtları yapacaklardır. Sayıları trilyonlara ulaştığında da süper nano bilgisayarlar tarafından kontrol edilen bu sürü ile nesnelere üretilen olacaktır [7].

Nanoteknolojide malzemelerin nano ve atomik ölçekte görüntülenmesi, ayrıca fiziksel özelliklerinin ölçülmesi hayati bir öneme sahiptir. Taramalı Uç Mikroskopları (SPM) bir iğne ile yüzey arasındaki fiziksel etkileşimleri atomik/nano seviyede ölçerek malzemelerin görüntülerini elde edebilen yeni ve güçlü tekniklerin genel adı olup, nanoteknoloji devrimini ateşleyen en önemli buluştur. Bu ölçüm metodları içinde Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM), Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM), Manyetik Kuvvet Mikroskobu (MFM), Taramalı Hall Aygıtı Mikroskobu (SHPM) gibi malzemelerin değişik özelliklerini değişik hassasiyetlerde ölçebilen yöntemler vardır. Bu mikroskoplar vakumda, yüksek basınç altında, sıvıda, havada, düşük ve yüksek sıcaklıklarda bile çalışabilmekte; TEM ve SEM gibi mikroskoplara göre büyük avantajlar sağlamaktadırlar.

Ayrıca bu yöntemler atomik seviyede görüntü vermelerinin yanında, atomik seviyede bile fabrikasyon yapmamıza imkân vermektedir. Bu mikroskoplar gen manipülasyonundan, atomik transistörlere kadar geniş bir yelpazede geniş fırsatlar sunmaktadır. Henüz başarılammakla beraber yüzeydeki atomların hangi elementlerden oluştuğunu da Atomik Kuvvet Mikroskopları ile ölçmek yakın gelecekte mümkün olabilecektir [60].

1.5.2 Nanofabrikasyon

Bilindiği gibi nanoteknoloji adı verilen tüm teknolojilerde kullanılan boyutlar 100 nm ve daha altındadır. Geleneksel silikon teknolojisinde kullanılan optik litografi yöntemleri bu boyutları

içeren aygıtları yapmakta yetersiz kalacaktır. Bu durumda nano yapıları üretmek için yeni fabrikasyon teknolojilerinin geliştirilmesi gerekmektedir [60].

Nanofabrikasyon işlemi oldukça zor olmakla beraber, işletimi zor ve pahalıdır. Nanoyapıların fabrikasyonunun anlaşılabilmesi için; nanoteknolojik aletlerin, malzemelerin içindeki atomların pozisyonlarının, yapı yüzeylerinin karakteristiğinin ve çeşitli spektroskopik cihazların tanımlaması yapılmalıdır.

Nanoteknolojik avantajların gelişimi ile birlikte küçük ve daha küçük yapıların fabrikasyonu kolaylaşmıştır. Bu durum, hassas yapıların fabrikasyon işlemlerine ışık tutmaktadır. Nanoyapıların fabrikasyonu için kullanılan en yaygın metot; litografidir. Diğer bir metot olan moleküler-ışın epitaksi; kristalin malzemenin yüzeyinde diğer bir kristalin malzemenin büyümesi olarak açıklanabilmektedir.

Optik litografi temelli silikon teknolojisinin 10-15 yıl içersinde yetersiz kalması ile nano yapılar içeren nanoelektronik temelli tümleşik entegre devrelerin yapımında elektron demet nanolitografi sistemleri kullanılacaktır. Elektron demet litografisi yöntemi günümüzde nano yapıların üretiminde en yaygın olarak kullanılan teknolojidir ve ilerde hızla gelişmesi beklenmektedir. Elektron dalga boyunun 0,1-1nm mertebesinde olması sayesinde elektron demetlerini 1 nm boyutlarında odaklamak teorik olarak mümkündür. Bu şekilde odaklanmış elektron demeti ile uygun fotorezist malzemeleri kullanarak nano yapılar yapmak mümkün olmaktadır. Elektron demet nanolitografi sistemleri nanoelektronik devrelerin üretimi yanında nanofotonik, nanomanyetizma ve diğer şekillendirilmiş nanoyapılar gerektiren tüm nanoteknolojilerde önemli bir temel teknoloji olacaktır.

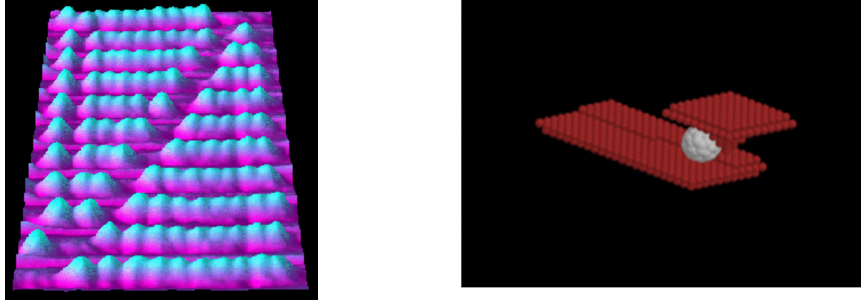
Elektron demet nanolitografi teknolojisi, aynı anda tek bir noktayı yazması nedeni ile tümleşik devre yapma konusunda hızı yetersiz kalmaktadır. Bu duruma çare olarak paralel olarak çalışan birçok elektron demetinin kullanılması öngörülmektedir. Elektron demet litografisinin yavaşlığına çözüm olarak nano baskı teknolojisi önemli bir hız avantajına sahip olacaktır. Bu teknolojiye master denilen ve elektron demet litografisi ve reaktif aşındırma yöntemleri ile oluşturulan bir mekanik maske kullanılacaktır. Bu master daha sonra polimer bir yüzeye bastırılmak yöntemi ile master maskede yazılı bulunan tüm ayrıntılar kopya edilecektir. Bu

şekilde master maske üzerinde bulunan bütün nanoyapılar hızlı bir şekilde kopyalanacak ve tümleşik devre yapımı çok hızlanmış olacaktır [7].

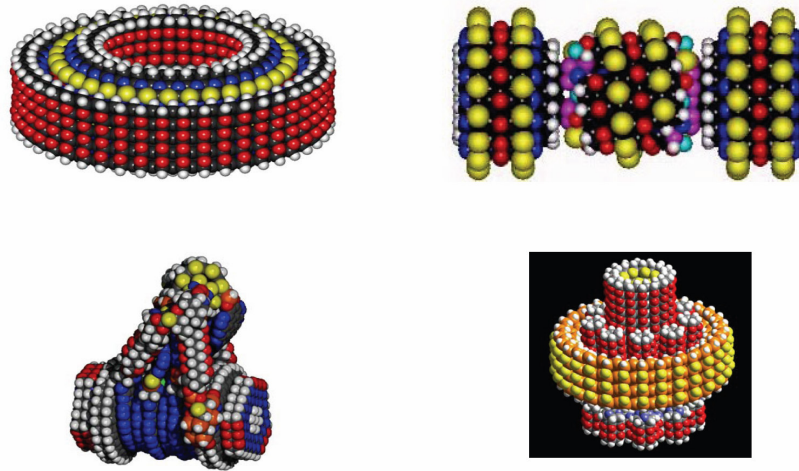
Nanometre boyutlu aletler, malzemeler ve sistemler birbirini tamamlayıcı iki yaklaşımla üretilirler. Bu iki yaklaşım; çok küçük boyutlardan üretimi veya daha büyük bir taneyi işlemeyi kapsamaktadır.

- Aşağıdan-Yukarı (Bottom-Up) Yaklaşımı: Bu yaklaşımda, moleküllerin bir araya getirilmesinin veya kendiliğinden bir araya gelmesinin kuralları incelenmektedir. Aşağıdan-yukarıya (bottom-up) yöntemi, nanoteknolojinin moleküler yapılanma kısmını oluşturmaktadır. Atomlar ve moleküller kendiliğinden şekillenerek daha büyük boyuttaki yapıları oluştururlar. Nanotüpler, nanoteller veya benzeri nano-bileşenler ile fonksiyonel moleküler cihazların oluşturulması tasarlanmakta ve aşağıdan-yukarı (bottom-up) nanoteknoloji yöntemi geliştirilmeye çalışılmaktadır [3]. Tarama tünelleme mikroskobunda şekillenen atomlar, bu yaklaşıma bir örnektir. 100-1000 nm yarıçaplı parçacıklar; lazer ışının odaklanmasıyla oluşturulan optik baskı ile üretilmektedir. Lazer cımbız (tweezer) olarak adlandırılan bu teknikte, moleküller istenilen formda düzenlenebilmektedir. Moleküler ışına epitaksi ile kalın katmanların atomik düzeyde kontrolü yapılmaktadır. Kendi kendine düzenlenen atom ve moleküller aşağıdan-yukarı (bottom-up) yaklaşımın temelini oluşturmaktadır. Bu yaklaşım ile her bir element için ayrı bir işleme tekniği gerekmemektedir. Kimyasal reaksiyonlarla gerçekleştirilen molekül sentezi bu kategoriye dahildir. Üç boyutlu yapıların karşılıklı genlerinden sentezlenen protein, aşağıdan-yukarı (bottom-up) yaklaşıma bir örnektir [7]. Aşağıdan-yukarıya (bottom-up) yaklaşım, konvansiyonel yukarıdan-aşağıya (top-down) tekniklere göre inanılması güç sonuçlar doğurmaktadır. Bu uygulamalara bir örnek olarak IBM laboratuvarlarında elde edilmiş Şekil 1.10'da görülen dünyanın en küçük abaküsü verilebilir. Bu abaküsün boncukları, nanometreden daha küçük çaplı bağımsız karbon atomları (C_{60}) bakır taban üzerinde kullanılmıştır. Boncukları hareket ettiren parmak, bir taramalı tünelleme mikroskobunun (STM) çok ince olan ucudur. Bu uç, tek bir atomla sonlanan konik bir şekle sahiptir. STM ayrıca, boncuklar (atomlar) hareket ettirildiğinde abaküsle hesaplanan sonucunu görmeye de yarar. Aşağıdan-yukarıya (bottom-up) yöntem, moleküler imalat ve teknikleriyle, moleküler ürünlerin, dizayn ve analizlerinden

oluşarak biyolojik olmayan moleküler mekanizma yönetiminde kimyasal reaksiyonların sırasına göre yapılandırılması işlemidir. Mekanosententez (Mekanik yönetimli kimyasal sentez) moleküler imalatın temeli, atomik skalada oluşan kimyasal reaksiyonların yönetimidir. Moleküler nanoteknolojinin mekanik dalı, makine mühendisliği, mikroteknoloji, kimya ve moleküler biyolojiden farklı ama ilişkili bir alan oluşturmaktadır. Şekil 1.11’de moleküler seviyedeki tasarımlardan bir kaçısı görülmektedir. Diğer teknolojilere oranla, moleküler imalat teknolojisinin çeşitli yönlerden üstün olduğu düşünülmektedir. Dünyada büyük oranda işlem gören geleneksel fabrikasyona kıyasla, bu konuda büyük gelişmeler görülmekte ve çok küçük atomar boyutlarda çalışılmaktadır. İmalattaki sonuçlarda kesinlik söz konusudur ve hata oranı oldukça düşüktür [3].



Şekil 1.15 (a) IBM laboratuvarlarında yapılan dünyanın en küçük abaküsü, (b) Bu abaküye ait parmak [94]



Şekil 1.11 Moleküler seviyedeki bu tasarımlardan sol üstteki bir rulman, sağ üstteki basit bir pompa, sol alttaki moleküler birleştirme için hareket kontrolcüsü ve sağ alttaki ise mikron boyutlarında bir dişlidir [8]

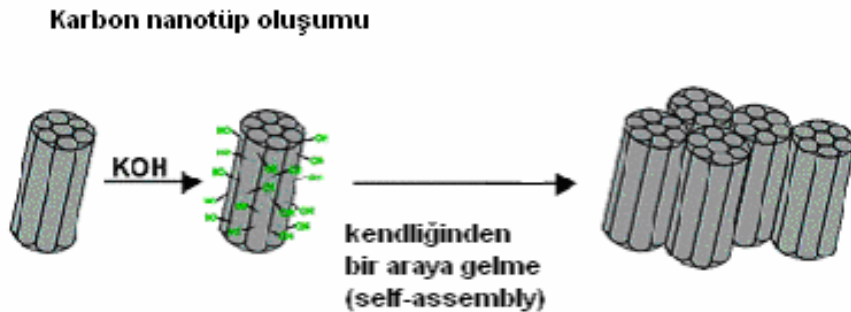
Kendiliğinden Bir Araya Gelme (Self-Assembly) :

Proteinler; bütün vücut hücrelerinde ve dokularında bulunan, büyük moleküllerdir. Yüzlerce aminoasidin, mesajcı RNA emri doğrultusunda, taşıyıcı RNA molekülüne bağlanıp, bir araya gelmeleri ile oluşurlar. Her aminoasidin bağlandığı diğer aminoasit kendine özeldir. Bu ardışık şekilde bir araya gelen aminoasitler, polipeptit zinciri üzerinde toplanır; bu zincir, birleşmeler oldukça uzamaya devam eder ve sonuçta protein oluşur.

İnsan yaşamında doğal olarak meydana gelen bu “kendiliğinden bir araya gelme” prosesinden, nano bilimde de yararlanılmıştır. Bu proses doğrultusunda, küçük moleküllerin karşılaştırılıp bir araya gelmesi ile daha büyük ve daha kararlı, moleküler kompleksler oluşturulması sağlanır.

Bu proses, molekül parçaları arasında etkileşimlerin oluşumu sonucunda dengeye gelindiğinde sonuçlanır. Proses gerçekleşirken, gelişimin her aşamasında hata kontrolü yapılabilir. Bu şekilde hatalar veya bağlanmada oluşan yanlışlıklar, her an gözlenebilir ve düzeltilir.

Makromoleküllerin organik sentezleri, çok fazla zaman gerektiren ve güçlü kovalent bağların, kinetik kontrol altında oluşmasına dayanan aşamalardan meydana gelmektedir. Bu aşamalar sırasında, hataların farkına varılamaz ve düzeltilemez. Buna kıyasla, “kendiliğinden bir araya gelme”de, hidrojen bağları ve van der waals bağları gibi zayıf bağların oluşumu söz konusudur. Bu bağların varlığı, reaksiyonların termodinamik kontrol altında tutulmasını sağlar. Bu şekilde, hatalar proses süresince kontrol edilebilir ve düzeltilebilir. Son ürün termodinamik denge durumunda oluşturulur [7].

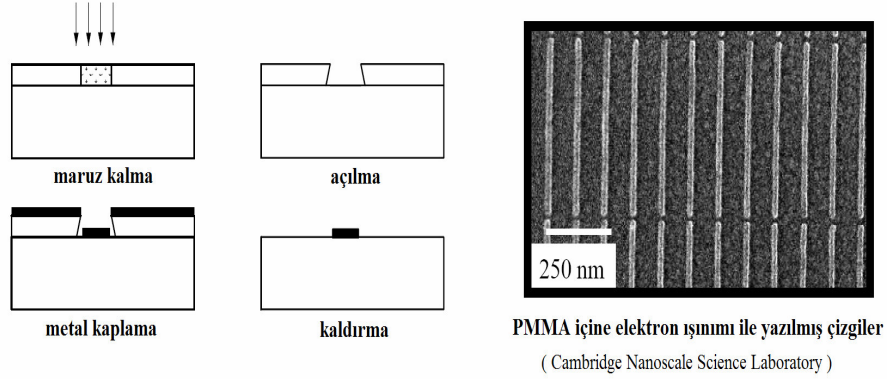


Şekil 1.12 Kendiliğinden bir araya gelme yöntemi ile nanotüp üretimi [7]

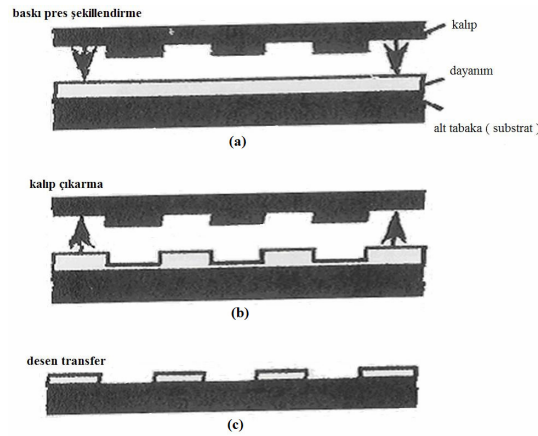
- Yukarıdan-Aşağı (Top-Down) Yaklaşım: Birçok araştırmacı 1970'lerden bugüne nano boyutta imalat ve işleme (yukarıdan-aşağı yaklaşım) için önemli çalışmalar yapmışlardır. Bu çalışmaların bir kısmı nanolitografi konularındandır. Yarı iletkenleri, minyatürleştirme teknolojisi ve daha ince mekanik üretim ile 10 nm boyutunda yapıların üretimi, yukarıdan-aşağı (Top-Down) yaklaşımın sonucudur. Nano aletler kullanarak molekül ve atom düzeyindeki malzemelerin bir yere biriktirilmesi veya oradan uzaklaştırılması yaklaşımına nanolitografi denilir. Litografide, asitle oyulma (etching) ile veya elmas tornası gibi kesim aletleri kullanılarak, yığın malzemeler ve kalın film tabakalarından nano yapılar üretilmektedir. Litografide boyutlar 10-100 nm arasında değişim göstermektedir. İlk mikro-üretim cihazı 10-100 µm boyuta sahipken, son zamanlarda üretilen nano-üretim aletler 100 nm boyuta sahiptirler [7]. Optik litografi esaslı silikon teknolojisi nanoyapılar içeren nanoelektronik temelli tümleşik entegre devrelerin yapımında gün geçtikçe yetersizliğini göstermekte; bunun sonucu elektron ışın nanolitografi sistemleri kullanılmaktadır. Elektron ışın litografisi yöntemi, günümüzde nanoyapıların üretiminde yaygın kullanılan bir teknolojidir ve daha da gelişmesi beklenmektedir. Elektron ışını dalga boyunun 0,1-1 nm mertebesinde olması sonucu, elektron ışınlarının 1 nm boyutlarında odaklanabilmesi sağlanarak; elektron ışınlarına karşı dirençli malzemeler kullanarak nanoyapılar imal etmek olasıdır. Bu şekilde odaklanmış elektron demeti ile uygun fotorezist malzemeleri kullanarak nanoyapılar yapmak mümkün olmaktadır. Elektron ışın litografisi ile son on yıldır Şekil 1.13'de görülen nanometrik boyutta çizgiler ile yazı yazılabilmektedir. Elektron ışını nanolitografi sistemleri, nanoelektronik devrelerin üretiminde, nanofotonik, nanomanyetizma ve diğer tüm nanoteknolojilerde de önemli bir temel teknolojidir. Elektron demet nanolitografi teknolojisi, aynı anda tek bir noktayı yazması ile tümleşik devre yapma konusunda hızı yetersiz kalmaktadır. Bu duruma çare olarak paralel olarak çalışan birçok elektron demetinin kullanılması öngörülmektedir. Elektron demet litografisinin yavaşlığına çözüm olarak Şekil 1.14'de görülen nanobaskı teknolojisi hızı ile önemli bir avantaja sahip olacaktır. Bu teknolojiye maske denilen ve elektron demet litografisi ve reaktif aşındırma yöntemleri ile oluşturulan bir mekanik maske kullanılacaktır. Bu maske daha sonra polimer bir yüzeye bastırma yöntemi ile maskede yazılı bulunan tüm ayrıntılar kopya edecektir. Bu şekilde maske üzerinde bulunan bütün nanoyapılar hızlı bir şekilde kopyalanacak ve tümleşik devre yapımı hızlanmış olacaktır. Şekil 1.14 (a) Kalın bir

dayanım çubuğuna sahip alt tabakanın üstüne nano boyutta kalıp şekli preslenir, (b) şekil kalıp üzerine sabitlenir, (c) yüzey kazıma (etching) prosesi dayanım malzemesinin sıkıştırılmasında kullanılır. Dayanım malzemesi, termoplastik bir polimerden yapılmış ve ısıyla yumuşatılabilmektedir. Kaplama prosesi süresince ısıtılan dayanım malzemesi kaplama desenini alt tabakaya transfer edebilmektedir. Kaplama malzemesi metal olmakla birlikte litografi tekniğinde yarı iletken fabrikasyon ile üretilmiştir. Nanobaskı litografisinde yüzey şekli 10 nm çözünürlüğe sahiptir. Mikroskobik robotlar ile nano ölçekte atom ve molekülleri amaca göre yönlendirerek üretim yapmak nanolitografinin hedeflerindedir [7]. Yukarıdan aşağıya yöntemin günümüzdeki bir diğer popüler konusu karbon nanotüplerdir [3].Karbon nanotüpler, silindirlerden oluşan fulleren tipi yapılardır. Karbon nanotüplerin bilimsel macerası 1985'te 60 ya da daha fazla karbon atomunun birleştirilmesiyle oluşan futbol topu şeklindeki moleküllerin keşfiyle başlamıştır. Bu topların diğer atom veya moleküllerle yaptığı bileşiklere “fulleren” denir. Bu keşiften sonra birçok laboratuvar sıcak karbon buharını yoğunlaştırarak futbol topu şeklindeki molekülleri elde etmeye çalışmış; bu elde etme işleminden küçük değişikliklerle çeşitli şekil ve boyutlarda küreye benzer yapılar elde edilmiştir. İlk tüp şeklindeki molekülleri 1991'de elektron mikroskobu uzmanı Sumia Iijima fullerenlerin ark-buharlaştırma sentezi sırasında katotta biriken malzemeyi araştırma sırasında bulunmuştur. Kısa bir süre sonra Thomas Ebbeson ve Pulickel Ajayan (Iijima'nın laboratuvarından) çeşitli ark-buharlaştırma koşulları altında büyük miktarlarda nanotüp üretilbileceğini göstermiştir. Ama standart ark-buharlaştırma metoduyla ancak çok katmanlı tüpler üretilebilmiştir. Sonra ki araştırmalar sonucunda tek katmanlı mükemmel tüpler elde edilmiştir. 1993'te tek katmanlı nanotüplerin elde edilmesi, karbon nanotüplerin gelişmesinde büyük bir aşama olmuştur. 1996'da Rice Üniversitesi Araştırma Grubunun tek katmanlı nanotüp grupları oluşturmada daha etkin bir yöntem bulmasıyla, çok sayıda karbon nanotüp deneylerinin önü açılmış oldu. Arzu edilen nanotüpler 1200 °C fırında karbonun lazer-buharlaştırılmasıyla elde edildi. Daha sonra Montpellier Üniversitesinden Catherine Journet, Patrick Bernier ve çalışma arkadaşlarının karbon ark-buharlaştırma metoduyla iyonlaşmış karbon plazmasından tek katmanlı nanotüp elde etmişlerdir. Çok katmanlı karbon nanotüplerin büyütülmesi için katalizör gerekmezken, tek katmanlı karbon nanotüpler ancak katalizör ile büyütülebilir. Karbon nanotüpler tek çeperli, çok çeperli (eş eksenli tüpler), konik ya da tel formunda olabilirler. Şekil 1.15'de çeşitli karbon

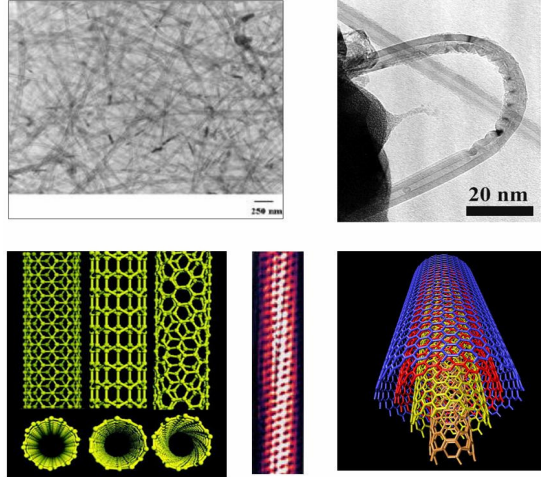
nanotüp ve yapıları, Şekil 1.16’da konik nanotüpler ve nanotel görülebilir. Nanotüplerin yapılarında B, N, C ve bazen de Mo gibi elementler ve bu elementlerin kombinasyonları kullanılabilir. Karbon nanotüpler çok hafiftirler ve çok yüksek elastisite modülüne, yüksek çekme dayanımı ve burkulma rijitliğine sahiptirler. Tablo 1.2’de tek ve çok cidarlı karbon nanotüplerin elastisite modülü, çekme dayanımı ve yoğunluğu çelik, epoksi ve tahta malzemelerle karşılaştırılmıştır. Çaplarına ve heliselliklerine bağlı olarak elektriksel olarak iletken ya da yarı iletken özellik gösterebilmektedirler. Yapılarındaki hegzagonalların büküm açılarındaki değişim nanotüpleri iletkenden yarı iletkene dönüştürebilmektedir. Nanotüpler için çok değişik kullanım yerleri, Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) uçlarında ve nano talaş kaldırmada takım olarak kullanılması gibi düşünülmektedir [3].



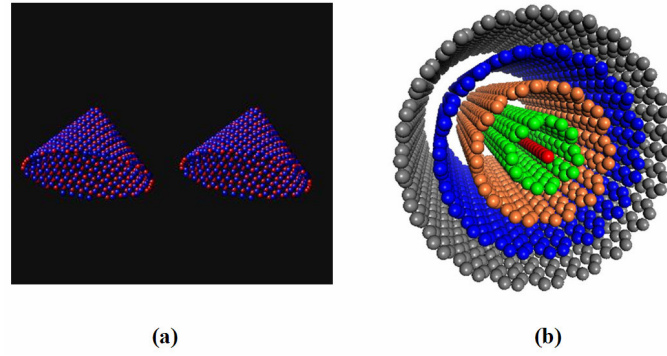
Şekil 1.13 Elektron ışınımı litografisi [1]



Şekil 1.14 Nanobaskı litografi prosesinin aşamaları [52]



Şekil 1.15 Çeşitli karbon nanotüpü yapıları [3]



Şekil 1.16 (a) Koni şeklinde nanotüpler, (b) Nanotüpler ve ortada nanotel [3]

Tablo 1.2 Karbon nanotüplerin elastisite modülü, çekme dayanımı ve yoğunluğunun diğer bazı malzemelerle karşılaştırılması [3]

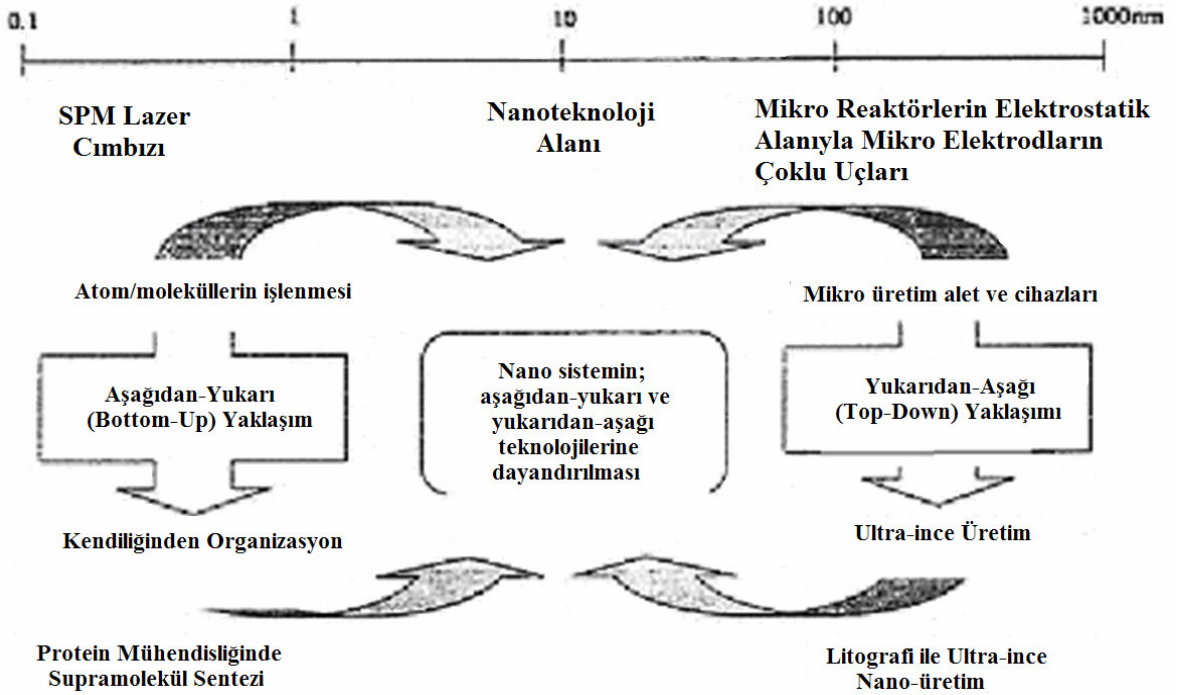
Malzeme	Elastisite Modülü (GPa)	Çekme Dayanımı (GPa)	Yoğunluk (g/cm^3)
Tek cidarlı nanotüp	1054	150	
Çok cidarlı nanotüp	1200	150	2.6
Çelik	208	0.4	7.8
Epoksi	3.5	0.005	1.25
Tahta	16	0.008	0.6

Aşağıdan-yukarı (Bottom-Up) ve yukarıdan-aşağı (Top-Down) yaklaşımları arasındaki ilişki Şekil 1.17’de şematik olarak gösterilmiştir. İki yaklaşım, birbirinin tamamlayıcısı olmakla birlikte aşağıdan-yukarı (Bottom-Up) yaklaşımda; atomlar ve moleküller, daha büyük ve daha kompleks yapılara çevrilmektedirler. 0.1-1 nm’den 10-100nm’ye boyut değişimi gözlenmektedir. Bu aralık, nanoteknolojide temel boyut aralığı olarak kullanılmaktadır. Yukarıdan-aşağı (Top-Down) yaklaşımda boyut değişimi, 1000 nm’den 10 nm’ye kadar gözlenmektedir.

Kullanım;

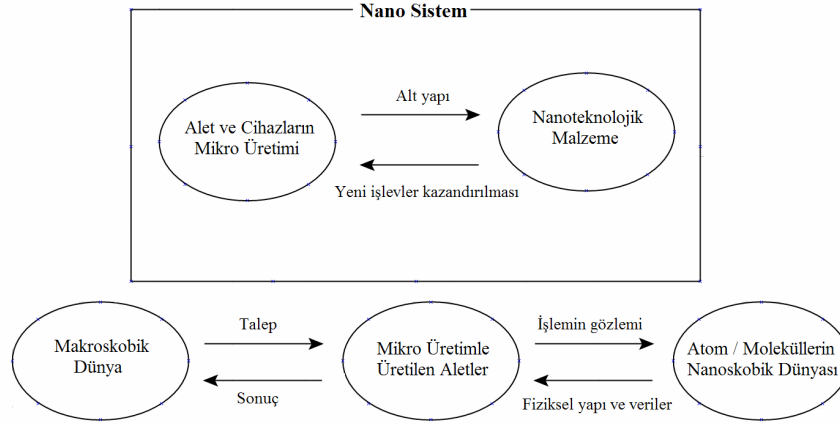
- Tarama uç mikroskobu (Scanning Probe Microscope) ve lazer cımbızları (tweezers) atom ve molekül işleme için kullanılmaktadır.
- Kendiliğinden organize olan kristal büyüme, protein sentezi ve kimyasal sentez; üstün özellikli nano malzeme meydana getirmeyi sağlayan bir yaklaşımdır.

Mikro-üretim aletleri ve cihazları ile nanoyapıların sentezlenmesi ve işlenmesi, nano-üretim ve makro üretim arasındaki farkı anlamamızı sağlamaktadır [7].



Şekil 1.17 Aşağıdan-Yukarı (Bottom-Up) ve Yukarıdan-Aşağı (Top-Down) yaklaşımları arasındaki ilişkinin gösterimi [7]

İki nanosistem yaklaşımını birleştirme:



Şekil 1.18 Mikro-üretim Teknolojisi [7]

Tablo 1.3 Mikro üretim prosesleri ve uygulama alanları [7]

Mikro Üretim Prosesleri	Özellikleri	Uygulama Alanları
Kristalin-grafit, ıslak yüzey kazıma (tek-kristal silisyum)	Kristal düzlemler tarafından tanımlanan 3 boyutlu yapılar	Basınç altında çalışan sensörlerin yapımında kullanılan duyarlı membranların üretimi
Yön bağımlı yüzey kazıma prosesi (silisyum)	3-boyutların şekillerini belirlemek için maske	Büyük kuvvet üretici mikro disk ve serbest şekillendirilen mikro yapılar üretimi
Yüzey mikro üretim (polisilikon filmler)	Ultra ince yapılar	Kontrol çevriminde tümleyici sensör diski üretimi
3-boyutlara dayanarak	3-boyutlu alt tabakayı şekillendirerek mikro yapıların katlanması	Silisyum çip üzerinde mikro optik alet üretimi
Kopya prosesler (metaller, polimerler, polisilikonlar ve camlar)	3-boyutlu kaplamaların kopyalanması ile istenilen çeşitte malzeme	Enjeksiyon kaplama ile mikro akışkan çip ve sıcak kabartma yöntemi ile cam çip üretimi

Özel malzemeler üretmek için kullanılan aşağıdan-yukarıya (bottom-up) yaklaşımın, minyatürleştirilmiş nanoyapıları ve cihazları bir araya getirmesi gerekmektedir. Yukarıdan-aşağıya (top-down) yaklaşımla üretilen cihazlar ve yapılar, nano malzemelerin altyapısını oluşturmaktadır.

1.5.3 Mikroskoplar

Nano ölçekte görüntüleme yöntemleri, yüzeylerin incelenmesi ve tanımlanması için önemli teknolojilerdir. Malzemelerin metalurjik, topografik, tribolojik özelliklerinin ve yüzey etkileşimlerinin incelenebilmesi için gerek fiziksel gerekse de kimyasal tekniklere başvurulmaktadır. Kimyasal incelemeler, çok gelişmiş spektroskopik tekniklerle yapılırken, fiziksel incelemelerin yapılmasında elektron ve sonda mikroskopisi teknikleri yaygın olarak kullanılmaktadır.

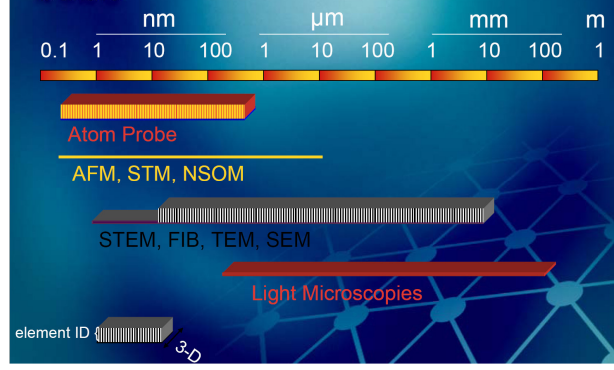
Görünür ışığın dalga boyunun yaklaşık $0.5 \mu m$ olması sebebiyle, ışık mikroskoplarının, $0.5 \mu m$ 'den daha küçük yapıları görüntülemesi mümkün değildir. Ancak, temel işleyiş mantığı ışık mikroskopuyla aynı olan elektron mikroskobu, görünür ışıktan daha küçük dalga boyuna sahip elektron ışınlarıyla görüntüleme yapar. Elektron mikroskobunda, uygun potansiyeller altında hızlandırılan elektron demeti, incelenecek örnek malzemenin ya içinden geçirilir ya da yüzeyinden yansıtılır. Elektron demetinin, örnek malzemenin içinden geçerek gözlemlenmesine olanak tanıyan mikroskoplar, geçirmeli elektron mikroskobu (TEM), örnek malzeme yüzeyinden yansıtma yaparak görüntü elde eden mikroskoplar ise taramalı elektron mikroskobu (SEM) olarak adlandırılırlar. TEM ile cisimlerin içyapılarını görüntülemek mümkündür. SEM ile inceleme yapabilmek için incelenecek cismin iletken olması ya da özel tekniklerle iletkenlik kazandırılması gereklidir [5].

Nanoteknoloji'de malzemelerin nano ve atomik ölçekte görüntülenmesi, ayrıca fiziksel özelliklerinin ölçülmesi büyük bir önem taşımaktadır. Gelişen teknolojiyle birlikte görece yeni bir tür diyebileceğimiz taramalı sonda (uç) mikroskobu teknikleri (SPM) de yaygın olarak kullanılmaktadır. Taramalı uç mikroskopları (SPM) bir iğne ile yüzey arasındaki fiziksel etkileşimleri atomik veya nano-seviyede ölçerek, malzemelerin görüntülerini elde edebilen yeni ve güçlü tekniklerin genel adı olup, nanoteknoloji devrimini ateşleyen en önemli buluştur. Bu

ölçüm metotları içinde atomik kuvvet mikroskobu (AFM), tarama tünelleme mikroskobu (STM), manyetik kuvvet mikroskobu (MFM), taramalı alan aygıtı mikroskobu (SHPM) gibi, malzemelerin değişik özelliklerini değişik hassasiyetlerde ölçebilen yöntemler vardır. Bu mikroskoplar vakumda, yüksek basınç altında, sıvıda, havada, düşük ve yüksek sıcaklıklarda bile çalışabilmektedir. Ayrıca bu mikroskoplar, atomik seviyede görüntü vermeleri ile birlikte, atomik seviyede fabrikasyon yapmamıza imkân sağlamaktadırlar. Bu mikroskoplar gen değişikliğinden, atomik transistörlere kadar geniş bir alanda fırsatlar sunmaktadır. Henüz yapılamamakla beraber yüzeydeki atomların hangi elementlerden oluştuğunu da atomik kuvvet mikroskopları ile ölçmek yakın gelecekte mümkün olabilecektir [7]. Aşağıda Tablo 1.4’de takım tezgahları ve takım konumlama ekipmanları ile birlikte ölçüm cihazları ve konumlama doğrulukları görülmektedir. Şekil 1.19’da ise mikroskopların görüntüleyebilecekleri ölçüm aralıkları gösterilmiştir [5].

Tablo 1.4 Takım tezgahları ve takım konumlama ekipmanları ile ölçüm cihazlarının çözünürlüğü ya da konumlama doğruluğu [5]

Ölçüm Çözünürlüğü ya da Konumlama Doğruluğu	Takım Tezgahları ve Takım Pozisyonlama Ekipmanları	Ölçüm Cihazları ve Veri İşleme Ekipmanları
10 μm	Geleneksel Torna ve Freze Tezgahları	Kumpas
	Hassas Torna, Taşlama Tezgahı, Lepleme ve Honlama Tezgahı	Mekanik Komparatör, Mikrometre, Kadranlı Gösterge
1 μm	Aparat Delik İşleme Tezgahı, Aparat, Taşlama Tezgahı, Süperfiniş Tezgahı	Elektrikli ya da Pnömatik Mikrometre, Optik Komparatör
	Hassas Taşlama Tezgahı, Hassas Lepleme Tezgahı, Optik Mercek Taşlama Tezgahı, Elmas Takımlı Hassas Torna Tezgahı	Optik ya da Manyetik Skalalar, Elektrikli Komparatör, Elektronik Komparatör (temassız), X Işını Mikroskobu
0,1 μm	Optik Mercek Finiş Taşlama, Alıştırma Tezgahı, Elmas Taşlı Hassas Taşlama Tezgahı	Lazerli Ölçme Araçları, Optik Fiber Sistemleri, (Talysurf, Talyron)
	Süper Yüksek Hassasiyette Taşlama, Lepleme ve Parlatma Tezgahı, Tek Kesen Ağzılı Elmas Takım ile Tornalama (SPDT)	Yüksek Hassasiyette Lazerle Ölçme Enstrümanları (Doppler ve Hiposs), Çoklu Yansıtımlı Lazer Araçları, Heterodin Pürüzlülük Ölçme Araçları (Zygo, Wypo)
0,001 μm 1 nm	Nano-servo Pozisyonlama Sistemi, Atom ya da Moleküler ve İyon Işınlı İşleme Aparatı	SEM, TEM, X Işını Mikroskobu (2nm), STM, AFM, Auger Analyser, X Işını Mikroanalizör



Şekil 1.19 Mikroskopların görüntüleme aralıkları [95]

Uç (prob) mikroskopları ailesinin iki temel üyesi atomik kuvvet mikroskobu ve tarama tünelleme mikroskobu'dur.

Uç Mikroskobisine Ait Cihazların Temel Bölümleri:

- Tarama
- Veri toplama
- Görüntü oluşturma

Tarama bölümüne ait temel parçalar: (mikrometreler, adım motorlar, piezo-motorlar)

- İnce yaklaştırma ve tarama mekanizması
- Kaba yaklaştırma mekanizması
- Titreşim aletleri (yaylar, hava yastıkları)

Bilgisayarın yerine getirmesi gereken fonksiyonlar:

- X ve Y yönündeki tarama sinyalleri
- Sayısallaştırma, görüntüleme, saklama
- Komut verme [90]

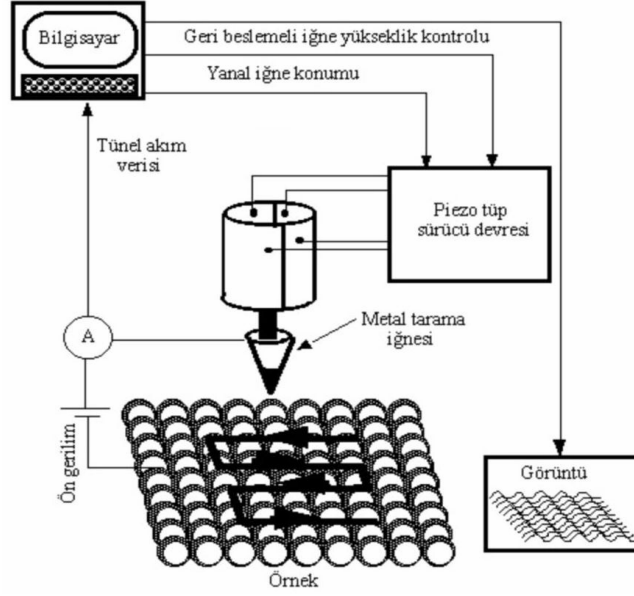
Atomların fotoğrafını çekebilen taramalı tünelleme mikroskobu (STM) 1981 yılında Gerd Binnig ve Heinrich Rohrer tarafından İsviçre'de IBM laboratuvarlarında icat edildi. Tünelleme mikroskobunun çalışma ilkesi, çok önemli diğer buluşlar gibi aslında oldukça basit. En uç kısmında tek atom kalacak kadar sivriltilmiş bir metal iğne yüzeye yaklaştırılır, iğne yüzeye

0.3 – 0.4 *nm* kadar yaklaştığında iğneden elektronlar (iğne yüzeye değmediği halde) atlamaya başlarlar. Tünelleme denen bu olayda geçen akım, yani birim zamanda iğneden yüzeye akan elektron sayısı, iğneyle yüzey arası uzaklığın üstel bir fonksiyonudur. Bu fonksiyon o kadar hızlı değişir ki, iğne yüzeye 0.1 *nm* daha yaklaştırılırsa, tünelleme akımı on kat artar. Bir geri besleme devresi akımı sabit tutmak için sürekli olarak iğneyle yüzey arasındaki mesafeyi korumaya çalışır. İğneyi 0.001 *nm* duyarlılıkla kontrol etmek için piezoelektrik kristaller kullanılır. Bu malzemeler voltaj uyguladığımızda çok az miktarda uzayıp kısalma özelliğine sahiptir. Bu geri besleme devresi çalışırken biz iğneyi yüzeyde yine piezo malzemelerle tararsak, iğnenin aşağı yukarı hareketi yüzeydeki atomları izleyecektir. Çünkü atomların çevresinde elektron yoğunluğu genellikle daha fazladır. Bir bilgisayar denetiminde çalışan bu mikroskoplarda alınan atomların pozisyon bilgileri, bilgisayarda işlenip, iki (2D) ve üç (3D) boyutta gösterilerek atomlar görünür hale getirilir. Ülkemizde ilk taramalı tünelleme mikroskopları 1989 yılında iki yüksek lisans tezi kapsamında üretildi. Bazı parçaları hurdacılardan temin edilen, geri besleme devresinden, denetleme yazılımına kadar her şeyiyle Türkiye’de yapılan ve atmosferde çalışan bu ilk mikroskoplarla alınan karbon atomları görüntüsü Şekil 1.21’de görülmektedir [48].

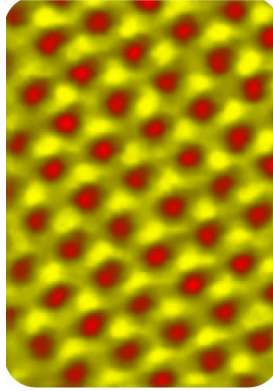
Tarama tünelleme mikroskopunun (STM) sahip olduğu iğne ile nanometre boyutunda malzeme yüzeyi taranır. İğneye gerilim uygulanarak, malzeme yüzeyindeki elektronlar aktarılmaktadır. İğne, yüzeye belirlenen uzaklıkta sabitlendiğinde; iğneden malzeme yüzeyine aktarılan akım, malzeme yüzeyindeki elektronların yoğunluğuna göre dağıtılarak, moleküler ve atomik yüzey görüntüsü elde edilmektedir.

Tarama tünelleme mikroskobu, malzemelerin yüzey atomları ile nano boyutta atom üretiminde kullanılmaktadır. Mikroskop iğnesi ile absorbe edilen atom, yüzeydeki kimyasal bağların etkisiyle yakalanır ve iğneden ayrılması sağlanır. Eğer mikroskop iğne ile yüzey tarafından yakalanan atom arasında, kimyasal bağlardan daha büyük bir etkileşim meydana gelirse, iğne ile sürüklenen atom, yüzeyde istenen bir noktaya tekrar yerleştirilir ve böylece malzeme farklı özelliklerde tekrar yapılandırılır [7].

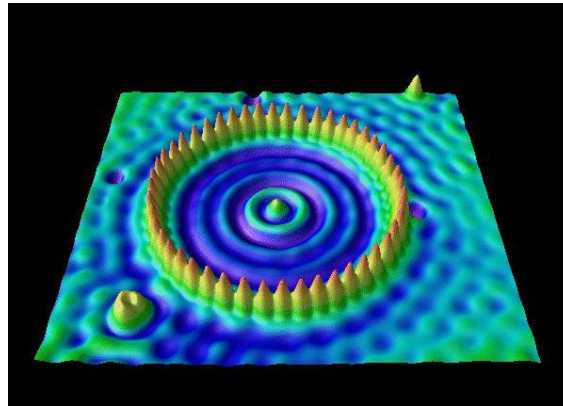
Malzeme yüzeyine soğuk helyum gazları gönderilmesi ile soğutulan atomlar termal difüzyona uğramaktadır. Böylece malzeme yapısı bozunur ve atomların düzenlenmesi kendiliğinden gerçekleşmektedir.



Şekil 1.20 Tarama tünelleme mikroskobu (STM) çalışma prensibi [90]



Şekil 1.21 Tarama tünelleme mikroskobu (STM) ile grafit görüntüsü [60]

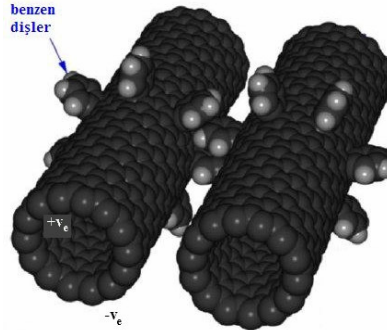


Şekil 1.22 Bakır yüzey üzerindeki demir atomlarının dairesel düzeni [69]

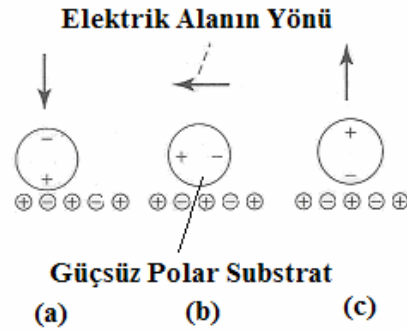
Yukarıdaki Şekil 1.22’de tarama tünelleme mikroskobu (STM) ile bakır yüzeyi üzerindeki demir atomlarının dairesel düzeni gösterilmiştir.

Bahsedilen nano-üretim yöntemleri ile üretilen nano makine çeşitlerinin gerilimini değerlendirmek için bilgisayar simülasyonu kullanılmaktadır. Buna bir örnek Şekil 1.23’te görülmektedir.

Şekil 1.23’te nanotüpün dışına dişli yerleştirilmesi gösterilmiştir. Dişliler benzen moleküllerinin tüpün duvarlarının dışına bağlanması ile gerçekleştirilmektedir. Örneğin sol yandaki dişli, tüpün yarıçapı karşısında dipol momenti kuvveti oluşturmaktadır. Dişlileri alternatif elektrik alan kuvveti döndürmektedir. Nano boyutlandırılmış makinalar, dişli gücüyle oluşan taşıma özelliğine sahiptir. Nanoyapının elektrik alandan etkilenmemesi için C_{60} molekülleri kullanılmaktadır. Bu durum Şekil 1.24’te gösterilmiştir [7].



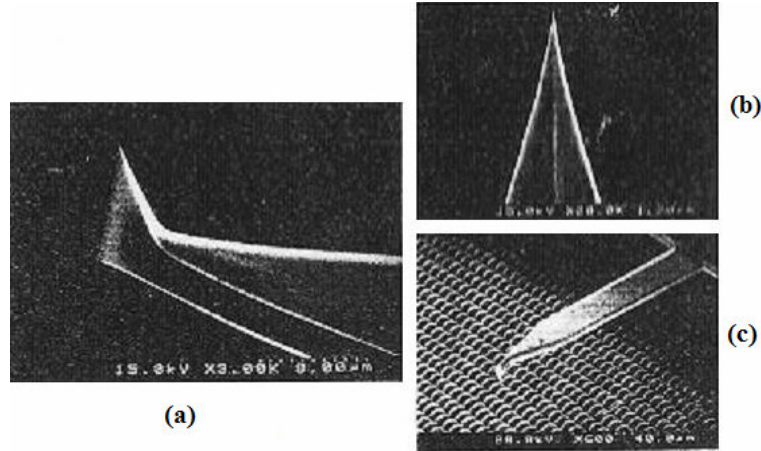
Şekil 1.23 Benzen moleküllerini, karbon nanotüpün üzerine iliştilererek dişli yapımı [96]



Şekil 1.24 C_{60} moleküllerinin sahip olduğu elektrik dipol momentinden etkilenen döner elektrik alanı [7]

Yüzeğe absorplanan C_{60} molekülü yalıtımı sağlamaktadır. Elektrik alanla kutuplanan C_{60} molekülleri kürenin pozitif ve negatif kısımlarına ters olarak yerleştirilmektedir. Dipol momenti ve elektrik alan arasındaki etkileşim, moment ve malzeme yüzeyi arasındaki etkileşimden büyük olduğunda C_{60} molekülleri karşı yüzeğe yerleşerek yalıtımı gerçekleştirmektedir [7].

Taramalı tünelleme mikroskoplarının (STM) tek kusuru, yalnızca iletken ve yarı iletken yüzeylerde atomları görüntüleyebilmesiydi ve yalıtkanlarda çalışmıyordu. Binnig bu kısıtlamayı kaldıran değişikliği de yaptığında yıl 1986 idi. Binnig bu sefer ucunda tek atom olan iğneyle yüzey atomları arasındaki kuvveti ölçebilecek kadar duyarlı bir cihaz olan atomik kuvvet mikroskobunu (AFM) geliştirdi. Atomlar arası kuvvetler, kimyasal bağların oluşmasını sağlar. Eğer iki atomu birbirine yaklaşıtırsak (örneğin iki oksijen atomu) birbirleri arasında bir çekim kuvveti oluşur ve bir süre sonra oksijen molekülü ortaya çıkar. Atomlar arası kuvvetler hep çekici değildir. Eğer aynı oksijen molekülünü alıp, oksijen atomlarını birbirlerine doğru yaklaştırmaya çalışırsak, bu sefer birbirlerini itmeye başlayacaklardır. Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile ölçülen kuvvetler piko-Newton ile nano-Newton düzeyindedir.

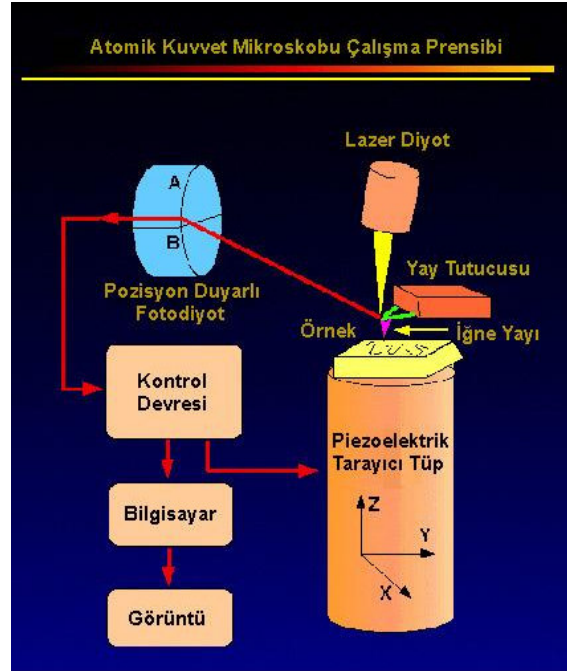


Şekil 1.25 (a) Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) için mikro-üretim iğnesi, (b) Büyütülmüş iğnenin görünüşü, (c) Mikrolens dizilerinin iğne ile hesaplanmasının gösterimi [6]

Atomik kuvvet mikroskobu (AFM), yumuşak bir dirsek ve bu dirseğe iliştirilmiş keskin bir iğneye sahiptir. Şekil 1.25’de atomik kuvvet mikroskobu’nda (AFM) mikro üretim ile görüntülenen elektron mikrografı gösterilmiştir. Yarıçapı yaklaşık olarak 10 nm olan bu iğne, silikondan yapılmıştır. Dirsek ise SiO_2 ’den yapılmış olup, yay sabiti 1 N/m ’dir. İncelemesi ya da

işlenmesi yapılacak olan örnek, yüzeye doğru görüntülediği zaman atomik kuvvet mikroskobu (AFM) iğnesi örnek yüzeyine hafifçe dokunmaktadır. 1 nm 'den küçük olan yüzey topolojisi dirsek yönünü değiştirme ile görüntülenir. Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) iğnesinin yüzeye doğru itilmesiyle, örnek yüzeyi üzerinde nanoskopik oyuk meydana gelmektedir.

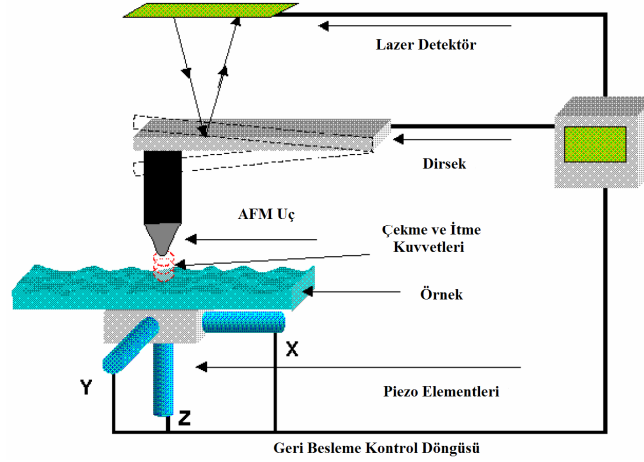
Hassas iğnenin yüzeyi taramasıyla, yüzeyin yüksek çözünürlüklü üç boyutlu (3D) görüntüsü oluşturulur. Örneğin iletken olma koşulu yoktur. Biyolojik örnekler, kaplamalar, seramikler, kompozitler, camlar, membranlar, metaller, polimerler ve yarıiletkenler gibi materyallerin yüzeyleri ayrıntılı görüntülenebilir ve elektriksel yük, manyetiklik, hidrofilik davranış gibi çeşitli özellikleri belirlenebilmektedir [7].



Şekil 1.26 Atomik kuvvet mikroskobunun (AFM) çalışma prensibi [90]

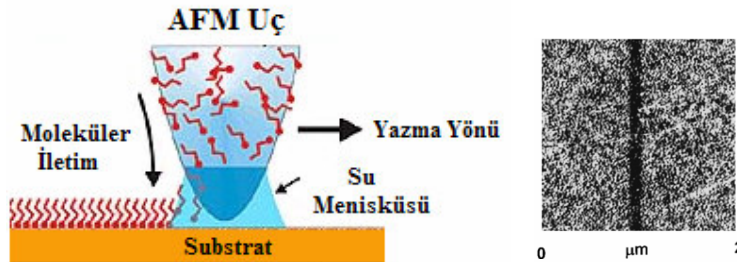
Atomik kuvvet mikroskoplarında iğneler çok küçük silikon yaylar üzerine mikrofabrikasyon teknolojisiyle yerleştiriliyor ve iğneyle yüzey arasındaki kuvvet nedeniyle bükülen yayın sarması, yani kuvvet, genellikle yayın arkasına odaklanan lazer ışığının sarmasının, bir fotodetektör sayesinde çok duyarlı bir şekilde ölçülmesiyle belirleniyor. Bir geri besleme devresi yine taramalı tünelleme mikroskoplarındaki (STM) gibi iğneyle yüzey arasındaki kuvveti sabit tutuyor; iğne yüzeyde taranırken ölçülen iğne hareketi, bize yüzeyin fotoğrafını atomik

çözünürlüğe kadar verebiliyor. Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile çözünürlük şu anda yalnızca ultra yüksek vakumda elde edilebilmekte. İlkece, atomik çözünürlük atmosferde ve sıvıda da elde edilebilir, fakat mikroskopların kuvvet çözünürlüğü henüz bu iş için tam olarak yeterli değildir [48].



Şekil 1.27 Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) [97]

Bu yöntemler atomik seviyede görüntü vermeden başka, ölçme ve atomik seviyede üretim yapmamıza da olanak sağlamaktadırlar. Atomik kuvvet mikroskoplarıyla gerçekleştirilen litografi işlemi Şekil 1.28'de görülmektedir. Yakın gelecekte atomik kuvvet mikroskoplarıyla (AFM), yüzeydeki atomların hangi elementlerden oluştuğunun belirlenebileceği de düşünülmektedir. Çok küçük toleranslar ve nanometre altı yüzey bitirme işlemleri sağlayabilen yüksek hassasiyette işlemlerin, makinelerin ve kontrol sistemlerinin geliştirilmesi, mikrometrik, nanometrik ve atomik boyutlardaki cisimleri ölçecek ve üç boyutlu (3D) görüntülerini sağlayacak yeni yöntemlerin oluşturulması, bağımsız molekülleri ve atomları tanımlayabilme, yönlendirebilme ve birbirine bağlayabilmenin kolayca sağlanması nanoteknolojinin amaçlarındandır.



Şekil 1.28 Atomik kuvvet mikroskobuyla gerçekleştirilen litografi işlemi [1]

Atomik kuvvet mikroskoplarının (AFM) başarısı, başka mikroskop çeşitlerinin doğmasına yol açtı. Manyetik kuvvetleri ölçen manyetik kuvvet mikroskobu (MFM); iğne ucunda bir manyetik parçacık yer almaktadır ve sahip olduğu iğne ve örnek yüzeyindeki nanometre cinsinden manyetik alanın etkileşmesi prensibi ile çalışmaktadır, sürtünme kuvvetlerini ölçen sürtünme kuvveti mikroskobu (FFM) ve ısı inceleme mikroskobu (TPM) gibi [48]. Isı inceleme mikroskobu iğnesinde bir mikro ısıtıcı mevcuttur. Yüzeye yakın bir yere yerleştirilen bu iğne, bölgesel ısı iletkenliğini karakterize etmekte ve harcanan ısıyı hesaplamaktadır. Isı inceleme mikroskobu'nda bölgesel ısınma ile moleküler yüzey değişikliği gerçekleştirilmektedir. Mikro-akışkanlar içindeki elektrotların oluşturduğu elektrostatik alanla moleküllerin veya küçük parçacıkların üzerinde hareket kuvveti oluşturmada diğer bir mikro üretim yöntemidir. Şekillendirilen elektrotlar, nano nesnelere tanıtmak için elektriksel alan dağılımı oluşturmaktadır [81].

Taramalı uç mikroskopları (SPM) ailesinin üyelerinden birisi de yüzeyin manyetik alan haritasını çıkaran taramalı hall aygıtı mikroskobudur (SHPM). Taramaları hall aygıtı mikroskobu, çok küçük bir nano-Hall algılayıcısı yüzeye yaklaştırılıp yüzeyde dolaştırıldığında yüzeyin manyetik alan haritasını manyetik alanı etkilemeden ve manyetik alan şiddetini doğrudan ölçerek yapabilmektedir. Bu mikroskopla 50 nm 'ye kadar çözünürlük elde edilebiliyor ve çok duyarlı manyetik alan ölçümleri yapılabilmektedir [48].

2. NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA

Atomik boyutta talaş kaldırırken çok önemli bir sorun ortaya çıkar. İş parçası üzerinden malzeme kaldırmak için gerekecek enerji atomik bağ enerjisinden büyük olmalıdır. Atomik bağ enerjisi, konvansiyonel talaş kaldırma yöntemleri ile karşılaştırıldığında oldukça büyük bir güç gerektirmektedir. Bu sebeple, atomik boyutta işlem yaparken, geleneksel kesici takımlar kullanılamaz, çünkü takım ömrü çok kısadır.

Nano ölçekte imalatın gereksinimlerini karşılamak için geliştirilen yüksek hassasiyette işleme teknikleri, sabit disk sürücülerde kullanılan hafıza disklerinin ve fotokopi makinelerinde kullanılan fotoreseptörlerin üretilmesinde 1970'lerde başarıyla uygulanmaya başlanmıştır. Bu tip uygulamalar, çok düzgün yüzeyler söz konusu olduğunda çok yüksek geometrik doğruluk gerektirmektedir. Bu yüzeyler frezeleme, lepleme ve parlatma gibi çok kesen ağızlı işlemlerden başka tek kesen ağızlı elmas takımlarla yüksek hassasiyette tornalama ile elde edilebilmektedir. Bu tip operasyonlar için geliştirilen tezgahlar, silindirik ya da düzlemsel formlar oluşturmak için tipik olarak sadece bir adet doğrusal hareket eksenini gerektirmekteydi. Tezgahlarda genellikle hava yastıklı iş mili ve granit taban üzerine kurulu lineer kızaklar kullanılmaktaydı. Tezgahlar, daha sonra CNC kontrol ve pozisyonel geri besleme teknolojisi ile birlikte çok eksenli sistemler kullanılarak geliştirildi. Bu dönemde gelişim, yüksek hassasiyette işleme teknolojisini temel alan tek kesen ağızlı elmas takımla tornalama konularında görüldü. Bu yüzden işlem, elmas takımlarla işlenebilen malzemelerle sınırlı kaldı. Bu tür malzemeler, hemen hemen tüm yüzey merkezli kübik kafes yapılı, temel olarak alüminyum, bakır, nikel, altın ve bronz gibi demir bulundurmeyen metal ve alaşımlardır. Bunlara ek olarak, elmas takımla işlemenin germanyum, silisyum gibi kristal malzemelerin ve polimetilmetakrilat, polistiren, polikarbonat gibi polimerlerin talaş kaldırılmasında da uygun olduğu görüldü.

Günümüzün teknikleriyle, özellikle silisyum kristal yapılı parçalar, tek kesen ağızlı elmas takımlarla son derece verimli bir şekilde işlenebilmektedirler. Bunun yanı sıra, geliştirilen taşlama teknolojileriyle, parlatma yapmaya gerek kalmadan son derece iyi yüzey kalitesine sahip parçalar elde edilebilmektedir.

Yüksek hassasiyette işleme, mikro ve nano ölçekte işleme olarak iki gruba ayrılabilir. Şu anda mikro ve nano ölçekte işleme tanımları, tezgahın ya da iş merkezinin kapasitesine bağlı görece bir biçimde ele alınabilirler. Bu sebeple, nano ölçekte işleme tekniklerinin geliştirilmesi için mikro ölçekte işleme mekanizmalarının da göz önünde bulundurulması gereklidir.

Konvansiyonel ve nümerik kontrollü takım tezgahları, gerek kesme derinliğinin ve ilerlemenin hassas kontrolünü ve gerekse de kesme kuvvetlerinin ölçülmesini gerçekleştiremediklerinden nano ölçekte talaş kaldırma için uygun değildirler. Bu sebeple, nano ölçekte talaş kaldırma uygulamaları henüz laboratuvar şartlarında ve özel düzeneklerle gerçekleştirilmektedir.

Nano ölçekte talaş kaldırmada öncü çalışmalar, tek kesen ağızlı elmas tornalama (SPDT) alanında Lawrence Livermore Ulusal Laboratuvarı (LLNL) tarafından gerçekleştirilmiştir. Bunu takiben ABD, İngiltere, Uzak Doğu ve Avrupa’da elektronik, optik ve manyetik alanlarında yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları gerçekleştirilmiştir. Şekil 2.1’de görülen Ito v.d. tasarladığı çevresel şartların kontrol edilebildiği yüksek hassasiyette torna tezgahı ‘Capsule’, 2–3 nm ortalama yüzey pürüzlülüğü sağlamaktadır. Şekil 2.2’de görülen Cranfield Üniversitesi’nde geliştirilen yüksek hassasiyette taşlama tezgahı ‘Tetraform C’, işlenmiş yüzeyin altındaki deformasyonu oldukça düşük seviyelerde tutarak kaliteli yüzey elde ederken parlatma / lepleme işlemlerini elimine ya da minimize etmek yoluyla hassas seramik ve optik parçaların ekonomik üretimini sağlamak için geliştirilmiştir.

Ikawa v.d. tasarladığı yüksek hassasiyette torna tezgahı ile manyetik etkileşim esaslı bir tahrik sistemi kullanılarak birkaç nanometre hassasiyette yüzey pürüzlülüğü elde edilebilmekte ve tek kristal silisyum iş parçası işlenebilmektedir. Hocken, Wei Gao v.d. tasarladığı nano-işleme tezgahında ise dalma, gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırma deneyleri yapılmış ve nano ölçekte işlemler için kuvvet ölçme düzenekleri uygulanmıştır. Şekil 2.3’de, Hocken, Wei Gao v.d. deneylerinde kullandıkları deneysel tezgahın bir şeması görülmektedir.

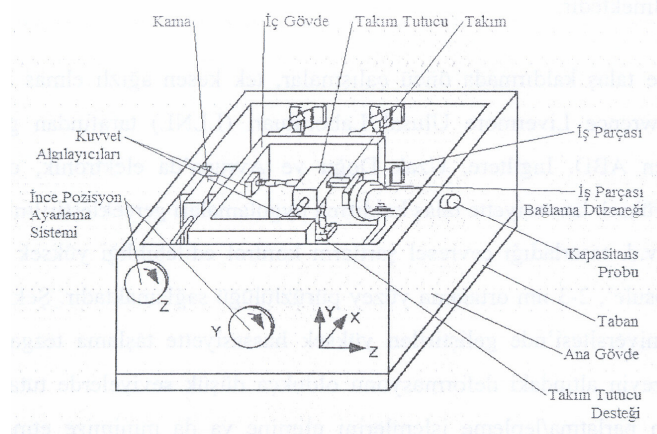
Günümüzde, bilgisayar kontrollü, tek kesen ağızlı elmas takımlarla ya da çok kesen ağızlı elmas taşlama taşları kullanan yüksek hassasiyette işleme tezgahları ile iş parçasına bağlı olarak 1 nm hassasiyette çözünürlük ve pozisyonlama sağlanabilmektedir.



Şekil 2.1 Ito v.d. tarafından geliştirilen yüksek hassasiyette elmas takımlı torna tezgahı “Capsule” [87]



Şekil 2.2 Cranfield Üniversitesi'nde geliştirilen “Tetraform C” [72]



Şekil 2.3 Hocken, Wei Gao v.d. nano ölçekte talaş kaldırma için tasarladıkları deneysel nano ölçekte talaş kaldırma tezgahı [6]

2.1 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Mekanığı

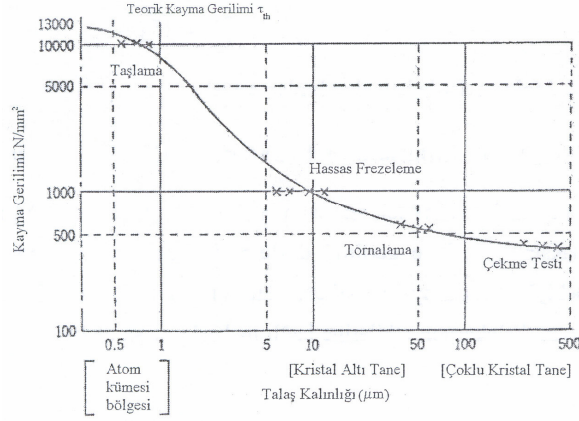
Çok yüksek hassasiyette ve ince işlenmiş parçaları nanometrik doğrulukta elde etmek için atomik boyutta ya da atom kümesi boyutunda işlemek gereklidir. Atomik boyutta işleme, malzemenin atom-atom işlenmesiyle elde edilebilir, böylece nanometre altı çözünürlük gerektirir, buna karşılık atom kümesi boyutunda işleme, atom kümelerinin işlenmesini kapsadığı için, çözünürlük birkaç nanometre kadardır.

Günümüzde mikro ve nano ölçekte talaş kaldırmanın kesin sınırları belli değildir. Bu sebeple, malzeme içindeki dislokasyonlara ya da mikro-çatlaklara bağlı mikro ölçekte talaş kaldırma teknikleri de, yüksek hassasiyette işleme uygulamaları için nanometrik hassasiyet gerektirdiğinden, mekanizmalarının bilinmesinde fayda vardır.

Birim hacim malzemeyi işlemek için gereken enerji olarak tanımlanan δ işleme enerjisi yoğunluğu, atomik boyutta işleme yapmak için $10^4 - 10^6 J.cm^{-3}$ iken, atomik kümelerin işlenmesi için $10^3 - 10^4 J.cm^{-3}$ dolaylarındadır. $0,1 \mu m - 10 \mu m$ aralığında tane-altı işlemede deformasyon, hareket eden dislokasyonlara ya da mikro-çatlaklara bağlıdır. Mikro-çatlaklar sebebiyle oluşan gevrek kırılmalar için işleme enerjisi yoğunluğu yaklaşık $10^3 J.cm^{-3}$ iken, dislokasyon etkilerine bağlı kayma hataları için gereken işleme enerjisi yoğunluğu $10^1 - 10^3 J.cm^{-3}$ dolayındadır.

Çok taneli yapıların işlenmesinde, tane sınırlarındaki hatalara bağlı işleme enerjisi yoğunluğu gevrek kırılma için $10^2 J.cm^{-3}$ 'ten; kayma için $10 J.cm^{-3}$ 'ten daha küçüktür. Fakat kaymaya dayalı talaş kaldırmada, iş parçasından talaş kaldırılabilmesi için kaymada kopma gerilimini aşmak gerekir, böylece ek özel talaş kaldırma enerjisi $\omega = 0,1 - 1 J.cm^{-3}$ önem kazanır.

Nanometrik ölçekte işlem yapıldığında, yani talaş kalınlığı $1 \mu m$ 'den az olduğunda, kayma dayanımı gerilimi, $\tau_s (N.mm^{-2})$, ya da özgül kesme enerjisi, $\delta_s (J.cm^{-3})$, hızla yükselir ve çok büyük olur. Şekil 2.4'te alaşımsız çeliklerde talaş kalınlığına bağlı kayma gerilimi görülebilir.



Şekil 2.4 Alaşımısız çeliklerde talaş kalınlığı-kayma gerilimi ilişkisi [6]

Şekilden de görüldüğü üzere talaş kalınlığı azaldıkça, takımın kesen ağzının ya da taşlama tanelerinin önündeki işlenen parçanın malzemesinin kayma gerilimi aşırı derecede yükselir ve teorik kayma gerilimi τ_{th} 'a ya da alaşımısız çeliğin atomik bağlanma dayanımına yaklaşır;

$$\tau_{th} = \mu/2\pi \quad (2.1)$$

$\mu = 8,2 \times 10^4 \text{ N.mm}^{-2}$: alaşımısız çelik için rijitlik modülü

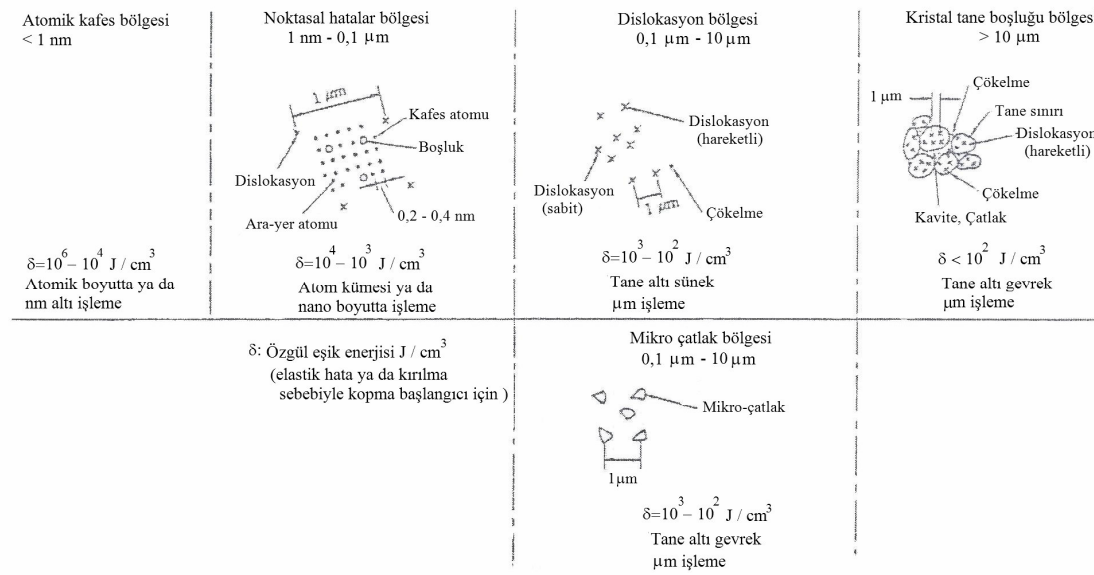
Bunun nedeni, $1 \mu\text{m}$ 'den daha küçük kesme derinliklerinde, metal kristalleri içerisinde hareket eden dislokasyonların dağılımlarının sıfıra yaklaşması ve kesme kuvvetlerinin kristalin içindeki çok büyük atomik bağ kuvvetlerini yenmek zorunda olmalarıdır. Şekil 2.5'de çalışma bölgelerinin büyüklüğüne göre malzeme hatalarının dağılımları görülebilir.

2.1.1 Malzeme İçindeki Kusurlara ya da Hatalara Bağlı İşleme Mekanizması

Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları Şekil 2.6'da görülmektedir. Gevrek malzemeler, maksimum çekme gerilimi düzleminde oluşan mikro-çatlaklara bağlı çekme kırılmaları sebebiyle bozulmaya uğrarken, sünek malzemeler maksimum kayma gerilimi düzleminde oluşan dislokasyon etkilerine bağlı makaslama ya da kayma sebebiyle bozuluma uğrarlar.

Bölgesel yük altındaki malzemelerin bozulmaları, eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmalarından oldukça farklıdır. Bu tip bozulmaları gösteren şema Şekil 2.7'de görülmektedir. Dalıcı takım kullanılarak yapılan bölgesel yükleme için, seramik ve amorf camların bozulma ve

kırılma davranışı, dalma bölgesinin boyutuna göre oldukça geniş bir çeşitlilik gösterir. Birkaç milimetrelük bir uç yarıçapına sahip bir dalıcı kullanımında ise maksimum çekme geriliminin etkidiği dalma temas bölgesinin çevresinde çevresel kırılma oluşur. Birkaç mikrometrelük bir uç yarıçapına sahip bir dalıcı kullanımında ise iş parçası ile temas eden bölgede plastik deformasyon sebebiyle çok küçük bir dalma izi ya da bir dejenere bölge oluşur.



Şekil 2.5 Malzemelerde hata dağılımları ve işleme bölgeleri [6]

		Çekme	Basma	Burkulma	Eğilme
Gevrek Seramikler	Gevrek Kırılma (Mikro-çatlak)				
Sünek Metaller	Plastik Bozulma (Dislokasyon)				

Şekil 2.6 Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları (Oda sıcaklığında) [7]

Eğer seramik ve cam malzemeler birkaç dekanewtonluk bir yükte çizilirse, görece büyük uç yarıçaplı bir dalıcı takım kullanımında, sürme kırılması oluşur. Fakat birkaç mikrometrelük uç

yarıçaplı sivri bir dalıcı takım kullanımında birkaç santinewtonluk yüklerde, plastik deformasyon sebebiyle birkaç mikrometre kalınlığında bir çizik izi oluşacaktır. Si ve Ge gibi çok gevrek malzemeler çizildiğinde benzer bir olgu gözlenebilir, fakat iz daha keskindir. Ancak, malzemelerde gerek dalma gerekse de çizme işlemlerinde olsun, plastik deformasyon mutlaka oluşacaktır. Bu durum Şekil 2.7’de görülebilir.

Böyle karmaşık durumların ortaya çıkmasının sebebi, malzemelerin üniform olmayıp noktasal hatalar, sınır çatlakları, kristal taneleri çevreleyen katmanlar gibi kırılmayı ya da bozulmayı başlatan değişik hatalar içermeleridir. Ayrıca, iş parçasındaki hatalar, malzemenin işlenmesinde büyük önem kazanır.

Bunların da ötesinde, malzemenin bozulma ya da kırılma davranışı, sıcaklık, atmosferik basınç, nem ve tekrar eden yükleme çevrimlerinin sayısı (dayanım limiti) gibi çevresel etkenlere de bağlıdır.

2.1.2 Hatasız Kristal Yapıların Teorik Kayma Dayanımı

Sünek malzemenin teorik kayma dayanımı Şekil 2.8’de görüldüğü üzere, iki atomik katman arasındaki kesme kaymasından belirlenebilir. Bir atomu, bir atomik kafes sabiti boyu kadar komşu atoma karşı hareket ettirmek için, atoma U_0 potansiyel bariyer enerjisini aşan bir aktivasyon enerjisi uygulanmalıdır;

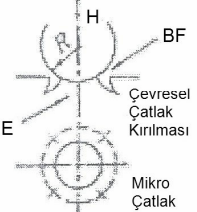
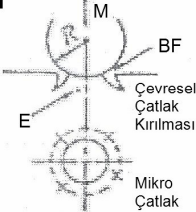
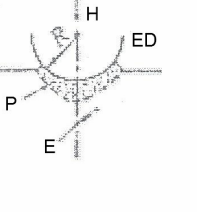
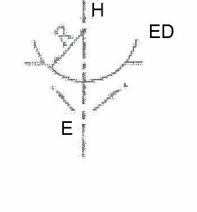
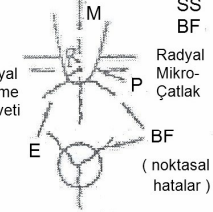
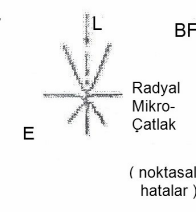
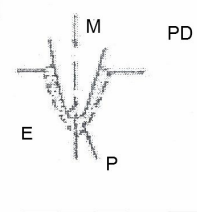
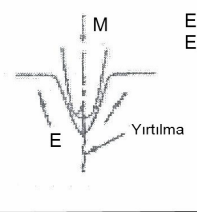
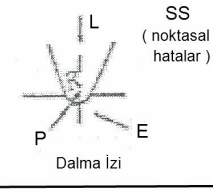
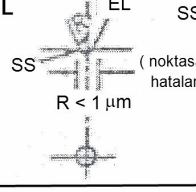
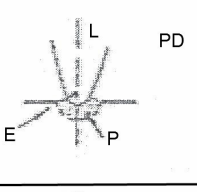
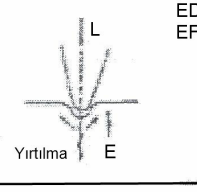
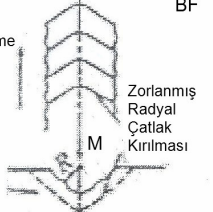
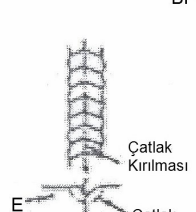
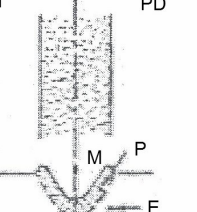
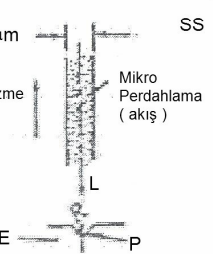
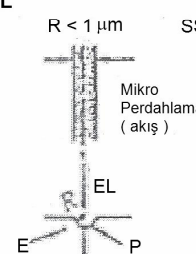
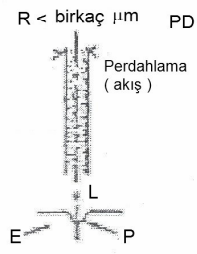
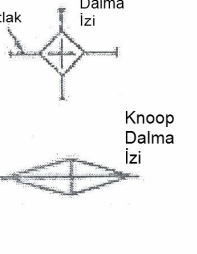
$$U = U_0 [1 - \cos(2\pi x/b)] \quad (2.2)$$

U , kafes noktasından x kadar uzaktaki atomun sinüzoidal potansiyel eşik enerjisidir. Atom kayma düzleminde x kadar hareket ettirmek için gerekli τ kesme gerilimi;

$$\tau = \tau_{\max} \left(\frac{2\pi \cdot x}{b} \right) \quad (2.3)$$

eğer x/b küçükse;

$$\tau = \tau_{\max} \frac{2\pi \cdot x}{b} \quad (2.4)$$

Dalıcı Yarıçapı	Cam Seramikleri (MgO, SiO_2, Al_2O_3)	Si, Ge, Elmas (Tek Kristal Yapıda)	Metaller, Plastikler	Kauçuk
Mod	Makaslama Kayması (noktasal hata) için Gevrek Kırılma (mikro-çatlak)	Makaslama Kayması (noktasal hata) için Gevrek Kırılma (mikro-çatlak)	Plastik Deformasyon (Dislokasyon)	Elastik Deformasyon
Dalma R (birkaç mm)	H 	M 	H 	H 
Dalma R (birkaç mm)	M 	L 	M 	M 
	L 	EL 	L 	L 
Çizme R (birkaç mm)	M 	L 	M 	
Çizme R (birkaç mm)	L 	EL 	L 	

Şekil 2.7 Bölgesel yük altındaki malzemelerin bozulmaları (Oda sıcaklığında). E: Elastik Gerinim Bölgesi, P: Plastik Gerinim Bölgesi, BF: Gevrek Kırılma, PD: Plastik Deformasyon, ED: Elastik Deformasyon, EF: Elastik Bozulma, SS: Makaslama Kayması (noktasal hata kaynaklı), Yükleme: H, ağır (> 10 N); M, orta (1 N); hafif (~0,1 N); EL, çok hafif (~0,01 N)

Öte yandan, küçük gerinimler için, μ kayma modülü kullanılarak, Hooke yasası uygulanabilir. Böylece;

$$\tau = \mu \cdot x / a \quad (2.5)$$

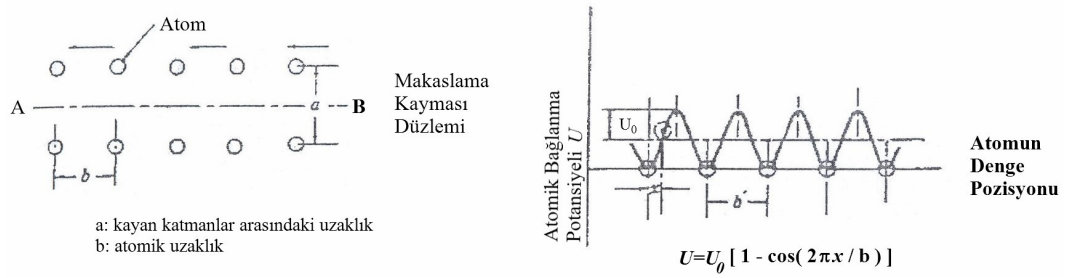
elde edilir. Burada a , kayan katmanlar arasındaki uzaklıktır. Böylece,

$$\tau_{\max} = \frac{\mu \cdot b}{2\pi \cdot a} \quad (2.6)$$

eğer $a = b$ alınırsa, böylece teorik kesme dayanımı;

$$\tau_{th} = G / 2\pi \quad (2.7)$$

(2.1) denklemi elde edilir.



Şekil 2.8 Atomik makaslama kayması ve kayma için atomik bağlanma potansiyeli [6]

Tyson (Tyson, 1966), interatomik kuvvet denklemlerini kullanarak yaptığı bilgisayar simülasyonu sonuçlarına göre, metaller için $\tau_{th} = \mu/16$, NaCl kristalleri için $\tau_{th} = \mu/8$ ve kovalent bağlı elmas için $\tau_{th} = \mu/3$ değerlerini elde etmiştir. Burada bahsedilen teorik dayanım değerleri, deneysel verilerden yaklaşık 100 kat yüksek çıkmaktadır.

Elmas yapılı Si, Ge ve elmas kristallerinin teorik dayanımı yukarıdaki denklemle verilmez, ama

$$\tau_{th} = \mu / (0,8 \cdot \pi) \quad (2.8)$$

olarak bir yaklaşım sunulabilir.

Bu hesaplamalar sıcaklığın etkisini içermemektedir. Sıcaklık arttıkça atomların kinetik enerjisi artacağından, maksimum eşik potansiyeli azalacaktır. Bu yüzden, genel olarak, sıcaklık arttıkça teorik dayanım azalacaktır.

δ_s özgül kayma enerjisi yoğunluğu, elastik kayma bozulması limitinde, teorik kayma dayanımına bağlı olarak,

$$\delta_s = \tau_{th}^2 / (2\mu) \quad (2.9)$$

şeklinde yazılabilir.

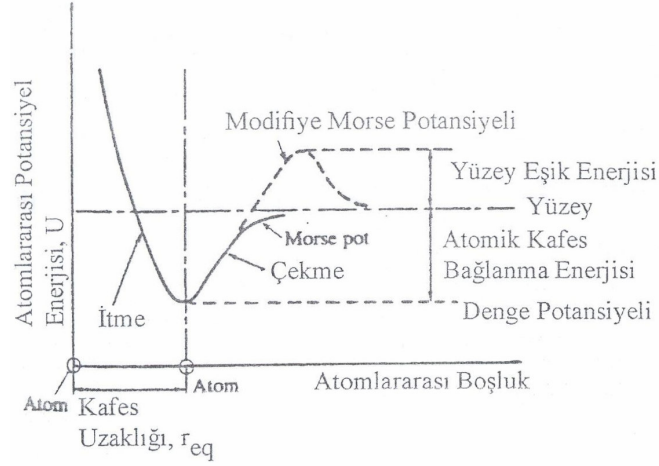
2.1.3 Hatasız Kristal Yapıların Atomik Boyutta İşlenmesi

Genel olarak, atomik katman mesafesi ya da kristallerde etkin yarıçap $0,1 \text{ nm} - 1 \text{ nm}$ arasındadır. Bu ölçekte malzemenin işlenmesi atomik boyutta ya da atom-atom işlem gerektirir. Bunlara örnek olarak buharlaşma yoluyla atomik boyutta malzeme kaldırma; foton, elektron ya da plazma enerjisi ışınları ile üretilen bölgesel ısı enerjisine bağlı difüzyon ya da çözünme; iyonların kinetik enerjilerinin transferi yoluyla yüzey atomlarının püskürtülmesi ve reaktif atomların kimyasal ya da elektrokimyasal tepkimeler ile kaldırılması verilebilir.

Malzemeyi atomik boyutta işlemek için gerekli enerji, katı yüzey katmanının atomik kafes bağlanma enerjisidir. Şekil 2.9'da görülen atomik kafes bağlanma enerjisi, katı yüzey etkisi göz önünde bulundurularak elde edilmiş iki atomun arasındaki modifiye Morse serbest potansiyel enerjisidir. İş parçası yüzeyinden bir atom ayırabilmek için, yüzeydeki düzensiz atom yerleşmesine bağlı yüzey enerjisi sebebiyle oluşan yüzey bariyeri potansiyel enerjisini aşmak için fazladan enerji gereklidir.

Makroskobik olarak termal buharlaştırma işlemine, malzemeyi atomik boyutta ayırmak için gerekli enerji $6 - 25 \text{ eV}$ ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$) arasındadır. Bu her ne kadar ayırma için gerekli net enerji olsa da, uygulamada gerekli etkin enerji daha düşüktür ve kullanılan ışımaya tekniğine göre değişiklik gösterir. Atomik boyutta birleştirme işlemleri buharlaştırma ile birikme, iyon püskürtme ile birleştirme, elektrokimyasal biriktirme ve direkt iyon biriktirmesi olarak

sıralanabilir. Atomik boyutta birleştirme için gerekli enerji yaklaşık yüzey bariyeri potansiyel enerjisi kadardır.



Şekil 2.9 Katı yüzey etkisi göz önünde bulundurularak elde edilmiş iki atomun arasındaki modifiye Morse serbest potansiyel enerjisi [6]

Atomik boyutta yer değiştirme için gerekli enerji, atomik boyutta ayırma için gerekinden daha az olarak öngörülmektedir, çünkü ayırma işlemi kristal atomları arasındaki kayma enerjisini içerir.

2.1.4 Atomik Kümelerin Nano Ölçekte İşleme Mekanizmaları

Atomik kümelerin işlenmesi için gerekli çalışma gerilimi kristal tanelerin içindeki $1 \text{ nm} - 0,1 \mu\text{m}$ aralıkta dağılmış noktasal hatalara bağlıdır. Noktasal hatalara bağlı olarak kırılma ve bozulmalar ortaya çıkar. Yine de, amorf camdaki mikro faz alanı ve organik polimerlerdeki büyük moleküller noktasal hata alanından ya da atom kümesi bölgesinden daha büyüktür.

Noktasal hatalara bağlı mekanizmalar elmas uçlu bir dalıcı takımla dalma ya da çizme işlemlerinde ortaya çıkar. Atom kümesindeki dalma testi için, Hertz elastik temas teorisi uygulanmaktadır. Şekil 2.10(a) ve Şekil 2.10(b)'de dalmış düz takımdaki gerilim dağılımı görülmektedir.

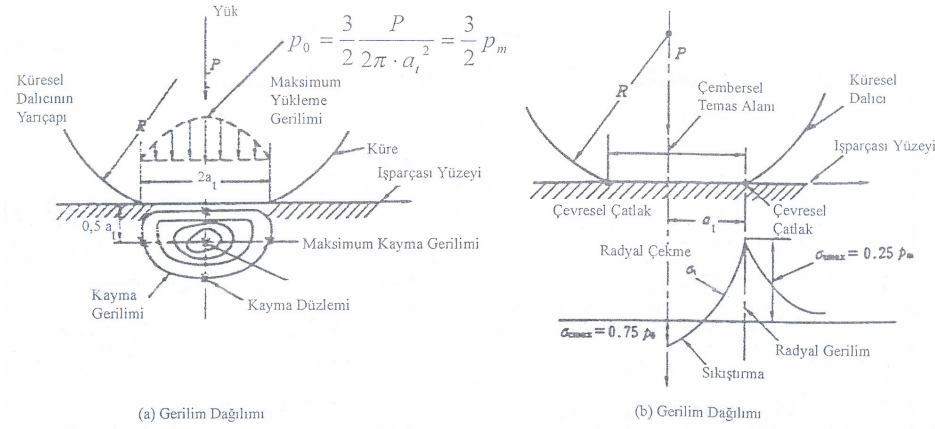
τ_{\max} , maksimum kesme gerilimi ($N.m^{-2}$) düz yüzeyin $0,5.a_i$ altında oluşmaktadır,

$$\tau_{\max} = 0,120(P.E^2/R^2)^{1/3} = 0,47 p_m \quad (2.10)$$

burada P ; dalma yükü, E ; boyuna elastiklik modülüdür. Temas alanının yarıçapı;

$$a_t = \{(3P/16).[4.(1-\nu^2).R/E]\}^{1/3} \quad (2.11)$$

burada ν ; Poisson oranıdır.



Şekil 2.10 Küre ve iş parçasının teması sonucu oluşan gerilim dağılımı. (a) Rijit dalıcı ile oluşan

temas alanı, (b) Rijit dalıcı ile oluşan temas yüzeyi. Ortalama temas basıncı $p_0 = \frac{P}{\pi \cdot a_t^2}$, a_t ;

temas alanı yarıçapı, R ; dalıcının yarıçapı, σ_1 ; temas alanındaki çekme gerilimi, σ_c ; temas alanındaki sıkıştırma gerilimi [6]

Bunun anlamı, τ_{\max} maksimum kayma gerilimi, elastik kayma bozulmuş limitini ya da $\tau_{th} = \mu/2\pi$ (burada μ elastik kayma modülüdür) aştığı zaman, maksimum kayma düzlemindeki noktasal bir hatadan bir makaslama kayması başlar. Makaslama kaymayı başlatacak P_f yükleme kuvveti;

$$P_f = 2,37(\mu/E)^3 ER^2 \quad (2.12)$$

$$\mu/E = 1/[2(1+\nu)] \quad (2.13)$$

olarak elde edilir.

Boşlukların ve diğer noktasal hataların, maksimum kayma gerilimi düzlemi yakınlarında olduğu ve makaslama kaymasının noktasal hatalardan başladığı varsayılmaktadır. Uygulamada, makaslama kayması maksimum kayma düzlemi boyunca açığa çıkar ve sonunda yüzeye ulaşır. Bu sebeple, kayma oluşturmak için P_f 'den daha büyük bir yük uygulamak gereklidir.

Temas yüzeyindeki σ_{\max} maksimum radyal çekme gerilimi Şekil 2.10(b)'de görüldüğü gibi temas çemberinin çevresinde oluşur ve büyüklüğü;

$$\sigma_{\max} = 0,0516(PE^2/R^2)^{1/3} \quad (2.14)$$

kadardır. Buna ek olarak, σ_{\max} teorik çekme dayanımı ya da elastik bozulma limiti $\sigma_{th} = E/2\pi$ aşıldığında, komşu çemberde çekme kırılması oluşur. Ayrılma için P_a dikey yük, σ_{th} denklem (2.14)'e uygulanarak;

$$P_a = 29,38ER^2 \quad (2.15)$$

bulunur. Bu sebeple $P_d > P_f$ her zaman noktasal hata bölgesinde olacaktır. Sonuç olarak, bu bölgede dalma yapıldığında, kayma bozulması her zaman oluşacaktır.

Eğer temas alanının maksimum çekme gerilimi çemberinde bir mikro-çatlak oluşursa, Şekil 2.7'de görüldüğü gibi bir çevresel çatlak oluşur, fakat mikro-çatlakların yokluğunda, atomik boyutta olduğu gibi, kayma bozulması temas alanının merkezinin hemen altında oluşur.

2.1.5 Sünek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesi

0,1 – 10 μm arasındaki bölgede tane altı proseslerde sünek malzemenin kayma bozulması ya da plastik deformasyonu dislokasyon hatalarından kaynaklanır.

İş parçasına bir yük uygulandığında ve kayması olduğunda, dislokasyon çizgisi etrafındaki kafes atomları Burgers vektörü etrafında döner. Yani, dislokasyon çizgisi, atomların birim atomik kafes uzunluğu kadar hareket etmesini sağlar. Belirli bir yönde, bir kristal kafes boyunca bir dislokasyonun hareket etmesi için gerekli kayma gerilimi τ_c Peierls Gerilimi olarak verilir;

$$\tau_c = [2\mu/(1-2\nu)] \exp(-2\pi\omega_e/b) \quad (2.16)$$

burada μ ; elastik kesme modülü, ν ; poisson oranı, b ; belirli bir kayma yönündeki atomların arasındaki uzaklığa denk gelen Burgers vektörü ve ω_e ; etkin dislokasyon bölgesinin kalınlığıdır.

Hacim merkezli kübik kafese sahip sünek metallerde kayma düzleminde $\omega_e/b = 1/(1-\gamma)$, gevrek seramikler için $\omega_e/b \ll 1/(1-\gamma)$ olur, böylece kafes noktaları yakınlarında atomik bağlanma potansiyellerinin şiddetli artışı sebebiyle ω_e çok küçük kalır. Kafes düzensizliğini oluşturan dislokasyon çizgileri etrafında oluşan yüksek potansiyel alanının, makaslama kaymasını oluşturduğunu öngörmek kolaydır.

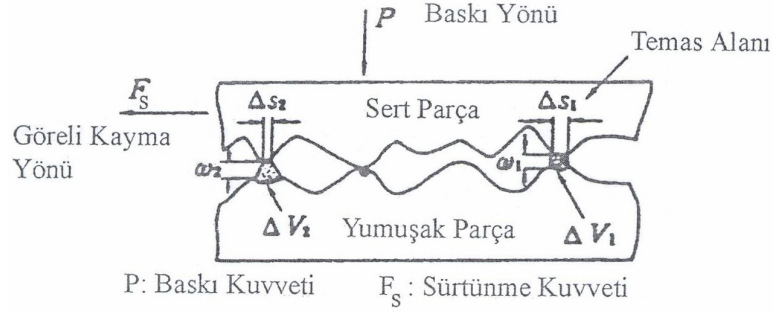
2.1.6 Sürtünme Yoluyla Abrazif Aşınma ile Talaş Kaldırma

Her ne kadar, sürtünmeye bağlı aşınma konusu teknik literatürde geniş olarak ele alınsa da, çizmeye bağlı abrazif aşınma, kaymaya bağlı abrazif aşınma ve dayanıma yorulma nedeniyle yuvarlanma aşınması için aşınmanın büyüklüğü tam olarak ele alınmamıştır.

Şekil 2.11'de görüldüğü gibi, aşınma sürtünmesi kavramına dayanan statik sürtünmenin mekanizması Bowden ve Tabor tarafından tartışılmıştır. Tabor'un sürtünme kavramı şu şekildedir: iki parça yüz yüze yerleştirilir ve birbirleri üzerinde P normal kuvvetiyle gezdirilir. Böylece birbirine eşit olmayan iki yüzey arasındaki çıkıntılar temas eder ve yapışkan bir alan oluştururlar. Toplam yapışkan temas alanı S , basma kuvvetiyle doğru, parçanın sertliğiyle ters orantılıdır;

$$S = kP/H_v \quad (2.17)$$

Burada H_v ; parçanın Vickers sertliğidir ve k orantısallık sabitidir. Fakat basma kuvveti yüzey bariyer potansiyeli enerjisine bağlı yüzey gerilimiyle karşılaştırıldığında çok küçük kalıyorsa, yapışık temas alanı sıfır varsayılmalıdır. Bir başka deyişle, mikro talaş kaldırmada kayma, parça katı veya yapışkan gaz ve sıvıdan oluşan bir yüzey tabakası üzerinde kayarak hareket etme şeklindedir.



Şekil 2.11 Statik sürtünmenin sürtünme ve aşınmaya dayalı mekanizması [6]

Parçaları birbiri üzerine kaymaya zorlayan sürtünme kuvveti F_s , temas noktalarına etkileyen yapışma kuvvetini yenmelidir. Bu da;

$$F_s = \tau_a \cdot S \quad (2.18)$$

Burada τ_a temas bölümünün yapışma dayanımıdır. Bu sebeple, sürtünme katsayısı;

$$\mu_s = F_s / P = k \tau_a / H_v \quad (2.19)$$

Ayrıca birbirine bastırılmış iki parça birbirleri üzerinde kaymaya zorlanmaktadırlar, böylece yapışkan temas bölümü kopar. Böylece, bu mekanizma için aşınma hacmi V_w ;

$$V_w = \omega_c \cdot S = \omega_c \cdot kP / H_v \quad (2.20)$$

burada, ω_c ; kopan talaşın ortalama kalınlığıdır. Fakat kaba yüzeylerdeki çıkıntılarının birleşimine ve kopmasına bağlı yapışkan aşınma hacmi, bu yaklaşımla tam olarak elde edilemez. Çünkü bu tür bir aşınma hacmi, kafesteki ve atom kümesi bölgelerindeki bozulma ve kırılmalara da bağlıdır. Bunun yanında, yapışkan aşınma aşağıdaki gibi ele alınabilir.

Sürtünme işlemindeki enerji dengesine bağlı olarak ve Şekil 2.11'e göre, şu ilişki yazılabilir;

$$\mu_s P \times S^{1/2} = V_w \times \delta \quad (2.21)$$

burada μ_s , P , S ve V_w daha önce açıklanmıştır. δ , atom kümesi bölgesindeki özgül işleme enerjisi yoğunluğudur. $S^{1/2}$, temas alanına bağlı sürtünme esaslı kayma mesafesidir.

$\mu P = \tau_a \times S$ ilişkisinden (burada $S = kP/H_v$), aşınma hacmi için şu yazılabilir;

$$\begin{aligned} V_w &= (\tau_a / \delta).S^{1/2} = (\tau_a / \delta).(kP/H_v)^{3/2} \\ &= k_v.P^{3/2} \end{aligned} \quad (2.22)$$

$k_v = (\tau_a / \delta).(k/H_v)^{3/2}$, yapışkan aşınma hacmi katsayısı, malzeme özelliklerine bağlı bir sabittir.

Bu sebeple, aşınma hacmi V_w , P 'nin $3/2$ 'inci kuvveti ile orantılıdır. Denklem (2.20)'de ise bu durum söz konusu değildir.

Gerçek sürtünme olgusunda, ayrılmış parçaların tekrar bağlanmalarına bağlı çizme aşınması rastlantısal oluşur. Bu sebeple Denklem (2.21) ile verilen V aşınma hacmi sürtünme aşınması için temel bir niteliktir.

2.1.7 Gevrek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesinde Peierls Gerilimi

Her ne kadar, tane altı bölgede gevrek malzemelerde dislokasyonların sayısı oldukça düşük olsa da, mikro-çatlaklar yoğunlukla dağılmışlardır. Bundan başka, dislokasyonlara bağlı τ_c Peierls gerilimi oldukça yüksektir, çünkü sünek malzemelerle karşılaştırıldığında ω/b çok düşük ise de Peierls denkleminde G çok büyüktür. Örneğin elmas için $\tau_c > 10 \text{ GPa}$ ($G = 900 \text{ GPa}$) ve silisyum kristali için $\tau_c = 5 - 6 \text{ GPa}$ ($G = 125 \text{ GPa}$)'dir. Bu yüzden, mikro-çatlaklara bağlı gevrek kırılma, seramiklerde düşük gerilimlerde bile ortaya çıkmaya meyillidir.

Elmas ve silisyum gibi gevrek malzemeler için Peierls geriliminin çok büyük olmasının sebebi;

- I. Atomik yapıları güçlü kovalent bağlardan oluşur,
- II. Yüzey merkezli ya da hacim merkezli elmas yapıları, kristal içinde kolaylıkla kayma düzlemi oluşmasına izin vermez.

Bu sebeplerle, atomik bağlanma potansiyeli bariyerini aşmak ve atomun bir sonraki kafes pozisyonuna ötelemek çok zordur.

SiO₂ gibi seramiklerde, farklı atomlar arasındaki güçlü bağlanma kuvvetlerinden oluşan ‘elmas’ benzeri yapılar bulunur. Bu yüzden, Al₂O₃ ve benzeri seramiklerin Peierls gerilimi 4 – 6 *GPa* civarındadır.

Yüksek sıcaklıklarda, seramik içindeki atomların makaslama kayması, oda sıcaklığında olduğundan daha kolay ortaya çıkar, çünkü atomlar, serbest potansiyel enerjinin artmasına sebep olan yüksek ısı vibrasyon enerjisi ortaya koyarlar. Bu yüzden, atomik bağlanma potansiyeli bariyeri daha kolay aşılar. Örneğin, 1800 °C’de makaslama kayması 50 *MPa* gerilimde ortaya çıkar. Bu sıcaklık etkisi, elmas iş parçasının kızıl sıcaklığa ulaştığı, elmasın atomik boyutta ve atomik kümede parlatılmasında ortaya çıkar.

2.1.8 Organik Polimerlerin Moleküler Sınır Hatalarına Bağlı Tane Altı İşlemleri

Organik yüksek moleküllü polimerlerin yapısı, uzun bağlı zincirlerden oluşur. Polimer atomlarının arasındaki bağlar iyonik ya da kovalent olsun, polimer molekülleri arasındaki bağlar van der Waals kuvvetiyle oluştuğundan oldukça zayıftır. Ayrıca, polimerlerin moleküller arası deformasyonu, van der Waals bağlanma kuvvetine karşı oluşan, büyük molekül grupları arasındaki viskoz kaymaya bağlıdır. Fakat mikrometre altı düzeyde çok ince talaş kaldırma yapıldığında, konvansiyonel kesici takımlar kullanılamazlar, çünkü atomları polimer molekülünden ayırmak için, iyonik ya da kovalent bağlanma kuvvetini aşacak yüksek enerji yoğunluklu atomik boyutta işlemler gereklidir. Bu yüzden, yüksek yapı polimerlerden çok ince talaş kaldırmak için, sinterlenmiş karbürden, elmas talaşından yapı kesici takımlar ya da SiC gibi aşındırıcılar gereklidir.

Bunun da ötesinde, organik cam gibi gevrek davranış gösteren bazı yüksek polimerlerde, yüksek hızda talaş kaldırmada viskoz akışa bağlı kayma kolay oluşmaz ve gevrek kırılma oluşur.

2.2 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Yöntemleri

Nano ölçekte talaş kaldırmada, tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma, çok kesen ağızlı takımlarla nano ölçekte taşlama ve honlama, lepleme ve parlatma gibi yöntemlerle yapılır. Bu yöntemlerde işleme birkaç on nanometreden ibarettir, bu yüzden atom kümesi bölgesinde

dalma ve çizme hareketleri, sadece noktasal hatalardan kaynaklanan kayma mekanizmasına bağlıdır.

Nano ölçekte taşlama ve honlama, sert ve kırılğan malzemelerin sünek işlenmesinde elmas aşındırıcı tanelerden oluşan taşlar kullanılarak uygulanırken; tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırmada yumuşak ve sünek malzemelerde tek kesen ağızlı elmas takımlar ile kayma mekanizmasına dayalı olarak gerçekleştirilir. Nano ölçekte lepleme ve parlatmada, sert ve kırılğan malzemelerin işlenmesi amacıyla serbest aşındırıcılar kullanılır.

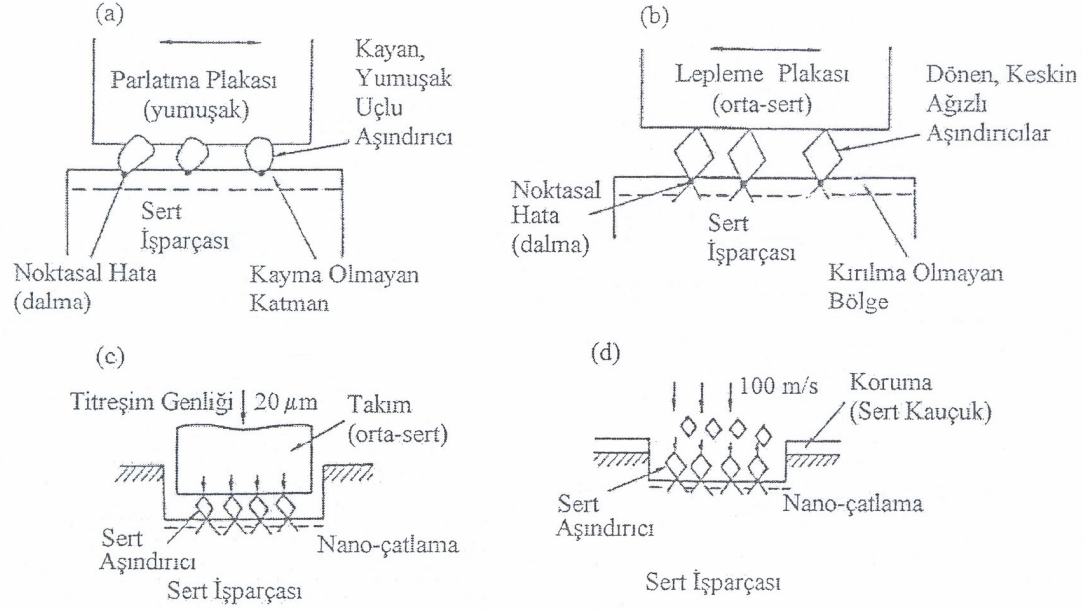
Tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma birkaç on nanometrelik işlemeyi kapsar, fakat kesici takımın talaş kaldırma esnasında yenmesi gereken atomik bağ kuvveti yüksek olduğundan, kesici takımın ucuna etkiyen kayma gerilmesi makro ve mikro ölçekteki değerlerinden çok daha yüksektir. Bu sebeple, nano-kesmede kullanılacak takımlar elmasla sınırlandırılmıştır. Nano-kesme ile elde edilen iş parçası, işlenmiş yüzeyin ve yüzey altının deformasyonunun çok az olduğu pürüzsüz ve ayna gibi yüzeylere sahiptir.

Nano ölçekte taşlama ve honlama birkaç on nanometrelik bir kesme derinliğiyle kayma oluşturur ve çoğunlukla cam ve seramik gibi sert ve kırılğan malzemelerde çatlaksız yüzeyler elde etmek için kullanılır. Aşındırıcı tanelerin kesici ucuna etkiyen gerilmeler son derece yüksektir. Bu yüzden, nano ölçekte taşlama ve honlamada sadece bir tabana bağlı çok ince taneli elmas aşındırıcılar (bağlı-aşındırıcılar) kullanılabilir.

Bağlı-aşındırıcılı işlemlerden farklı olarak, atom kümesi düzeyinde düzlem leplenmesinde ve ayna parlatmada yeniden kullanılabilir ince taneli serbest aşındırıcılar kullanılır, fakat bu iki yöntemin mekanizmaları, Şekil 2.12’de gösterildiği gibi oldukça farklıdır.

Ayna parlatma, Şekil 2.12 (a)’da gösterildiği gibi, Fe_2O_3 , Cr_2O_3 , CeO_2 veya MgO gibi yumuşak ama ısıya dayanıklı ve keskin ağızlı olmayan ince taneli aşındırıcılar kullanılarak kayma veya parlatma hareketleri ile yapılır. Bu yöntemde aşındırıcılar, iş parçasının yüzeyine bağlı olarak hareket eden yumuşak parlatma tabakasına gömülürler ve noktasal hata etkisiyle kayma mekanizması ile iş parçasının yüzeyini parlatırlar. Diğer yandan, düzlem leplemede, Şekil

2.12(b)'de gösterildiği gibi, elmas, CBN, SiC, SiO₂ veya B₄C gibi sert ve aynı zamanda kırılğan, keskin ağızlı, ince taneli aşındırıcılarla talaş kaldırma işlemi gerçekleştirmek için orta-sertlikte bir lepleme plakası kullanılır. Düzlem lepleme yönteminde, Şekil 2.12(c) ve Şekil 2.12(d)'de gösterildiği gibi, çok ince taneli aşındırıcılar ile ultrasonik etkiyle veya darbeli olarak gerçekleştirilen teknikler de uygulanmaktadır.



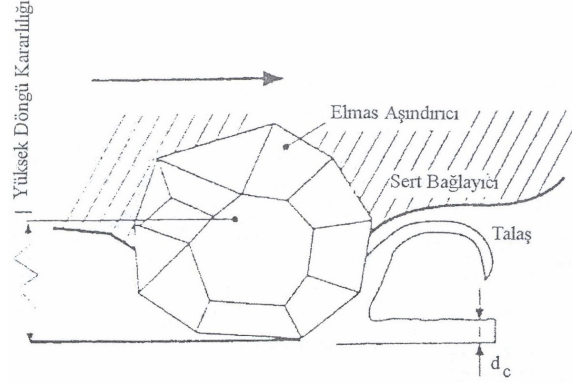
Şekil 2.12 Cam, Seramik gibi gevrek malzemelerin düzlem leplenmesi ve parlatılması. (a) Ayna Parlatma, (b) Düzlem Lepleme, (c) Ultrasonik İşleme, (d) Darbeli İşleme [6]

2.2.1 Gevrek Malzemelerin Kayma Mekanizmaları ile Sünek Rejimde İşlenmesi

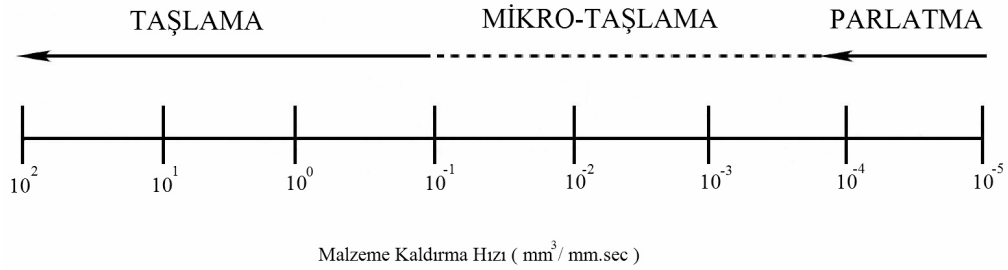
İşleme toleranslarındaki gelişmeler, gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesine olanak sağlamıştır. Belirli bir kontrol altında, seramik gibi gevrek malzemelerin, çatlaksız yüzeyler elde edecek şekilde, tek kesen ağızlı takımlar ya da çok kesen ağızlı elmas taneli taşlama taşlarıyla plastik akış yoluyla işlenmesi mümkündür. Şekil 2.13'de bu durum görülmektedir. Bu işlem sünek rejimde işleme olarak adlandırılır.

Sünek rejimde işleme, deformasyon çok küçük olduğunda her malzemenin plastik deformasyona uğrayacağı ilkesine dayanır. Şekil 2.14'de görüldüğü üzere taşlama ve parlatma prosesleri arasında malzeme kaldırma hızı farkı çok fazladır. Bu boşluk, seramik, cam ve yarı iletken

malzemelerin işlenebildiği sünek rejimde işleme tekniğine dayanan mikro-taşlama tekniği ile doldurulabilmektedir.



Şekil 2.13 Elmas aşındırıcı taneyle gevrek iş parçasının sünek rejimde işlenmesi [6]



Şekil 2.14 Çok kesen ağızlı kesici takımlarla malzeme kaldırma hızı karşılaştırması [6]

Gevrek malzemelerde, gevrek rejimden sünek rejime geçiş, gerilme enerjisi ve yüzey enerjisindeki enerji dengesi yoluyla açıklanabilir. Yükün uygulanmasında oluşan lokalize kırılmalar gevrek malzemelerin işlenmesinde önemlidir. İşleme, dalma çatlaklarının oluştuğu bir dalma işlemi olarak görülebilir ve bu çatlaklar sünek rejimde işleme için önemli rol oynar.

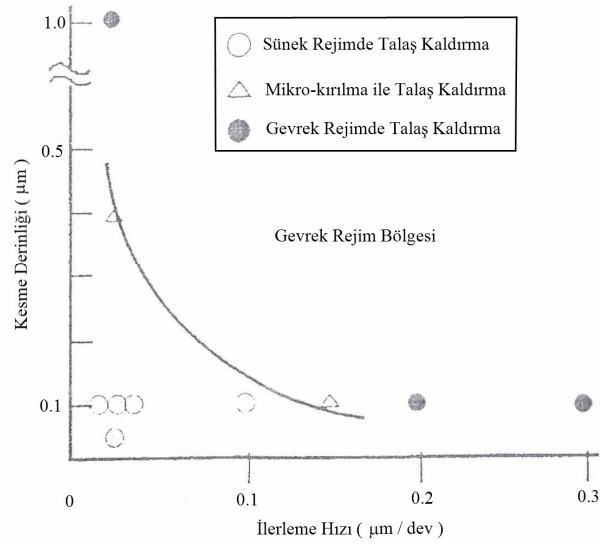
Kırılma başlangıcı için kritik nüfuz derinliği d_{cc} şu şekilde verilebilir;

$$d_{cc} = c.(K_c/H)^2.(\mu/H) \quad (2.23)$$

burada K_c ; kırılma tokluğu, H ; sertlik, μ ; elastisite modülü ve c takım geometrisine bağlı bir katsayıdır. Enerji dengesi kavramına göre, kırılma bozulması, etkin kesme derinliğinde

başlayacak ve bir y_c ortalama derinliğinde devam edecektir. Eğer bozulma, talaş kaldırma yüzeyi düzleminden aşağı inmezse, sünek rejim şartları sağlanır.

Gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenebilirliğini etkileyen bir diğer faktör de ilerleme hızıdır. Şekil 2.15’de görüldüğü üzere, ilerleme hızı arttıkça gevrek malzemenin sünek rejimde işlenmesi için gerekli kritik nüfuz derinliği azalmaktadır.

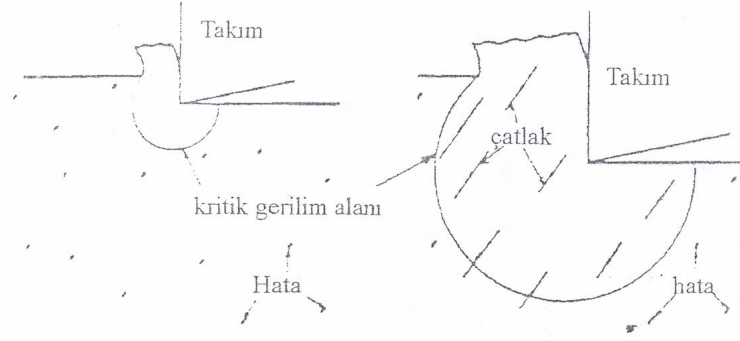


Şekil 2.15 İlerleme hızının sünek rejimde işleme için kritik nüfuz derinliğine etkisi [6]

Denklem (2.23)’den de anlaşılacağı üzere gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi için bir diğer faktör de takım geometrisidir. Gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi için, yeteri kadar küçük talaş kaldırma derinliklerinde, -30° ’den -45° ’ye kadar negatif talaş açıları kullanılmaktadır. J. A. Patten’in ve Wei Gao’nun yaptıkları deneylerde -85° ’ye kadar talaş açılarının da olumlu sonuçlar verdiği görülmektedir. Ayrıca takım ve uç yarıçapı da mikro-çatlakların oluşumu ve gevrek kırılmaların gözlenmesi için önem arz etmektedir. Uç yarıçapı arttıkça gevrek kırılmaların oluşumu artmaktadır.

Sünek-gevrek geçişimini konu alan bir başka yaklaşım ise kafes hatalarına bağlı yarıma kırılmasıdır. Yorulma ve plastik deformasyon için kritik değerler, hataların / dislokasyonların malzeme içindeki yoğunluğu ile ilişkilidir. Dislokasyon yoğunluğu, kısmi dislokasyon çizgileri arasındaki ortalama aralıklar olarak tanımlanabilir. Metallerdeki kenar dislokasyonları aralığı

yaklaşık $1 \mu m$, tek kristal silisyum da yaklaşık $1 cm$ 'dir. Gevrek malzemelerde hataların yoğunluğunun çok büyük olmaması sebebiyle, kırılmanın kritik değeri gerinim alanının büyüklüğüne bağlıdır. Şekil 2.16'da boyut etkisine bağlı talaş kaldırma modeli görülmektedir. Kesme derinliği küçük olduğunda, kritik gerinim alanı yarılmayı önleyecek kadar küçüktür. Sonuçta, gevrek malzemelerin işlenmesinde gevrek rejimden sünek rejime geçiş kesme derinliğine bağlıdır ve kritik kesme derinliği de ilerleme ile ters orantılıdır, ilerleme arttıkça d_{cc} azalır.



Şekil 2.16 Boyut etkisine bağlı talaş kaldırma modeli [6]

2.2.2 Nano Ölçekte Talaş Kaldırmada Kesici Takım Malzemesi Özellikleri

Yüksek hız çeliği gibi alışılmış metal malzemelerden yapılmış talaş kaldırma takımları ve aşındırıcı taşlama taşları kesici ucun çabuk ve aşırı aşınması sebebiyle, nano ölçekte talaşlı işleme için uygun değildirler. Nano ölçekte ve yüksek hassasiyette talaş kaldırma sistemlerinde kesici takım, mikronaltı/nanometre bölgesinde işleme operasyonlarında, uzun işleme boylu çalışmalarda yüksek kararlılık göstermelidir. Elmas malzemeli kesici takımlar Al, Cu gibi sünek malzemelerin tornalanmasında ve Ge, cam gibi gevrek malzemelerin taşlanmasında başarıyla kullanılmaktadırlar. Gevrek malzemelerin tek kesen ağızlı kesici takım ile nano ölçekte talaş kaldırmada olumlu sonuçlar alınmaktadır [6].

Genellikle yapılan araştırmalar neticesinde, demir dışı malzemelerden talaş kaldırılmasında tek kristalli elmas takımlar tercih edilmektedir. Bundan başka, demir esaslı malzemelerin talaşlı işlenmesinde ise polikristalin elmas, kübik bor nitrür (CBN) ve tungsten karbür takımlarda kullanılmaktadır [45].

Nano ölçekte talaş kaldırma operasyonlarında, malzemenin, uygun takım ve işleme yöntemiyle işlenmesi yüzey hassasiyeti, yüzey altı deformasyonları, takım ömrü, işleme zamanı gibi maliyeti etkileyen hataların önlenmesi yönünden önemlidir. Gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi talaş kalınlığını kritik bir değerin altında muhafaza ederek rijit bağlama düzenekleriyle bağlanmış özel takımlar kullanarak sağlanır. Gevrek malzemelerin elmas kesici takım kullanılarak sünek rejimde işlenmesiyle 50 nm veya daha küçük yüzey altı deformasyonları ile optik ve seramik parçaların verimli şekilde imalatları mümkündür. Bu tür işleme, parçaların performanslarını ve dayanımlarını fark edilir derecede artırır ve sonradan parlatma ihtiyacını minimize eder veya ortadan kaldırır. Ayrıca, malzemedeki ve tane sınırları içindeki yabancı maddeler ve homojensizlik, yüzey bitirmede kötü bir sonuç veren, kesici takımın küçük titreşimlerine neden olurlar. Bu yüzden, yüksek hassasiyette işleme için, bu karakteristikler göz önüne alınmalıdır [6].

2.2.3 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşlemleri İçin Tezgah Özellikleri

Yüksek hassasiyet ve pozisyon doğruluğu isteyen nano ölçekte talaş kaldırma operasyonlarında kullanılacak tezgahlar için şu özellikler aranır:

- Yüksek hassasiyette, titreşimden arınmış, rijit bir yapı,
- Rijit iş parçası bağlama düzeneği,
- Yüksek çözünürlükte hareket kontrolü,
- Isıl kararlılık,
- Geri-besleme kontrol,
- Tezgahla bütünleşik fakat işleme sırasında tezgahtan gelecek etkilere karşı izole edilmiş yüksek hassasiyette bir ölçme sistemi,
- Sıcaklık, titreşim, rutubet ve toz kontrolü sağlayan çevresel kontrol üniteleri.

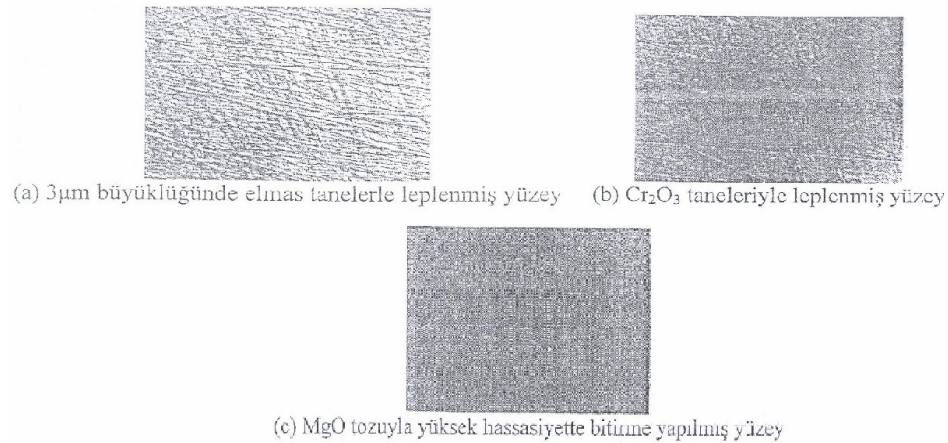
2.3 Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar

Nano ölçekte yapılan çalışmalar, temel olarak yüksek hassasiyette talaş kaldırma çalışmalarıdır. Henüz literatürde mikro ve nano ölçekte işlemlerin kesin bir sınırı olmaması sebebiyle, Corbett v.d. yaptıkları tanımlamaya dayanarak, elde edilen son ürünün (yüzey pürüzlülüğü, vs.) ya da proses parametrelerinin (kesme derinliği, ilerleme, vs.) nano ölçekte olması durumunda da çalışma nano ölçekte talaş kaldırma olarak değerlendirilmiştir.

Okamura v.d. yapmış olduğu çalışmalarda, çok ince bitirme işlemlerinin mekanizmaları üzerinde durulmuş ve tek kristal yapılı safir malzemenin çok ince parlatılmasında kristalografik mükemmelliğe sahip $10^{\circ}A R_z$ pürüzlülükte yüzeyler elde edilmiştir. Okamura v.d. göre, malzeme kaldırma miktarı/hızı parlatma sıvısındaki partiküllerin malzemesine, büyüklüğüne, sıvı içindeki yoğunluğuna, uygulanan yüke, partiküllerin dağılımına ve bitirme yapılacak yüzeyin kristal yapısına bağlıdır. Şekil 2.17’de Okamura v.d. elde etmiş olduğu yüzeyler görülebilir.

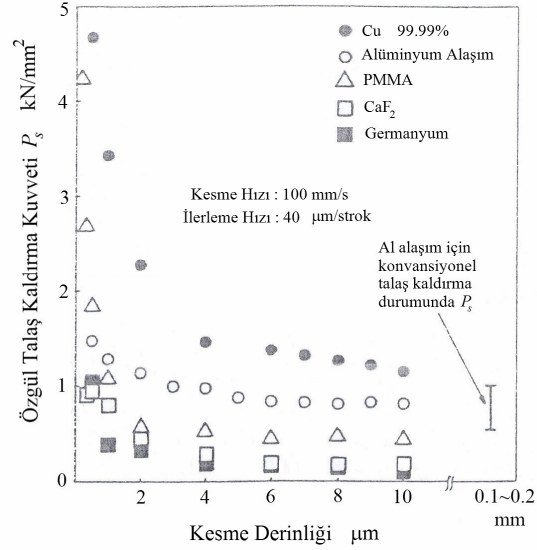
Furukawa ve Moronuki’nin yapmış olduğu çalışmalarda, alüminyum alaşım, bakır, çok kristal yapılı germanyum, fluorit (CaF_2), amorf yapılı akrilik reçine (PMMA) malzemelerinde yüksek hassasiyette talaş kaldırma deneyleri yapılmıştır. Şekil 2.18’de görüldüğü üzere kesme derinliği azaldıkça (özellikle bakır için), özgül kesme kuvveti P_s şiddetli bir biçimde artmaktadır.

Moriwaki v.d. yaptığı deneylerde, elmas kesici takımla yüksek hassasiyette tormalama işlemi için sıcaklık artışı ve kesici takımın ısıl deformasyonu hem deneysel, hem de sonlu elemanlar yöntemi ile (FEM) incelenmiştir. Moriwaki v.d.’ye göre alüminyum malzemenin alın tormalanmasında FEM ile elde edilen veriler, deneysel verilerle uyumludur. Sıcaklık artışının ve işleme hatalarının gelişimi, takımın ilerleme yönüne bağlıdır. Takım malzemenin dış çevresinden merkezine doğru hareket etmeye başladığında, talaş kaldırma başlangıcından hemen sonra sıcaklık maksimum seviyeye ulaşır ve aşamalı olarak azalır. Takım ters yönde hareket ettiği zaman, sıcaklık aşamalı olarak talaş kaldırmanın sonuna kadar artar. Ayrıca, takım aşındığında sıcaklık artışı ve işleme hatası da artmaktadır.

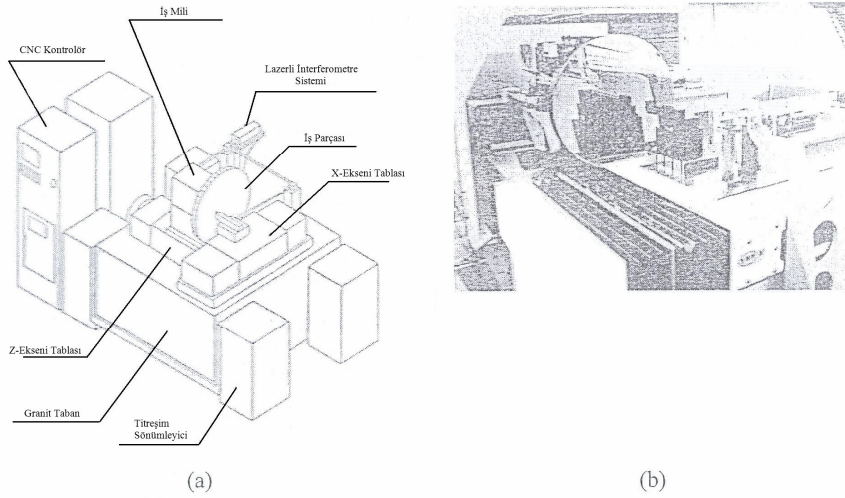


Şekil 2.17 Mn-Zn ferrit tek kristal malzemenin yüzeyinin optik mikrografileri [6]

Ueda v.d. yapmış olduğu deneylerde, 2.5 nm çözünürlükte bir yüksek hassasiyette CNC tezgah kullanılmıştır ve elmas takımla tornalama ve hassas talaş kaldırma yapılmıştır. Elmas takımla tornalamada, eğrisel bir yüzey işlerken 3 nm R_a yüzey pürüzlülüğü elde edilmiştir. İnce taneli bir taşlama tekeri kullanılarak 0.6 nm R_a yüzey pürüzlülüğü elde edilecek şekilde işlenmiştir. Şekil 2.19’da Ueda v.d. kullanmış oldukları yüksek hassasiyette CNC tezgahının şeması ve 600 mm çaplı konkav küresel alüminyum test parçasının işlenmesinin resimleri görülmektedir.



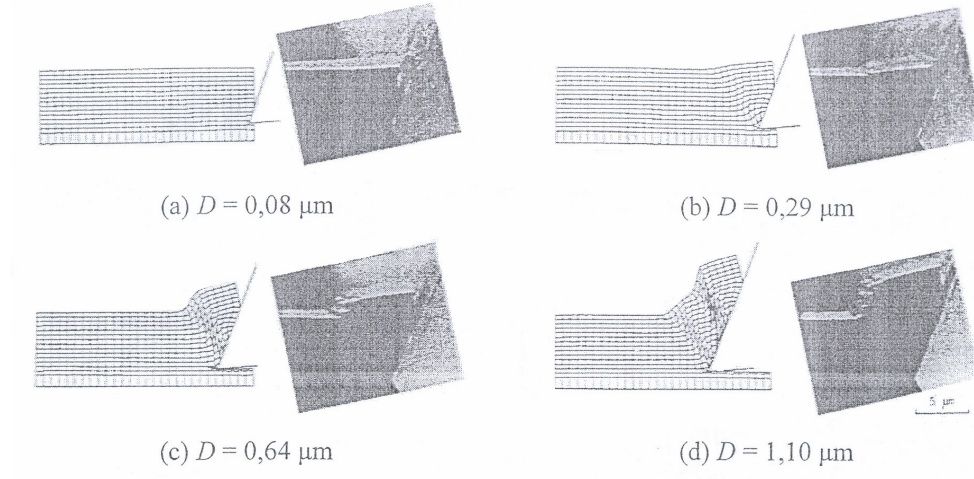
Şekil 2.18 UPM ile özgül talaş kaldırma kuvvetinin kesme derinliğine göre değişimi [6]



Şekil 2.19 Ueda v.d. kullandıkları UPM (a) tezgah şeması, (b) 600 mm çaplı konkav küresel alüminyum test parçasının işlenmesi [6]

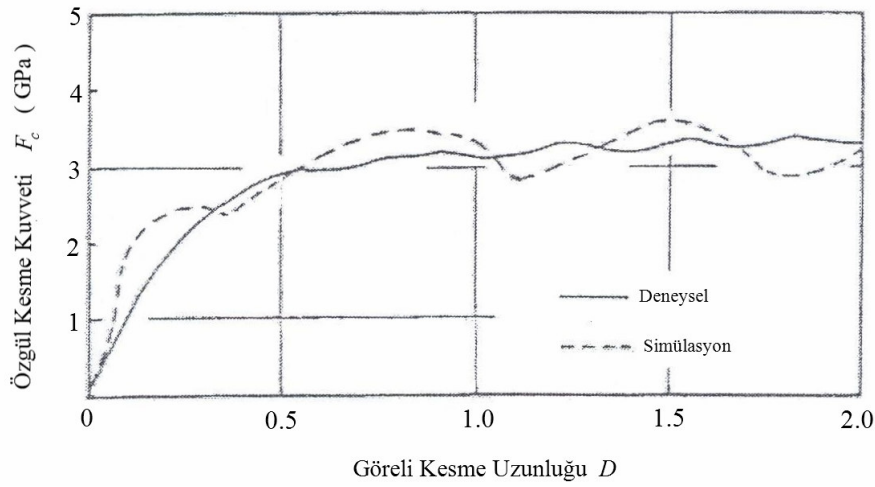
Moriwaki ve Shamoto'nun yaptığı çalışmalarda, paslanmaz çelik malzemenin ultrasonik titreşim uygulanarak yüksek hassasiyette işlenmesi çalışmalarda, $0,026 \mu m R_{max}$ yüzey pürüzlülüğünde ayna yüzeyleri elde edilebilmektedir.

Ueda ve Maneba'nin yaptığı deneylerde, amorf metallerin mikro talaş kaldırılmasında talaş oluşumu mekanizmaları incelenmiştir. Bunun için deneysel çalışmalar ve sonlu elemanlar yöntemi ile bilgisayar ortamında analiz yapılmıştır. Insitu SEM gözleminde görülmektedir ki, demir (Fe) temelli amorf metaller tipik lamelli yapıda talaş oluşturmaktadır. Ueda'ya göre bunun sebebi görece periyodik olarak homojen plastik deformasyon oluşumu ve bölgesel kayma bandının tekrarlayan oluşumudur. Bölgesel kayma bandı $0,03 \mu m$ 'den daha küçük kalınlıklarda oldukça dar bir aralıkta ortaya çıkmaktadır. Belirli talaş kaldırma koşullarında, kesme derinliğiyle doğru orantılı olarak lameller arasındaki boşluk artmaktadır. Amorf metallerde talaş oluşumu kesme derinliğinde boyut etkisine bağlı olmadan ortaya çıkmaktadır. Bu durum, amorf metallerin homojen yapılarından başka hata içermemesine bağlanmaktadır. Şekil 2.20'de Ueda v.d. yapmış olduğu çalışmalarda elde edilen talaş oluşumunun deneysel ve FEM analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları ve Şekil 2.21'de D görel talaş kaldırma uzunluğuna bağlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması grafiği görülmektedir.



Şekil 2.20 Talaş oluşumunun deneysel ve FEM analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları $D = (\text{talaş uzunluğu} / \text{kesme derinliği}) [6]$

Lucca v.d. yaptıkları deneylerde, Te-Cu alaşım malzemesinin elmas malzemeli tek kesen ağızlı döner kesici takımla yüksek hassasiyette talaş kaldırma işlemi yapılmış ve takım geometrisinin talaş kaldırma kuvvetlerine etkisi incelenmiştir. Takım kesici kenar geometrisinin belirlenmesi için AFM kullanılmıştır. $20 \mu m - 10 nm$ kesme derinlikleri arasında yapılan deneylerde gerek nominal talaş açısının gerekse de takım kesen ağız profilinin talaş kaldırma işleminde kesme kuvvetlerine ve enerji kaybına önemli etkilerinin olduğu belirlenmiştir. Kesme derinliği takım kesici kenar profiline göre büyük kaldığında, kesme kuvvetleri nominal talaş açısına bağlı olarak değişmektedir.

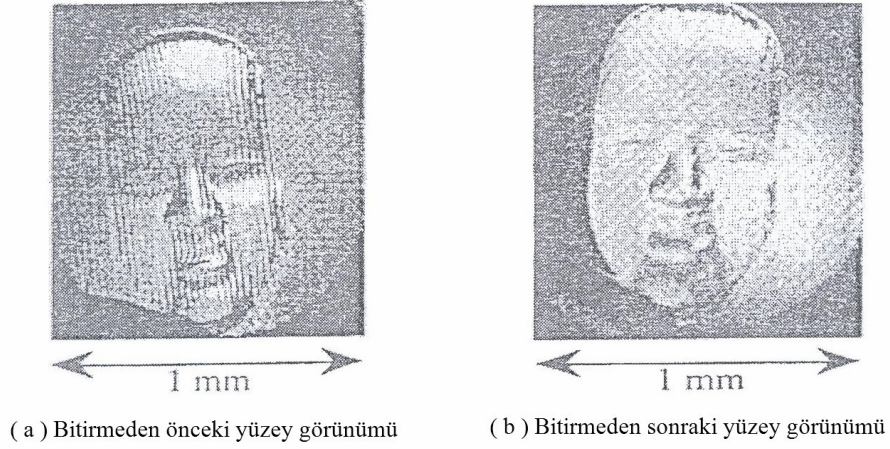


Şekil 2.21 Görelî kesme uzunluğuna bağımlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması [6]

Donaldson v.d. yaptıkları deneylerde, $0,01 - 10 \mu m$ kesme derinliğinde Cu malzemenin yüksek hassasiyette ortogonal işlenmesi sonucu oluşan yüzeydeki plastik deformasyona uğramış katmanının kalınlığı incelenmiştir. Te-Cu alaşım ve ince taneli Cu malzeme, aynı nominal geometriye sahip fakat farklı kesici kenar geometrilerine sahip takımlarla işlenmiştir. Birkaç mikrometrenin altındaki kesme derinliklerinde, iki takımın kuvvet karakteristiği birbirinden farklı olmaktadır, fakat bu durum plastik deformasyona uğramış katmanın kalınlığında görülmemektedir. Buna ek olarak, plastik katmanın derinliği kesme derinliğiyle ilişkili görülmemektedir. Ölçülen derinliklerin büyüklükleri literatürde verilenlerle uyum içinde görülmektedir.

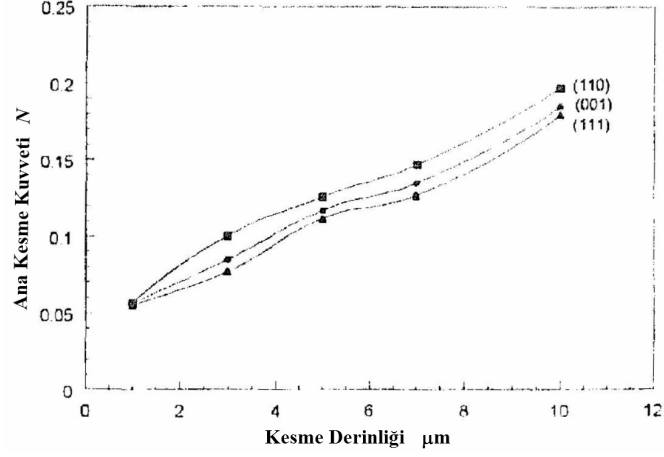
Sata ve Takeuchi'nin yaptıkları deneylerde, camın üç (3D) boyutlu olarak yüksek hassasiyette işlenmesi incelenmiştir. Sata ve Takeuchi'ye göre, sünek rejimde işleme ile yüzeydeki çatlak

oluşumundan arınmak mümkündür. Şekil 2.22'de Sata ve Takeuchi'nin çalışmalarında elde edilmiş bitirmeden önceki ve sonraki yüzey görünümü resmi görülmektedir [6].

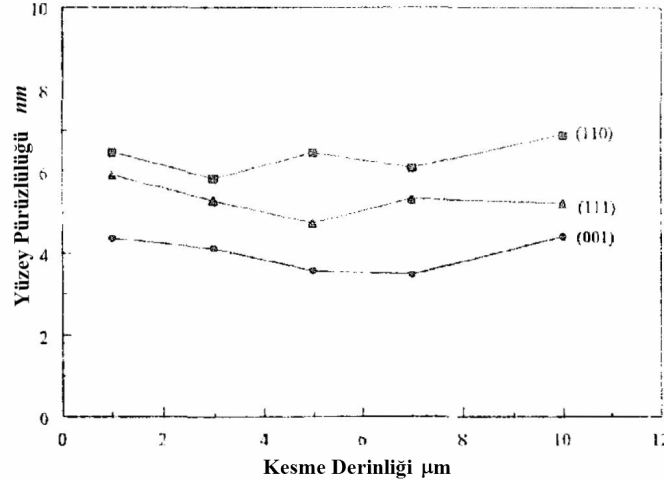


Şekil 2.22 Cam iş parçasında çatlak oluşumsuz bitirme işlemiyle elde edilen yüzey [6]

To v.d. yaptığı çalışmada, $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ kristolografik yapılarındaki üç farklı alüminyum malzemenin elmas kesici takımla yüksek hassasiyette tormalanmasını incelemiştir. İşlemden önce kristolografik anizotropinin talaş oluşum mekanizması, kesme kuvvetleri ve yüzey mikrotopografisi üzerine etkileri araştırılmıştır. Bu tormalama işleminde kullanılan elmas takımın kesici kenar yarıçapı $0,635 \text{ mm}$, talaş açısı 0° ve boşluk açısı 5° 'dir. Bütün kesme işlemleri 8000 rpm 'lik devir hızında gerçekleştirildi. Kesme derinliği değeri $1 \mu\text{m}$ ile $10 \mu\text{m}$ arasında alınmıştır. İşlem sonucunda oluşan talaş kalınlığı deforme olmamış talaş kalınlığından daha küçüktür, ancak talaş kalınlıkları arasında büyük farklılıklar oluştu. Kesme derinliği $1 \mu\text{m}$ iken, deforme olmuş talaş kalınlığı $0,6 \mu\text{m}$ ile $1,7 \mu\text{m}$ arasında değişim gösterirken, kesme derinliği $5 \mu\text{m}$ olduğunda bu aralık daha da küçüktür. Aynı zamanda bu araştırmaya göre, ana kesme kuvveti, kesme derinliği arttıkça artmaktadır ancak sadece ilerleme hızının değiştirilmesinden etkilenmemektedir. Farklı kristalografik yapıdaki alüminyum malzemede meydana gelen kesme kuvvetleri Şekil 2.23'de görülmektedir. Ancak talaş kaldırılan yüzeyin pürüzlülük değeri, ilerleme hızı kritik değerinin altında ise önemli derecede artmaktadır. Bununla ilgili grafik ise Şekil 2.24'de verilmiştir. To v.d. göre, elmas kesici takımla yüksek hassasiyette tormalama ile elde edilen yüzey pürüzlülüğü, talaş kaldırılan yüzeyin pürüzlülüğünden etkilenmektedir [59].

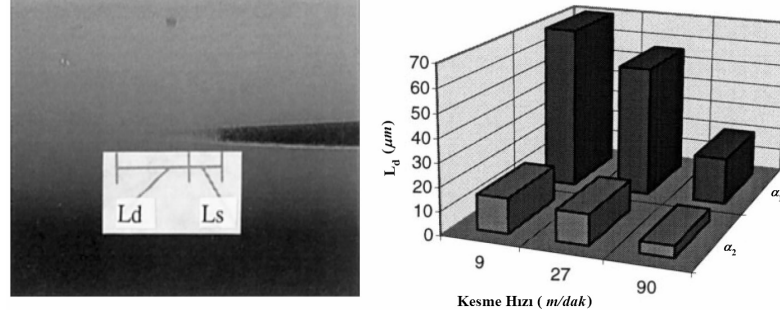


Şekil 2.23 Üç farklı alüminyum kristalinde kesme derinliğinin ana kesme kuvveti üzerindeki etkisi [59]

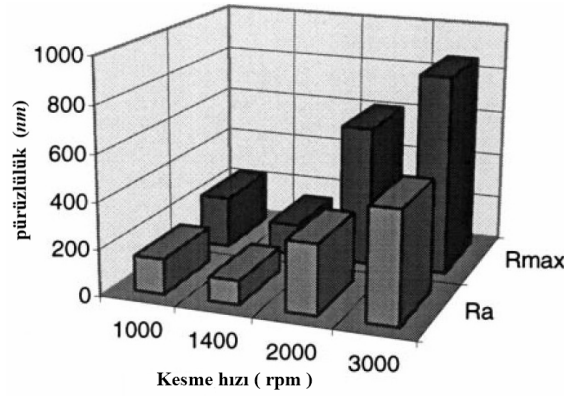


Şekil 2.24 Üç farklı alüminyum kristalinde kesme derinliğinin yüzey pürüzlülüğü üzerindeki etkisi [59]

Fang'ın yapmış olduğu çalışmada, tek kristal silisyum malzemenin yüksek hassasiyette tornalanması incelenmiştir. Fang'a göre, keskin kesici kenarlı takım kullanıldığında, mikroçatlaklar görülmeyecek kadar küçülmektedir. Şekil 2.25'de dalma kesmesi sonucunda oluşan oluk bölgesi (L_d : sünek bölge, L_s : yarı-sünek bölge) görülmektedir. Aynı şekilde bu L_d değerinin kesme hızı ve talaş açısına göre değişimi verilmektedir. Ayrıca, talaş açısı azaldıkça, yüzey-altı deformasyon kalınlığı artmaktadır. Yine, görülmektedir ki, uç yarıçapı arttıkça, yüzey pürüzlülüğü de artmaktadır. Aynı zamanda bu çalışmada, sünek malzemelerde elde edilen 1 nm yüzey pürüzlülüğü eşik değeri, silisyum gibi gevrek bir malzemede elde edilmiştir [17].



Şekil 2.25 L_d ; uzama bölgesinin kesme hızı ve talaş açısına göre değişimi, $\alpha_1 = 0^\circ$ ve $\alpha_2 = -25^\circ$ [17]



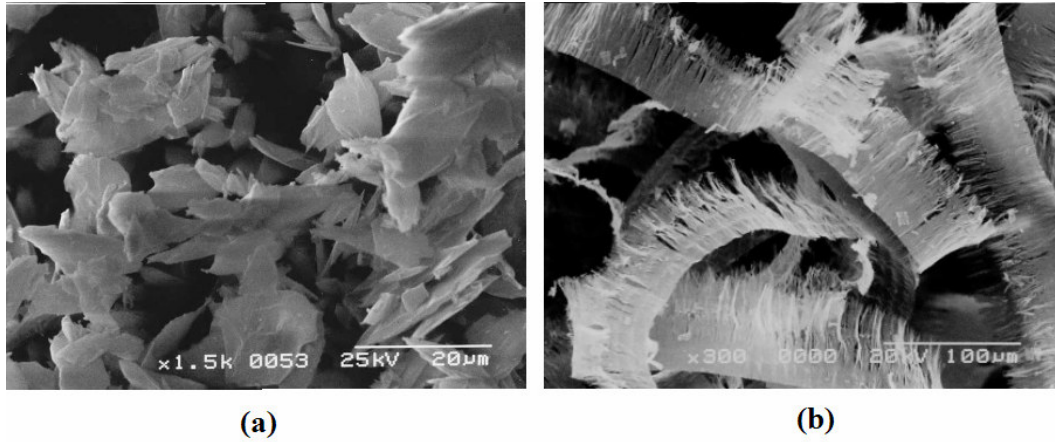
Şekil 2.26 Uç yarıçapı ve kesme hızına bağlı olarak pürüzlülüğün değişimi [17]

Hocken v.d. yaptığı deneylerde, germanyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırmasında takım geometrisinin oluşan kesme kuvvetlerine etkisi incelenmiştir. Görülmektedir ki, takım talaş açısının oluşan kuvvet sisteminde ve elde edilen yüzeye önemli ölçüde etkisi vardır. Talaş açısı azaldıkça, kesme kuvvetlerinde azalma gözlenmektedir.

Hocken, Wei Gao v.d. yaptığı nano ölçekte talaş kaldırma tezgahında, gevrek iş parçasının eğimli olması durumunda nanometrik kesme derinliklerinde yeterli hassasiyet elde edilmiştir. Geliştirilen geri besleme kontrol mekanizması sayesinde, kapasitans probuna bağlı olarak, talaş kaldırma hareketinin kesinliği nanometrik seviyede elde edilebilmektedir. Ayrıca, tek kristal silisyum malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılması deneylerinde görülmektedir ki, sünek-gevrek geçişim konusu için gerekli olan, kuvvet ve kesme derinliği verilerinin hassas ölçümü yapılabilmektedir. Şekil 2.3'de yapılan tezgahın bir şeması görülebilir.

Yan v.d. yaptığı çalışmada, gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi için düz uçlu elmas kesici takım kullanarak yeni bir yöntem önermektedir. Küçük talaş açıları kullanarak, deforme olmuş talaş kalınlığı nanometrik seviyede tutulmuş ve aynı zamanda düzgün gerinim şartları elde edilmiştir. Kristal oryantasyonunun ve talaş açısının tek kristal silisyumun kritik talaş kalınlığı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Talaşlar ve işlenmiş yüzeyler incelenmiş ve sünek-gevrek geçişim olgusu gerinim hali geçişimi yönünden incelenmiştir. Sünek rejimde işleme birkaç on-mikrometre / devir gibi büyük ilerlemelerde elde edilmiştir. Tek kristal silisyumda ayna gibi yüzeyler elde edilmiştir ve sürekli talaş oluşumu gözlenmiştir. Şekil 2.27’de Yan v.d. sünek rejimde işleme sonucu elde ettikleri sürekli talaş oluşumunun görüntüsü görülebilir [64].

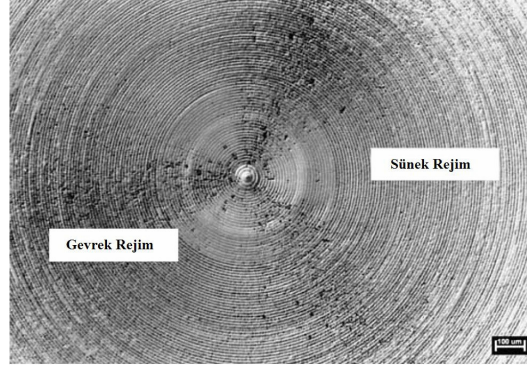
Chao v.d. yaptığı çalışmada, tek kristal silisyumun tek kesen ağızlı elmas takımla sünek rejimde tornalanması incelenmiştir. Görülmektedir ki, yuvarlak uçlu bir takım kullanıldığında kritik kesme derinliği (d_{cc}) Si (100) için kırılmanın kolay olduğu kesme yönlerinde $0,2 \mu m < d_{cc} < 0,9 \mu m$, diğer yönlerde $d_{cc} \sim 1 \mu m$, Si (111) için kırılmanın kolay olduğu kesme yönlerinde $0,25 \mu m < d_{cc} < 0,6 \mu m$ ve diğer yönlerde $d_{cc} \sim 0,9 \mu m$ elde edilmektedir.



Şekil 2.27 UPM ile elde edilen talaşların SEM görüntüleri (a) Gevrek rejimde işleme, (b) Sünek rejimde işleme [64]

Cheung’un yaptığı çalışmada, gevrek tek kristal malzemelerin yüksek hassasiyette talaş kaldırılmasında kesme sürtünmesinin yüzey özelliklerine etkisi incelenmiştir. Görülmektedir ki, kristal oryantasyonuna bağlı talaş kaldırma yönü değişiklik gösterdiğinde, yüzey pürüzlülüğü anizotropisi oluşmaktadır. Ayrıca vurgulanmaktadır ki, kesme sürtünmesinin artmasıyla birlikte ortalama aritmetik yüzey pürüzlülüğü ile yüzey pürüzlülüğü anizotropisi azalır. Cheung’a göre

bunun nedeni, kesme sürtünmesindeki sünek-gevrek geçişim olabilir. Şekil 2.28’de Cheung tarafından elde edilmiş (111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişimi görülebilir [13].

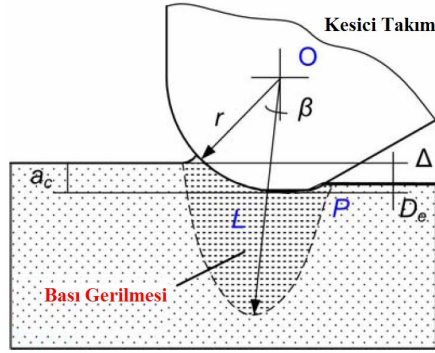


Şekil 2.28 (111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişimi [13]

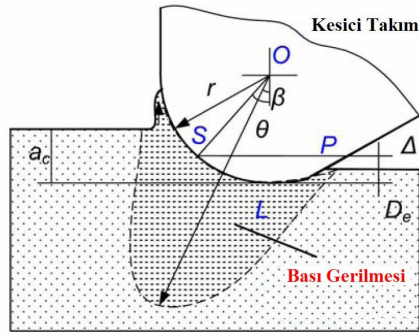
Fang, Liu ve Lee’nin yaptığı derlemede, cam malzemenin yüksek hassasiyette elmas kesici takım ile talaş kaldırılması incelenmiştir. Cam malzemenin sünek rejimde işlenmesi için üç teknik ele alınmıştır: konik kanal açma, dalma ve tek kesen ağızlı takım ile çizme. Atomik boyutta işlemede oluşan kuvvetler sebebiyle takımın çabuk aşınmasını önlemek için, ultrasonik titreşimli talaş kaldırma ve ısı yardımıyla talaş kaldırma teknikleri ele alınmıştır.

Fang ve arkadaşları ekstrüzyon esaslı metal kaldırmayı temel alan bir model oluşturmuşlar ve deneysel olarak kanıtlamak için çalışmışlardır. Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden düşük ise, konvansiyonel kesimden farklı olarak kesme derinliği kesici kenar yarıçapına kıyasla önemli derecede büyük olduğunda, takım kesici ağzının yarıçapının etkisi nanometrik talaş kaldırmada önemsizdir. Bu durumda nominal talaş açısının pozitif, negatif veya 0° olması fark etmeksizin, etkin talaş açısı negatiftir. Bu talaş açısı da takım önünde plastik deformasyon oluşturarak iş parçasında basınç gerilmesi meydana getirir. Deforme olmamış talaş kalınlığının a_c , takım kesen ağzının yarıçapına oranının azalması ile bir S durgun noktası oluşur. Bu oran S noktasının altında ise talaş oluşumu meydana gelmez ama elastik ve plastik deformasyon Şekil 2.29’deki gibi olur. İş malzemesi takımın kesici kenarının en alçak noktasından (L) geçtikten sonra elastik kısım (D_e) geri esner. Plastik bozulma bölgesi (Δ), P noktası arkasında kalıcı deformasyon oluşumuna ve dikey doğrultu ile meydana gelen kuvvet arasında β açısının oluşumuna neden olur ve basınç gerilmesi bu meydana gelen kuvvete bağlı

olarak dağılmıştır. Bu oran malzeme özelliklerine, takım geometrisi ve işleme şartlarına bağlıdır. Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden (S durgun noktasından) yüksek ise, S noktasının altında kalan bölge Şekil 2.30'da görüldüğü gibi elastik ve plastik deformasyona uğrar. İş malzemesi takımın kesici kenarının en alçak noktasından (L) geçtikten sonra, elastik kısım (D_e) geri esner. Plastik bozulma bölgesi (Δ), P noktasının arkasında kalıcı deformasyon oluşumuna yol açar. S noktasının yukarısında kalan malzeme talaş biçiminde iş malzemesinden ayrılır [18].



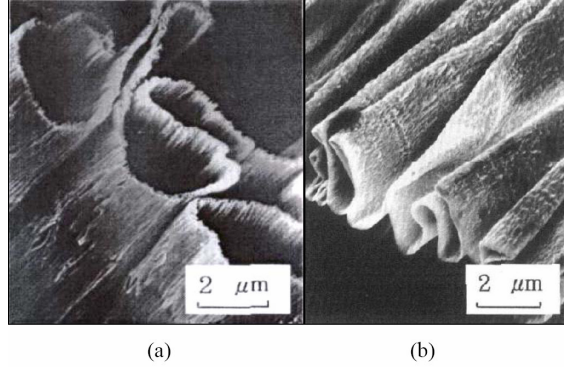
Şekil 2.29 Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden düşük olduğundaki nanometrik işlemin şeması [18]



Şekil 2.30 Deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesen ağzının yarıçapına oranı eşik değerinden yüksek olduğundaki nanometrik işlemin şeması [18]

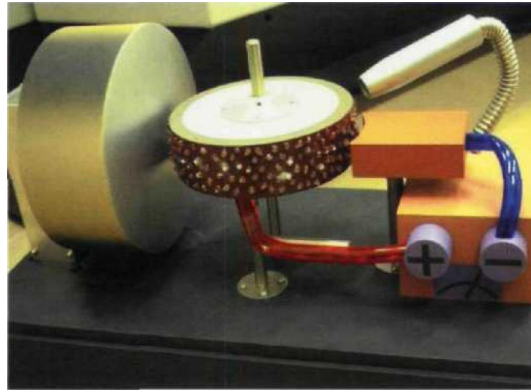
Ikawa v.d. yaptığı çalışmada deforme olmamış talaş kalınlığı azaldıkça iş parçası yüzeyinden oldukça kararlı biçimde ve kesici takımın performansını etkilemeden talaş kaldırıldığını göstermiştir. Şekil 2.31'de 1 nm'lik ve 30 nm'lik deforme olmamış talaş kalınlıklarıyla gerçekleştirilen işleme sonrasında talaş oluşumunun resmi görülmektedir. Eğer takımın kesici

kenarının yarıçapı keskinliğini yeteri kadar iyi korursa yüksek hassasiyette ve tam olarak talaş kaldırma işlemi gerçekleştirilebilir [23].



Şekil 2.31 (a) 1 nm , (b) 30 nm deforme olmamış talaş kalınlıklarıyla gerçekleştirilen işleme yönteminde talaş oluşumlarının resmi [23]

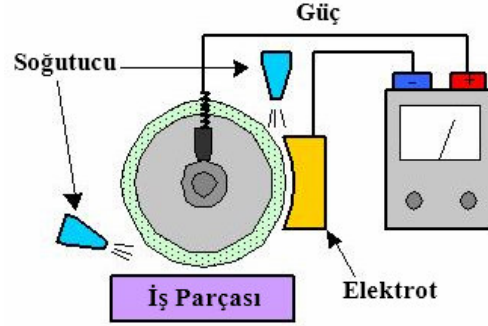
Günümüzde nano ölçekte talaş kaldırma konusunda gerçekleştirilen modern yöntemlerden biri de ELID tekniğidir. Aslında metal parçacık bağlı abrazif takımlara nano-giydirme (nano-dressing) işlemi olarak bilinen ELID teknolojisi, nanometre veya nanometre altı yüzey pürüzlülüğü elde etmek için kullanılan tekniklerden bir tanesidir. Şekil 2.32’de taşlama işleminde uygulanan ELID tekniği gösterilmektedir[26].



Şekil 2.32 Taşlama işleminde uygulanan ELID tekniği [46]

Bilindiği gibi taşlama yüksek yüzey kalitesinin istendiği yerlerde yaygın olarak kullanılan bir tekniktir. Sert ve kırılğan malzemeler süper abrazif taşlama tekerlekleri kullanılarak nano ölçekte işlenebilmektedirler. Ancak, işlem süresinde süper abrazif tekerleğe yüklenme ve perdah

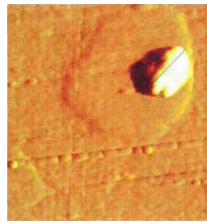
oluşumu nedeniyle zamanla çizik ve yüzey altı hasarları oluşmaktadır. Bu sorunu ortadan kaldırmak için ELID tekniği geliştirilmiştir. Bu sistem Şekil 2.33’de de görüldüğü üzere taşlama tekeri, elektrot, güç uygulayıcı ve elektrolitten oluşmaktadır. Bu sistem kullanılarak zamanla taşlama tekeri yüzeyinde oluşan pürüzlülükler ortadan kaldırılmaktadır [73].



Şekil 2.33 ELID taşlama tekniğinin şeması [73]

Günümüzde kullanılan bir diğer nano ölçekte işlemi ise, özellikle günümüz bilgisayarları için oldukça önemli olan Alüminyum Titanyum Karbür (AlTiC) manyetik başlarının yüksek hassasiyette işlenmesidir. Bu teknik, özel bir plaka veya $0,125 \mu m$ küçüklüğünde elmas bağlandırıclı taşlama taşı vasıtasıyla hafif çarpma etkisiyle manyetik başların yüzey pürüzlülüğünün $0,2 nm$ dolaylarında olmasını sağlar. Şekil 2.34’de sürtünen bileşenlerden biri olan AlTiC manyetik başların yüzeyinde meydana gelen ve sık sık kusur oluşumuna neden olan gömülü elmas tanesinin görüntüsü verilmiştir. Bu işlemin malzeme kaldırma mekanizması tam olarak anlaşılmasına rağmen, hesaplamalar göstermiştir ki, $1nm$ ’nin altındaki kesme derinliklerinde malzeme yüzeyinden moleküler düzeyde talaş kaldırılmaktadır [46].

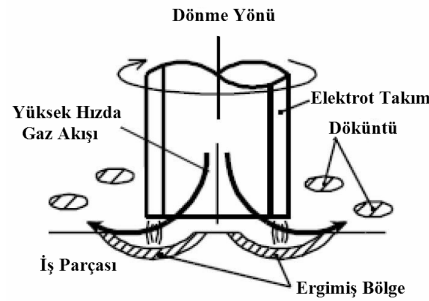
Bu yöntemlerden başka günümüzde geliştirilmeye çalışılan bir diğer yöntem ise Elektrik Deşarj yöntemi (EDM) ile işlemedir. Bu yöntem özellikle mikro veya nano ölçekte parçaların üretimi için oldukça önemlidir [47].



Şekil 2.34 Elmas tane ile gömülü AlTiC yüzeyinin AFM görüntüsü [46]

Bu yöntem, aynı zamanda elektro erozyon talaş kaldırma yöntemi olarak da bilinir. Başka bir adı ise, elektro kıvılcım işleme (Electro-spark) yöntemidir. Kısaca belirtmek gerekirse bu yöntem, bir takım ile bir iş parçası arasındaki kısa ömürlü (sürekli) tekrarlayıcı elektrik kıvılcımları yardımıyla malzemenin ya da talaşın kaldırılması olarak tanımlanabilir. Basit olarak bu yöntemler bir kısmı rasgele bir kıvılcımlanma frekansı ile takım hareketinin düzenli olamayan bir şeklini kullanırlar. Bu durumda böyle bir yöntem imalat amaçlarına nazaran iş parçaları içerisinde kırılmış olan matkap ucu yahut kılavuzların çıkarılması amaçları için kullanılır. Bir üretim ya da imalat yöntemi olarak, kıvılcım deşarjının süresi ve genliği dikkatlice kontrol altında tutulur ve takım, sabit bir deşarj boşluğunu temin etmek ve devam ettirmek amacıyla iş parçası üzerine servo mekanizma yardımıyla hassas bir şekilde ilerletilir. Gerekli olan kıvılcım, doğrudan olarak kontrol edilebilen yüksek frekanslı voltaj darbeleri, çarpmaları meydana getiren dönel bir darbe generatörü vasıtasıyla başlatılır ve kontrol edilir [61].

Bu yöntemde iş parçası malzemesinin sertliği, arka kısımda meydana gelen talaş ve oluşan küçük kuvvetlere etki eden bir faktör değildir. Nano ölçekte kıvılcım deşarjı ile işleme yönteminde oldukça keskin (sivri) ve ince tel elektrot kullanılması önemlidir. Şu an tüp elektrotların kullanıldığı kuru-EDM (Dry EDM) yöntemi halen araştırma aşamasındadır. Bu yöntemde dielektrik akışın olduğu bölgeye gaz gönderilerek işlem gerçekleştirilmektedir [47].



Şekil 2.35 Kuru-EDM işleminin şeması [47]

2.3.1 Elektron Demeti ve Lazer İşleme Yoluyla Nano Ölçekte Talaş Kaldırma

Son zamanlarda elektron yayınının, ışınım transferi ile birlikte kullanılmasıyla nano ölçekte imalatın başarılabilirliği anlaşılmıştır. Bir iş parçasını eşik sıcaklığına dek ısıtmak için bir lazer kullanılabilir ve maddeden ufak bir parça koparmak için de bir nano-prob elektron yayını yoluyla ek enerji transfer edilebilir. Bu varsayımı araştırmak için Basil T. Wong, ayrıntılı bir

sayısal inceleme sunmuştur. Elektron-demeti aktarımı bir Monte Carlo yaklaşımı kullanılarak modellenmiş ve lazerle ısıtma simülasyonu için Fresnel yansımalarını da kapsayan bir ışınım transferi modeli uyarlanmıştır. Sayısal incelemenin gösterdiğine göre altın bir tabakada lokal buharlaşmayı başlatmak için yaklaşık 0.5W 'lık tek bir elektron-demeti yeterlidir. Eğer tabaka yeterince inceyse, bir lazer kullanımıyla gereken güç yarıya indirilebilir.

Nano yapılar genellikle, model üretimi (örn, elektron demeti litografi) ve sonra modelin geliştirilmesi (örn, oyma) şeklinde iki basamaklı işlemlerle imal edilir. Wong v.d, nano-prob alanı salımı ile ışınım aktarımının bağlaşımıyla, tek basamak ya da doğrudan yazma ile nano ölçekte talaş kaldırmanın elde edilebileceği hipotezini kurdular. Bir iş parçasını ısıtmak için odaklanmış elektron demeti yönetiminde daha küçük bir nanoskobik bölgeyi içeren mikroskobik bir bölge dahilinde lazer ışını kullanılabilir. Elektron demeti materyalin çok küçük bir hacmini çıkarmak için yeterli marjinal ısınmayı, süblimleşme ve buharlaşma yoluyla sağlar. Deneysel olarak bu hipotezin araştırılması, elektron demetinde gerekli gücün tahminini gerektirir.

Geleneksel elektron demeti yöntemi, birçok elektron salan elektron tabancasından çıkan elektronları kullanır ve onları işlenecek katı iş parçasına yollar. Bu yöntemin anahtar özelliği, elektronların büyük kinetik enerjilerle kullanılmasıdır. Bu elektronlar, hedef katı örgüsünün içine nüfuz eder ve esnek olmayan çarpışma yoluyla işlenecek parçaya önemli miktarda enerji aktarır. Bu nüfuz ediş ve enerji aktarımı, istenen modelin imali için erime ve buharlaşmaya neden olur.

Güçlü elektronların ve katı materyalin arasındaki etkileşim oldukça karmaşıktır. Hızlandırılmış elektronlar son derece küçük olduğundan, katı iş parçasındaki atomların örgüsüne kolaylıkla nüfuz eder. Güçlü elektronlar, katı iş parçasıyla çarpıştığında ve etkileştiğinde, çeşitli yönlerde dağılırlar. Esnek olmayan bir dağılım, elektronları yeniden yöneltir ve enerjilerini zayıflatırken, esnek bir dağılım, yayılan elektronların yeniden yönlenmesini kapsar. İş parçası dahilinde, elektronların başlangıçtaki enerjisi, elektron dağılım penetrasyon (içe işleme) derinliğini etkiler. Yayılan elektronlar ile katı materyal arasındaki karmaşık etkileşimden dolayı, gerçekçi analitik bir sonuç elde etmek zordur. Bu nedenle bu araştırmada elektron demeti taşınmasını istatistiksel olarak simüle etmek için bir Monte Carlo yöntemi (MCM) kullanılmıştır; iş parçası yüzeyine nüfuz eden büyük bir miktardaki elektron topluluğu, iş parçasının materyal özelliklerine göre izlendi. İş parçasının sıcaklığındaki değişim Fourier ısı iletimi denklemi kullanılarak modellendi.

Whiddington' in çalışması, elektronun nüfuz alanı $R_p(m)$, ile elektron ivme gerilimini $V(Volt)$ ve metalin kütle yoğunluğunu $\rho(kg/m^3)$ ilişkilendirdiğinden önemlidir. İlişki şu şekildedir:

$$R_p = 2.2 \times 10^{-11} V^2 / \rho \quad (2.24)$$

Burada R_p , hedef yüzeye geldiğinde, nüfuz eden elektronların ulaştığı derinlik, yayılan elektronlardan gelen enerjinin yoğunluğunun bu alan dahilinde soğurulduğunu belirtir. Yine de, eğri uyumu daha yüksek bir gerilim alanında yapıldığından, bu anlatım, uygulanan düşük gerilimlerde ($< 20kV$) yanlış olmaktadır.

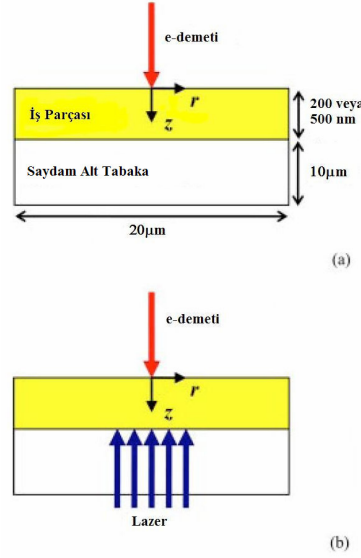
Yüksek ivmeli gerilimlerle, enerjinin yoğunluğu, iş parçası yüzeyinin altında soğurulur; bir $30 - kV$ 'lık elektron demeti, altın yüzeyinin içine yaklaşık, $1\mu m$ nüfuz eder. Sonuç olarak, enerji, nüfuz alanı boyunca soğurulduğundan, en yüksek sıcaklık yüzeyin altında oluşacaktır. Daha makul ivme gerilimleri için, soğurulmuş enerji profili, yüzey yakınında yoğunlaşır, bir $4 - kV$ 'lık elektron demeti, yalnızca $60nm$ (MCM tarafından öngörüldüğü şekilde) nüfuz edebilir, fakat bu, elektron demetiyle yollanabilir toplam enerjiyi sınırlar. Bu sebeple nano ölçekte talaş kaldırma, makul ivme gerilimli bir elektron demetiyle birlikte eşik ışımasını gerektirebilir.

2.3.1.1 Problemin Tanımı ve Varsayımlar

Bu çalışmada, elektron demeti taşımalarını modellemek, iş parçasındaki sıcaklık alanının tahmini, bir iş parçasından atomları etkin olarak uzaklaştıracak elektron demeti gücünü tanımlamak ve nano ölçekte talaş kaldırma işlemini gerçekleştirmektir. Ergime, buharlaşma, süblimleşme sıcaklıkları yakınındaki yerel iş parçası sıcaklıklarını geliştirmek için, her bir zaman birimi başına sağlanan güçlü atomların yeterli sayısı araştırılıyor.

Problemin şematiği Şekil 2.36'da gösterildi. Olası iki senaryo olduğu varsayılmıştır. İlki, ısıtma kaynağı olarak sadece elektron demetinin kullanılması (Şekil 2.36(a)'da gösterildiği gibi); ikincisinde ise yardımcı ısıtma kullanımı olarak, iş parçası ile alt tabaka arasındaki ara yüzde, elektron demeti ısıtmasına ek olarak, lazer hesaba katılmıştır (Şekil 2.36(b)). Şimdiki

arařtırmalar için kullanılan elektron kaynađının çeřidi, hatasız olarak yeterli elektron yollayabildiđi sürece önemsizdir. İř parçasına zorla yüklemeye bulunan, elektron kaynak ve kanallarının olmadıđı varsayılmıřtır. İř parçası boyunca bu řekilde uygulanan ek gerilimler, elektron demetinden nüfuz eden elektronların yayılmasını deđiřtirecektir ve iř parçası dahilinde tek düze olmayan Joule ısıtma sistemine de neden olabilir. Elektron demeti ve lazerin yanında ek ısının temin edilmesini sađlayan Joule ısıtması, nano ölçekte talař kaldırma iřlemine yardım etmek kořuluyla hizmet edebildiđinde, bu ayrıntılar gelecek modellere dahil edilecektir.



Şekil 2.36 Nano ölçekte talař kaldırma iřlemi řemasal olarak ele alındı. Bir iř parçası bir alt tabakanın üstüne yerleřtirilir. Alt tabakanın gelen lazer ışınına saydam olduđu varsayılıyor. İki farklı buharlařma yöntemi hesaba katıldı: (a) elektron demeti, iř parçasının üzerine dikey olarak çarpar ve (b) elektron demeti ve lazer ışını karřıt yönlerden, normal bir řekilde iř parçasına çarpar [63]

Bu çalıřmada, iř parçası olarak, $10 - \mu m$ yarı saydam alt tabakada (kuvars) birikmiř ince altın film sečilmiřtir. İř parçası ve alt tabakanın $10 \mu m$ yarıçap boyutuna sahip olduđu varsayılmıřtır. Altın filmin kalınlıđının $200 nm$ veya $500 nm$ olacađı hesaba katılmıřtır. Alt tabakanın deneylerdeki gerçek kalınlıđı birkaç yüz mikron kalın olabilmekle birlikte, ısı dalgasıyla ilgili olarak, $10 - \mu m$ kuvars "sonsuz kalın" olduđundan, sonuçları etkilemeyecektir ($100 - \mu m$ kuvars hesaba katılmadan). Kuvarsın ışıdır enerjisi sođurmadıđı varsayılmıř (lazere saydam). Tek bir elektron kaynađının, önceden belirlenmiř bařlangıçtaki kinetik enerjilerle, doğrudan iř parçasının üst yüzeyine, elektron saldıđı düşünölmüřtür. $355 nm$ dalga boylu bir lazer, alt tabakanın altından

iş parçasını ısıtmak için seçilir. $355nm$ 'den öte dalga boyları için, altın önemli derecede ışınımı yansıtırken, lazer dalga boyu, ışınımın yansımalarını minimize etmek için seçilir.

Koordinat çerçevesinin başlangıcı, elektron bombardımanının olduğu yerdedir. Elektron demeti ve lazer çarpması çoğunlukla iş parçası üstünde ve çözüm z yönü boyunca eksen simetrik olacağından, hesaplamalar için silindirik koordinat sistemi kullanılır. Amaç, tek bir prob kullanımıyla materyal taşınma, bu yüzden talaş kaldırma işlemi için tek bir elektron demeti kullanılır.

Vakumda, sadece olası iki ısı aktarımı mekanizması, ışınım ve iletimdir. Yüksek sıcaklıklarda iş parçasından ışınım yayılımı kaçınılmazdır ve dikkate alınmayı gerektirir. Bununla birlikte, nano ölçek seviyelerindeki ısı ışınım aktarımı yoğun çalışmalar ve araştırmalar gerektirir ve erimenin dışında nano ölçeklerdeki ve sıcaklıklardaki ışınım özellikleri (örn; yayılım ve emilim) altına (Au) kolaylıkla uygulanamaz. Ayrıca ışınım yayılımı daha çok yüzey alanlarına bağlı, dolayısıyla enerji denkleğinde hiçbir etkiye sahip olamaz. Bu sebeplerle, yayılım (salınım), bu çalışmada göz ardı edilmiştir. Bu andan itibaren, iş parçasının üst kısmı, saydam alt tabakanın altı ve yan duvarların yalıtılmış olarak düşünüldüğü varsayılıyor ve bu çeşit problemler hiç ısı kaybı olmadığından, doğal olarak kararsız durumdadırlar. Hesaba ait bölgeye göre, tüm geometri, silindirlerin ikili katmanıdır. Silindirin yan duvarları yanında hesaplanan sıcaklıklar, oda sıcaklığına eşitse; çözüm, oda sıcaklığında sonsuz yan duvarlarla, fiziksel olarak, paralel düzlem iş parçasına eşittir. Ayrıca, ortadaki kısmın homojen olduğunu, kusursuz ve çatlaksız olduğu da varsayılmıştır. Böyle bir varsayım, orta kısımda kirlilik olduğunda elektron ve foton dağılımı oldukça karmaşıklaşırken, ısı aktarımı analizini basitleştirir.

2.3.1.2 Hesapsal (Hesaplama) Izgarası

Şekil 2.37'de resmedilen hesaplama ızgarası, r radyal yöne denk gelen, m ızgara dizini ile ve z eksensel yöne denk gelen ızgara dizini n ile birlikte silindirik koordinatlarla ifade edildi. Elektron demeti taşıma için Monte Carlo (MC) simülasyonu, $(rxz) = (R_1 \times L_1)$ ve $m = 0$ 'dan $N_{R1} - 1$ ve $n = 0$ 'dan $N_{L1} - 1$ olarak verilen bölge, tek düze ızgarada, gerçekleştirilir. Sınır koşulları elektron demeti ve lazerden uzakta tanımlandığından, tüm hesapsal bölgeyle tekdüze ızgaranın kullanımı, iletim problemi için uygulanamaz olacaktır. Bunun üstesinden gelebilmek

için, başlangıçtan uzaklaştıkça, ızgara aralığını artırırız. Çoğunlukla, lazerin radyal dağılımı, elektron demetinininkinden daha büyük olacaktır, bu sebeple, iletim modellendiğinde, tekdüze ızgara $(R_1 \times L_1)$ 'den $((R_1 + R_2) \times (L_1 + L_2))$ 'e genişletilir.

Genişletilmiş tekdüze ızgara, r ve z yönlerinde genişletici faktörlerle tekdüze olmayan ızgaraya bağlanır. Izgara kurulur, böylelikle, alt tabakanın kalınlığı L_3 ($n = N_{L1} + N_{L2}$ 'den $N_{L1} + N_{L2} + N_{L3} - 1$ 'e) olarak belirtilirken, iş parçasının kalınlığı $L_1 + L_2$ ($n = 0$ 'dan $N_{L1} + N_{L2} - 1$ 'e) olarak belirlendi. Hesaplama için gerekli ızgara noktalarının sayısı, $N_{R1}, N_{R2}, N_{R3}, N_{L1}, N_{L2}$ ve N_{L3} ; R 's, L 's ve r ve z yönleri için, iki bitişik ızgara aralığının oranları (özellikle öncekinden daha çok sonraki) kullanılarak kolayca belirlenebilir.

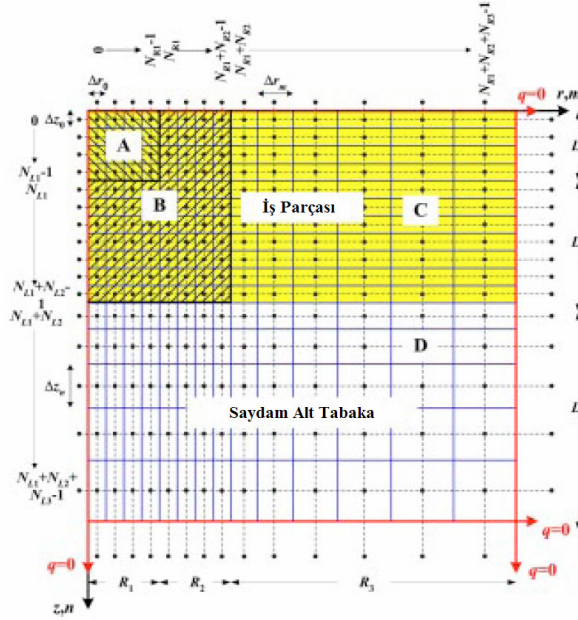
2.3.1.3 Elektron Demeti Taşınması İçin Monte Carlo Yöntemi

Elektron bombardımanı sebebiyle iş parçasında biriken enerjinin dağılımı Monte Carlo yöntemi (MCM) kullanılarak belirlenebilir. Bir iş parçasına nüfuz eden elektronların durumu için, MCM, birikimli olasılık dağılımı fonksiyonunu (CPDFs) temel alarak, elektronların iş parçasının içindeki dağılımını simüle eder. MCM elektron demetine, bütün elektronların eşit enerjiye sahip olduğu, ayrık elektronlar gibi davranır. Her bir elektron, iş parçasının içinde, bir dizi esnek ve esnek olmayan, saçılıma (yayılıma) uğrar.

Monte Carlo Yöntemi (MCM) büyük ölçüde, Işınımsal Taşıma Denkleminin (RTE) sonucu için kullanılır. Yine de, fotonların yayılımı, elektronlarıninkinden daha farklı dağılım ve soğurulma olasılık dağılımı izler.

MCM simülasyonları, grup sayısı, salınım yeri, ilk fırlatma yönü, şeklinde bilginin oluşturulmasıyla başlar. Bir grup, bir deste kuantum parçacığını temsil eder (elektronlar, fotonlar). Her bir grup, gruplar arasında karışmanın olmadığı varsayılarak, diğerinin yayılımının tamamlanmasının ardından fırlatılır. Etkileşim uzaklığı, ortadaki kısım ile etkileşmeden önce yayılabileceği uzaklık, ortadaki kısmın materyal özelliklerine göre çizilir. Böylelikle, grup, başlangıçtaki salınım yönüyle uzaklık boyunca yol alarak, şimdiki pozisyonundan sonrakine hareket eder. Orta kısımdan çıkarsa, yansıma ya da iletme katkısında bulunacak. Diğer türlü,

bundan dolayı, ağırlığı ya da enerjisi değişir ve yeni bir yayılım yönü belirlenir. Yeni bir etkileşim uzaklığının çizilmesiyle, yukarıdaki prosedür tekrarlanır.



Şekil 2.37 Elektron demeti iletimi, lazer yayılımı, iş parçası içinde ısı iletimini modellemek için kullanılan, ızgara kurulumu. İzgara iki alt alana bölünür; (1) r ve z yönünde birlikte, aynı aralıklı A ve B, (2) Izgaranın bağımsız faktörlerle r ve z yönü boyunca genişletildiği, tekdüze aralıklı olmayan C ve D. A; elektron demeti taşımalarının gerçekleştirildiği, MC simülasyonu, B; r ve z yönünde birlikte lazer ışını ışımasını açıklamak için A'ya tekdüze uzar. Sınır koşulları; (a) $r = 0$ 'da simetriden dolayı ısı almaz ve (b) Isı yayım ve ısınım kaybı olmadığından

$$r = R_1 + R_2 + R_3, \quad z = 0 \text{ ve } z = L_1 + L_2 + L_3 \text{ 'de ısı almaz. [63]}$$

Bir MCM simülasyonunu gerçekleştirmek için, dağılma yönü ve nüfuz uzaklığının birikimli olasılık dağılımı fonksiyonunu (CPDF) elde etmemiz, 0'dan 1'e kadar tesadüfi sayıları yerine koyup, yönü ve uzaklığı tesadüfi sayıların bir fonksiyonu olarak elde etmek için, ifadeyi tersine çevirmemiz gerekir. Elektron dağılım yönü, dağılım yoğunluğu ölçüsü olan, dağılım ara kesitinden türetiliyor. Aşağıda verildiği şekilde; dağılım açısını Θ belirlemek için, gizlenmiş Rutherford esnek dağılım ara kesitinden türetilmiş, rastlantı sayısı Ran_{Θ} 'nın; katının atom numarasının Z , elektron enerjisinin E_e bir fonksiyonu olarak, basit ve açık bir ifade var:

$$\cos(\Theta) = 1 - \frac{2\alpha Ran_{\Theta}}{1 + \alpha - Ran_{\Theta}} \quad (2.25)$$

$$\alpha = 3.4 \times 10^{-3} \frac{Z^{0.67}}{E_e} \quad (2.26)$$

Bununla birlikte, 2. denklem, dağılım olayını, birkaç kiloelektronvoltluk (keV), düşük elektron enerjilerinde yanlış temsil eder. Bu sebeple, esnek Mott dağılım ara kesiti, bu uygulama için daha uygun olmaktadır. Türevsel esnek dağılım yatay kesiti ($d\sigma_{el}/d\Omega$), bir kez elde edildiğinde, toplam esnek saçılım yatay kesiti $\sigma_{el,toplam}$, şu şekilde değerlendirilir;

$$\sigma_{el,toplam} = \int_{\Omega=4\pi} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \sin \theta d\theta d\phi \quad (2.27)$$

Dağılım ara kesitinin birikimli olasılık dağılımı fonksiyonu (CPDF) $\sigma_{el,toplam}$ kullanılarak ve azimutal (bir gök cisminin herhangi bir noktası ile güney yönü arasındaki açı) simetri varsayılarak ($d\sigma_{el}/d\Omega$, ϕ 'nin bir fonksiyonu değil) elde edilir;

$$R(\Theta) = \frac{2\pi}{\sigma_{el,toplam}} \int_0^{\Theta} \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (2.28)$$

Ne yazık ki, bu denklem, analitik olarak Θ elde etmek için, tersine çevrilemez. Bu nedenle altın için, Θ 'ın bir fonksiyonu olarak, birikimli olasılık dağılımı fonksiyonunu (CPDF) içeren bir tabloya gereksinim duyulur. Tesadüfi bir sayı oluşturulduğunda, birikimli olasılık dağılımı fonksiyonu (CPDF) ile karşılaştırılır ve doğrusal iç degerbiçim (enterpolasyon) kullanan bir tablodan uygun Θ değeri seçilir. Azimutal simetri varsayıldığından, azimutal açı şu şekilde verilir;

$$\phi = 2\pi R_{an_\phi} \quad (2.29)$$

Dağılımsız, S uzaklığına nüfuz eden elektronun birikimli olasılık dağılımı fonksiyonu (CPDF), şu şekilde verilir;

$$R(S) = \exp(-S/\lambda) \quad (2.30)$$

$$\lambda = \frac{A_a}{N_a \rho \sigma_{el,toplam}} \quad (2.31)$$

λ , atom numarası Z 'ye, atom ağırlığı A_a 'ya, katı hedefin yoğunluğu ρ 'ya ve elektron enerjisine (E_e) bağlı olarak nüfuz eden elektronların esnek ortalama serbest yoludur. Birikimli olasılık dağılımı fonksiyonu (CPDF) tesadüfi sayı Ran_s ile yer değiştirerek etkileşim uzaklığı şu şekilde belirlenir;

$$S = -\lambda \ln(Ran_s) \quad (2.32)$$

Elektron enerjisinin güç yitimini hesaplamak için, her bir birim uzaklık başına azalan enerji miktarını tanımlayan, durdurucu güç'e (dE/dS) gereksinim duyulur. Durdurma gücü için, çok genel bir ifade aşağıda verildiği şekilde;

$$\frac{dE}{dS} = -78,500 \frac{Z}{A_a E_e} \log\left(\frac{1.166(E + 0.85J)}{J}\right) \quad (2.33)$$

Burada J , ortalama iyonlaşma potansiyelidir. Birkaç keV yoluyla ivmelendirilmiş her bir elektronun başlangıçtaki enerjisinin yaklaşık bir yüzdesi $E = 50eV$ olana kadar, Bethe durdurma gücü tipik olarak geçerlidir. İş parçası içindeki elektronlar için, enerji kaybı miktarının belirlenmesinde bu ilişkinin kullanılması, tahmin edilmiş soğurma profilinde, kabul edilebilir düzeyde küçük hatalar çıkmasına neden olmaktadır.

Elektron demetinden soğurulan enerji, ısı iletimi problemini çözümlerken, dahili ısı üretimi olarak modellenir. Monte Carlo simülasyonunun sonuçları, ızgaradaki öğelerde, elektron demetinden soğurulan enerjidir. Enerji, soğurulmuş enerjiyi, öğenin hacmine ve gelen elektron gruplarının toplam enerjisine bölerek, normalleştirilmiş enerji yoğunluğuna $\Psi_{m,n}$ uyarlanır ve matematiksel olarak şu şekilde ifade edilir;

$$\Psi_{m,n} = \frac{\psi_{m,n}}{2\pi r_m \Delta r_m \Delta z_n N_{en} E_0} \quad (2.34)$$

$\psi_{m,n}$, (m, n) öge de birikmiş elektronların toplam kinetik enerjisi; N_{en} , kullanılan elektron gruplarının toplam sayısı (istatistiksel Monte Carlo simülasyonları için, hedef katıdaki elektron olaylarının gerçek sayısı değil); E_0 , elektronların başlangıçtaki enerjisi ve $2\pi r_m \Delta r_m \Delta z_n$ miktarı,

(m,n) öğenin hacmini ifade etmektedir. (m,n), $q_{m,n}^{elek}$ verilen belirli bir öğede, dahili ısı üretimi, aşağıdaki şekilde hesaplanır;

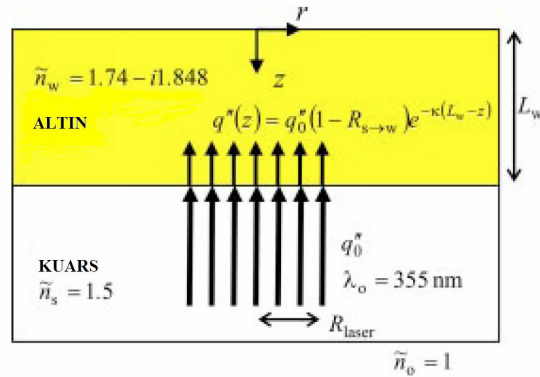
$$q_{m,n}^{elek} = \dot{E} \Psi_{m,n} \quad (2.35)$$

Burada \dot{E} , elektron demetinin girdi gücüdür.

2.3.1.4 Lazer Isıtma Sistemi

Bir paralel konumlu lazer, R_{lazer} spesifik yarıçapıyla iş parçasının ek ısıması için düşünülür (Şekil 2.38). Metal katman soğururken, alt tabakanın lazer ışına saydam olduğu varsayılmıştır (alt tabakada soğurma yok). Bir metaldeki yatay soğurma yatay kesiti, dağılım ara kesitinden daha büyük olduğundan, lazer ısıtma sistemi, etki alanı yönü boyunca tek boyutlu olarak incelenir. Uyumsuz ara yüzlerde (farklı kırılma dizinleri), lazerin önemsiz olduğu yerde, Fresnel yansımaları üzerinde düşünülmelidir. Normal olay durumları için, lazer orta kısımdaki i 'den t 'ye yayıldıkça, ışılan enerjinin yansıyan bölümü, şu şekildedir;

$$R_{i \rightarrow t} = \left(\frac{\tilde{n}_t - \tilde{n}_i}{\tilde{n}_t + \tilde{n}_i} \right) \left(\frac{\tilde{n}_t - \tilde{n}_i}{\tilde{n}_t + \tilde{n}_i} \right)^* \quad (2.36)$$



Şekil 2.38 İş parçası içinde ışınımsal aktarım şeması. Çarpın lazer ışını, R_{lazer} radyal çap ve 355 nm dalga boyundadır. Bir metalde ısıyan enerjinin soğurumu güçlü olduğundan, yayılma yönünde, ışınır enerjinin üssel bozulumuyla, tek boyutlu bir ışınım modeli kullanılır, fotonların saçılımı ihmal edilir. Altının karmaşık kırılma katsayısı, lazer ışınının dalga boyundadır. $R_{s \rightarrow w}$ geliş istikameti kuvarstan altına doğru olduğunda, altın ve kuvars arasındaki ara yüzde yansıtırlık [63]

n_i ve n_t sırasıyla, olayın kırılmasının karışık dizinleri ve iletim ortamlarıdır. Simülasyonda, alt tabakadan geçerek yayılan lazer ışınının, başlangıçtaki ısı değişimi q_0'' önerildi (Şekil 2.38). Lazer altın-kuvars ara yüzeye ilk kez çarptığında, ısı değişiminin bir bölümü, $R_{s \rightarrow w}$ ($= 0.75$) yansır. Lazer altın tabaka içinde yayılırken, soğurma sebebiyle alınan yol uzaklığına bağlı olarak, lazerin enerjisi üssel olarak azalır. Bu sebeple, olayın radyal alanında, z yönündeki derinliğin bir fonksiyonu olarak, radyal ısı değişimi şu şekilde verilir;

$$q''(z) = (1 - R_{s \rightarrow w}) q_0'' e^{-\kappa(L_w - z)} \quad (2.37)$$

Burada κ , iş parçasının soğurma katsayısını ifade eder. Soğurma katsayısı, iş parçasının sanal kırılma indisi kullanılarak, $n_{l,w}$, belirlenir;

$$\kappa = \frac{4\pi n_{l,w}}{\lambda_0} \quad (2.38)$$

λ_0 , vakumdaki lazerin dalga boyudur. Gelen fotonlar bir metaldeki nanometrelerin ilk bir kaç 10'lu grubuyla güçlü şekilde soğurulur. Bir $\lambda_0 = 355nm$ lazer için, altının κ 'sı ($n_{l,w} = 1.848$) yaklaşık $0.0654nm^{-1}$ nüfuz eden fotonların % 95'i altın tabakanın $46nm$ içinde soğurulur. Bu çalışmada ele alınan tabakanın kalınlığı, nüfuz eden fotonların asla iş parçasının diğer yüzeyine ulaşamayacağı kadar büyüktür. Bu nedenle, bir uçtan gelen fotonlarla, diğer uçtan yansıyanlar (eğer varsa) arasında karşılaşma etkisini düşünmeye gerek yok. R_{lazer} dahilinde, iş parçasındaki hesaba ait öge tarafından soğurulan her bir hacim başına radyal enerji miktarını belirlemek için, ışılan ısı değişimi, Δz_n 'e bölünür ve şu şekilde ifade edilir;

$$q_{m,n}^{rad} = \frac{q''(z)}{\Delta z_n} \quad (2.39)$$

$m = 0, 1, \dots, N_{Rlazer} - 1$ ve N_{Rlazer} için, R_{lazer} 'de radyal bir dizin.

2.3.1.5 Isı İletimi

Isı iletimi genelde, elektron ve fotonlarla enerji taşınması olarak ifade edilir. Fotonlar yalıtkanlarda yalnızca ısı taşınımından sorumluyken, elektronlar metallerde yüksek enerji taşıyıcılarıdır. Yarı iletkenlerde, elektronlar da fotonlar da eşit derecede önemlidirler. Fotonlar

her materyalde vardır ve ısı kapasiteleri elektronlarınkinden daha düşük olmakla birlikte, ana elektron saçılma kaynağı gibi davranırlar. Burada yapılan işlemde, elektron demetinden doğan elektronlar ve lazerden gelen fotonlar, hedef iş parçasına nüfuz eder. Bu sebeple, iş parçasının içindeki elektronlara taşınan önemli miktarda enerji ve momentum (impuls), fotonlar soğuk kalırken, elektronların sıcak olmasına sebep oluyor. Bu nüfuz eden elektron ve fotonlar arasında, dağılım süresince, enerjiler iş parçası içinde dağıtılır (ya da taşınır). Sonuç olarak elektronlar ve fotonlar termal dengeye ulaşır.

Enerji taşıyıcıların ortalama serbest yol ve ortalama serbest zamanı, ısı taşınımı analizinde önemlidir. Bir enerji taşıyıcının ortalama serbest yolu; diğer taşıyıcılarla hiçbir çarpışma içermeden aldığı mesafenin ortalama uzaklığı, bir enerji taşıyıcının ortalama serbest zamanı; taşıyıcının serbest olduğu zamanın ortalamasıdır (ortalama serbest yola denk bir uzaklığa nüfuz etmek için gerekli zaman). Fiziksel alanın ölçülerinin, ortalama serbest yolu ve zaman ölçeğini geçişi, ortalama serbest zamandan çoksa, bu durumda ısı taşınımı olgusunun çözümü için, Fourier'in yasası gibi, makroskopik modeller kullanılır. Fiziksel uzunluk ölçekleri, ortalama serbest yolla aynı büyüklük düzenindelerse, yahut, gözlem zamanı ortalama serbest zamanla karşılaştırılabilir ise, bireysel enerji taşıyıcıların yayılımına, özellikle taşıyıcılar arasındaki çarpışma ve dağılımlara önem verilmelidir.

Materyallerdeki elektronların ortalama serbest yolu, genellikle, birkaç nanometreden daha az ve elektronların hızı yaklaşık olarak $10^6 m/s$ 'dir ki, ikisi de elektronların enerjilerine bağlıdır. Bu elektronlar için ortalama serbest yolun yaklaşık femto saniye (1 femto saniye= 10^{-15} saniye) olmasına yol açar. Elektronların tersine fotonların ortalama serbest yolu, sıcaklığa bağlı olarak, nanometreyle mikrometre arasındadır ve fotonlar yaklaşık ses hızında yol aldıklarında, fotonun ortalama serbest zamanı, piko-saniye (bilyonda bir) ile nano-saniye aralığındadır (10^3 ile $10^4 m/s$). Bu çalışmada altın filmin ve kuvars alt tabakanın kalınlığı, sırasıyla, 200 ya da 500nm ve $10\mu m$ 'dir. Elektronlarıyla ilgilenilen metal için, kalınlık, elektron ortalama serbest uzaklığından oldukça uzak, bu sebeple taşıma davranışı uzaysal olarak dağınık benzeridir. Ayrıca bu çalışmada, zaman ölçeğinde elektronların ortalama serbest zamanından daha geniş nano-saniye aralıklı işleme ile ilgilenilmektedir ki, bu sebeple elektronların balistik (atışlı) davranışları önemli değildir. Sonuç olarak altın tabakayla, elektronik ısı iletimi, makroskopik

olmalıdır. Ne yazık ki, fotonların ortalama serbest yolu, makroskopik yaklaşım uygulandıysa, tartışılır sonuçlar üreterek, sıcaklığa bağlı olarak iş parçasının kalınlığıyla karşılaştırılabilir. Bu çalışma bağlamında, alınan sıcaklık aralığı ($300K - 3129K$) genişçe ve daha yüksek sıcaklıklarda, titrecik taşımalarının yayılmaya uygunluğunu ifade eder şekilde titreciklerin ortalama serbest yolu, kolaylıkla birkaç nanometre kadar ya da daha küçük olabilir.

Elektron ve titrecik taşımalarının daha yaygın difüze olabilmesi için, bu uygulamadaki sıcaklıklar şüphesiz yüksek olduğundan ve metallerde ısı akışında, elektronlar büyük rol oynadığından; (elektronlar ve titrecikler farklı sıcaklıklarda olsa da) Fourier yasasının kabul edilir olduğu varsayılmıştır.

Hesapsal alanda her bir öğede (m, n) ısı üretim teriminin elektron enerji birikimi ve radyal enerji soğurumunun toplamını içerecek olması dışında, işlem tamamıyla standart ve tanınmış olduğundan iş parçası ve alt tabakadaki her bir öğe için enerji denkleğinin türetilmesi, burada gösterilmemiştir.

$$q_{m,n} = q_{m,n}^{elek} + q_{m,n}^{rad} \quad (2.40)$$

Denklem sisteminin çözümü ve “ergime” ve “buharlaşıma”nın açıklanması. Tüm hesapsal bölgenin ayrılmasından sonra, lineer denklem sistemi oluşturmak için, düğümsel noktaların her biri için farklılaştırılmış denklemler toplanmış. Matris temsili şu şekilde verilmiştir;

$$BT = \bar{D} \quad (2.41)$$

B , bir $(N_R \times N_L) \times (N_R \times N_L)$ matrisi; \bar{T} , sıcaklık alanı; \bar{D} , bir önceki basamaktaki sıcaklıkları ve çeşitli düğümlerdeki ısı üretimi terimlerini içeren, ayrılımdan bilinir. \bar{T} için nokta ardışık aşırı rahatlatma (SOR), sayısal planını kullanarak, denklemi çözeriz.

“Ergime” ve “buharlaşıma”yı tam olarak açıklamak için, ergimenin ve buharlaşmanın gizli ısısı çözüm planına dahil edilmelidir. Denklem sistemini çözerken, “Ergime” ve “Buharlaşıma”yı açıklanması için uygunca uyarlanabilecek nokta SOR, düğüm sıcaklıkları birbiri ardına çözer. Şu anki çözüm planında, kod, verili herhangi bir zaman basamağında, “ergime” ve “buharlaşıma” sıcaklıklarının ötesinde, herhangi bir düğüm sıcaklığını ortaya çıkarır. Verili herhangi bir zaman

basamağında hesaplanmış, özgül sıcaklığın ötesinde, herhangi bir düğüm sıcaklığı varsa, kod, bu sebeple, iki sıcaklıktan birinde sabitlenmiş düğüm sıcaklığı ile denklem sistemini yeniden çözer. Yeniden çözümlenmiş sıcaklık alanıyla, ısı üretimi terimini q_{gen} , belirlemek için, her bir düğümde enerji denkliği gerçekleştirilir. Hesaplanmış her bir q_{gen} , “ergime” ve “buharlaşma” sıcaklığında, belirli düğüm sıcaklığını sürdürmek için gerekli enerjidir. Bu belirli zaman basamağında, düğümlere enerjilerin hala, elektron demetinden elektronlarla sağlandığına dikkat edilmelidir. Sağlanan enerjinin bir bölümü (hesaplanmış q_{gen}), belirli sıcaklığı sürdürmek için kullanılır, kalanı, buharlaşmanın gizli ısısınıca takip edilen, gizli kaynaşım ısısını alt etmek için, uygun düğümde depolanır.

Bir düğüm yeterli gizli ısıya sahip olduğunda, sıcaklığının sonraki adımda artmasına izin verilir. Depolanmış ısı hiçbir zaman tam olarak, artış zaman aralığından dolayı, belirlenmiş kaynaşımın ve buharlaşmanın gizli ısısına eşit olmaz ve bu sebeple sağlanan enerji sabittir. Onun için, verili bir zaman basamağında, bir öge gizli ısının üstesinden geldiğinde, elektron demetinden artık enerji, gerçekçi olmayan enerji yıkımının önüne geçerek, sonraki basamakta aynı ögeye eklenir.

Sonuç olarak;

(a) Hesaba ait parametreler:

İlke olarak, ısı iletkenlik gibi özgül sıcaklık v.b gibi materyal özellikleri, özellikle, iş parçası boyunca sıcaklık değişiminin geniş olduğu, bu çalışmada, sıcaklık bağımlıdır. Bu özellikler hava basıncına bağlı olarak da değişebilirler. Ne yazık ki ergimenin ötesindeki sıcaklıklarda ve çeşitli hava basınçlarında, teorik ve deneysel olarak kolayca elde edilebilir değillerdir. Bu sebeple çevre koşullarında sabit materyal özellikleri kullanılmıştır. Bu çalışmada seçilen iş parçası altın, oda sıcaklığında ; $19,300 \text{ kg/m}^3$ yoğunluğa (ρ_w); $129 \text{ J/kg} - \text{K}$ özgül ısıya (C_w); $317 \text{ W/m} - \text{K}$ iletkenliğe (k_w) sahiptir. Altının buharlaşma sıcaklığı 3129 K iken; ergime sıcaklığı 1336 K , olarak verilmiştir. 355 nm dalga boyunda, altının karmaşık kırılma indisi, $1.74 - il.848$ olarak verilmiştir. Atom numarası (Z) ve atom ağırlığı (A_a) sırayla 79 ve 196.97 g/mol , ortalama iyonlaşma potansiyeli (J) 0.790 keV . Saydam alt tabaka için, $\rho_s = 2,650 \text{ kg/m}^3$, $C_s = 765.85 \text{ J/kg} - \text{K}$, ve $k_s = 1.77 \text{ W/m} - \text{K}$ değerine sahip olan kuvarsı seçilmiştir. Kuvarsın kırılma indisi tipik 1.5 değeri varsayılmıştır.

Elektron demetinin olay profili, $1/e^2$ yarıçaplı $R_{elektron}$ ile Gaussian dağılımıdır. Bu çalışmada iki ışın demeti profili varsayılmıştır; ilki $R_{elektron} = 50nm$, ile ikincisi, ilkinin iki katı ($R_{elektron} = 100nm$). Elektron demetinden gelen elektronların başlangıçtaki enerjisinin, 4 veya $6keV$ olduğu düşünülmüştür. Tüm sıcaklık dağılımları talaş kaldırma işleminin yaklaşık bir nano saniyesinden (ns) sonra belirlenmiştir.

(b) Hesaba ait zaman basamağı, ızgara aralığı, SOR için dayanıklılık seçimi:

Eğer simülasyonlara çok ince ızgara aralığı uyarlanmışsa, Monte Carlo ve ısı iletimi taşıması simülasyonlarının her ikisinin de yakınsaması için, önemli miktarda hesaplama zamanı gerekmektedir. İki model için de hesaba ait bölge örtüşmek zorunda olduğundan, Monte Carlo simülasyonunda daha ince bir ızgara, iletim problemi için, aşırı inceltmiş bir ızgaraya neden olacaktır.

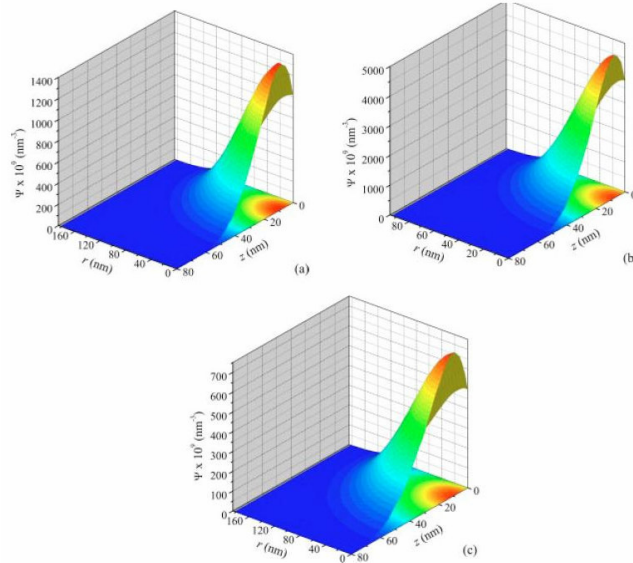
Hesaba ait ızgara gereksinimi, bir dizi başlangıç sayısal deneyinden sonra, belirlenir. Etkin ızgara planının sırayla $m = N_{R1} + N_{R2}$ ve $n = N_{L1} + N_{L2}$ 'den başlayarak, r 'de yüzde 10 artış ve z ızgara aralığında yüzde 5 artış ile $\Delta r = 1.25nm$ ve $\Delta z = 1.25nm$ kullandığı bulunur (Şekil 2.37). Altın tabakanın kalınlığının $200nm$ veya $500nm$, olduğu düşünüldüğünde, tekdüze ızgara ölçüsü $(rxz) = (400nm \times 200nm)$ veya $(400nm \times 500nm)$ olarak alınır. Monte Carlo tahminleri için kabul edilebilir kararlılığı sağlarken, bu değerler hesaba ait zamanı makul tutuyorlar. Hesaba ait değişkenleri sabit tutup, ızgara aralıklarını yarıya indirirken, yaklaşık $1K$ 'lik bir sıcaklık değişimi gözlenir. Çeşitli simüle edilmiş durumlarda Δt seçildi, öyle ki kesin ($0(1K)$ içinde) sıcaklık dağılımları elde edildi. Ayrıca, SOR planı için yakınsak dayanıklılık, sıcaklık dağılımının yakınsamasını, $0(1K)$ içinde garanti edici şekilde, 10^{-6} olarak seçildi. Sonuç olarak, tüm hesaplamalarda sıcaklık alanı için, bütün olarak, yaklaşık $1K$ 'lik belirsizlik beklenmiştir.

(c) Elektron demeti dolayısıyla depolanan normalleştirilmiş enerji yoğunluğu:

Şekil 2.39, altın demeti içinde, seçilmiş iki ışın demeti için Monte Carlo Metodu tarafından belirlenmiş elektron enerjilerini ($R_{elektron} = 50nm$ ve $100nm$) ve elektronların iki başlangıç

kinetik enerjisini ($E_0 = 4keV$ ve $6keV$) gösterir. Her bir alt şekil, beş ayrı Monte Carlo çalışmasının ortalama sonuçlarını gösterir ve her bir çalışma için, pürüzsüz uzaysal dağılımı sağlamak için istatistiksel grupların sayısı yaklaşık 10×10^6 'ydı. Önemli bir gözlem ise, olayın E_0 değerinin düşürülmesiyle; nüfuz etme derinliği düşerken, iş parçası içinde her bir birim hacimde depolanan, elektron enerjisinin doruk miktarının artmasıdır (Şekil 2.39 (a) ve (c)). Yüksek başlangıç enerjili elektronların, iş parçası içinde, her bir birim hacimde, daha fazla depolanması beklenileceğinden, bu biraz karmaşık görünebilir. Enerji iş parçasının içinde depolanmakla birlikte, yüksek başlangıç enerjili elektronlar iş parçasında daha derine nüfuz ettiklerinden daha geniş bir alan üzerinde dağılıyor.

Aynı şekilde gelen elektron demeti şekli geniş olduğunda, elektronlar, yoğunlaşan ışın demeti şeklindeki durumuna göre, daha çok dağılacaktır. Bu daha sonradan, metal içinde daha geniş bir alan üzerinde elektron enerji dağılımının soğurulmasına neden olur, bu sebeple, altın içerisinde her bir birim hacimde depolanan enerjinin, olay ışın demetinin ekseni yanında, Şekil 2.39(a)'da, Şekil 2.39(b)'dekenden daha az olduğu gözlemlenmiştir.



Şekil 2.39 Altın tabaka içinde biriken, normalleştirilmiş elektron enerjisi $\Psi \times 10^9 (nm^{-3})$ (2.34 no'lu eşitlik) sonuçları, elektron demeti taşımada Monte Carlo simülasyonundan elde edilir. Gelen ışın demeti, (a) $R_{elektron} = 100nm$, $1/e^2$ yarıçapı; $E_0 = 4keV$ başlangıç kinetik enerjisi, (b)

$R_{elektron} = 50nm$ ve $E_0 = 4keV$, ve (c) $R_{elektron} = 100nm$ ve $E_0 = 6keV$ ile Gaussian biçimine sahip. [63]

(d) Elektron demetine bağlı sıcaklık dağılımı:

Monte Carlo simülasyonlarından elde edilmiş, normalleştirilmiş enerji yoğunluklarını kullanarak, sıcaklık dağılımları Fourier yasası kullanılarak belirlenmiştir. Yaklaşık bir nano-saniyelik bir dönem boyunca, materyal taşınmayla ilgilenilmiştir ki, bu sebeple, iletim kodu, başlangıçtaki öge buharlaşana kadar çalışır (buharlaşmanın gizli ısısı aşılmış ve $T > T_{evap} = 3129K$). $R_{beam} = 100nm$ ve $E_0 = 4keV$ (Şekil 2.39(a)) olduğu durum için, altın içinde depolanan elektron enerjisinden kaynaklanan sıcaklık dağılımı, Şekil 2.40(a)'da gösterilmiştir. Buharlaşan bölge beyazla gösterilir. Buharlaşmanın oluşması için gerekli zamanın $0.5W$ gücünde elektron demeti için, yaklaşık $t = 0.9ns$ olduğu bulunmuştur. Şimdi istenen veya her birim zaman için gerekli elektron sayısı $4keV$ 'da $0.5W$ 'lık güç için $125\mu A$ veya 7.8×10^{14} elektron/s 'ye eşittir. $10 - \mu m$ saydam alt tabakanın tepesinde $500 - nm$ altın tabaka varsayıldığından, materyal özellikleri ara yüzeyde değiştiğinden, eşsıcaklık eğrisi eğimi, $z = 500nm$ 'de keskindir. Şekillerin, hesaba ait alanın, sadece yüksek sıcaklığın bulunduğu kısmını gösterdikleri dikkate alınmalıdır. Sol üst köşedeki beyaz çerçeveye gösterilen, buharlaşmanın oluştuğu kaynaktaki öge, şekilde çıkarılır.

Şekil 2.39(b)'de verilen Monte Carlo sonuçlarını kullanarak, $R_{elektron} = 50nm$ elektron demeti için, sıcaklık dağılımı hesaplanmış ve Şekil 2.40(b)'de gösterilmiştir. Bu durumda elektron demetinin gücü $0.305W$ idi ve buharlaşma $t = 0.7ns$ 'de başlamış. Elektron demeti daha az güce sahip olduğu halde, elektron demeti daraltıldığında, buharlaşma için gerekli gücün azaltılabilir olduğunu gösterir şekilde, buharlaşma, ilk duruma kıyasla ($R_{elektron} = 100nm$), çabuk oluşuyor. Bu aynı zamanda, elektron demeti daha iyi odaklanmışsa, altın tabakanın sıcaklığının kaynaktaki (başlangıçta) daha hızlı artırılabilceğini ve daha geniş bir işleme alanı isteniyor ise, süreci (işlemi) yavaşlatsa da, daha büyük bir ışın demetinin gücü gerektirse de, daha büyük bir ışın demeti kullanılmalıdır.

Şekil 2.40(c), $0.615W$ girdi gücüyle, $6keV$ gelen elektron demeti için, $t = 1ns$ 'de, altın tabaka içinde sıcaklık dağılımını gösterir. Uygulanan gerilimin artırılmasının, nüfuz derinliğini de arttırdığından, elektron enerjisini daha derin bir menzil üzerinde dağıtmaya eğilimli olacağı açık ve bu doğrultuda ışın demetinden gelen gerekli girdi gücünü yükseltir. Bu Şekil 2.40'da (a) ile (c) arasındaki karşılaştırmada açıkça görülmektedir. İkisi (aynı R_{beam} ile , $6keV$ 'e karşı

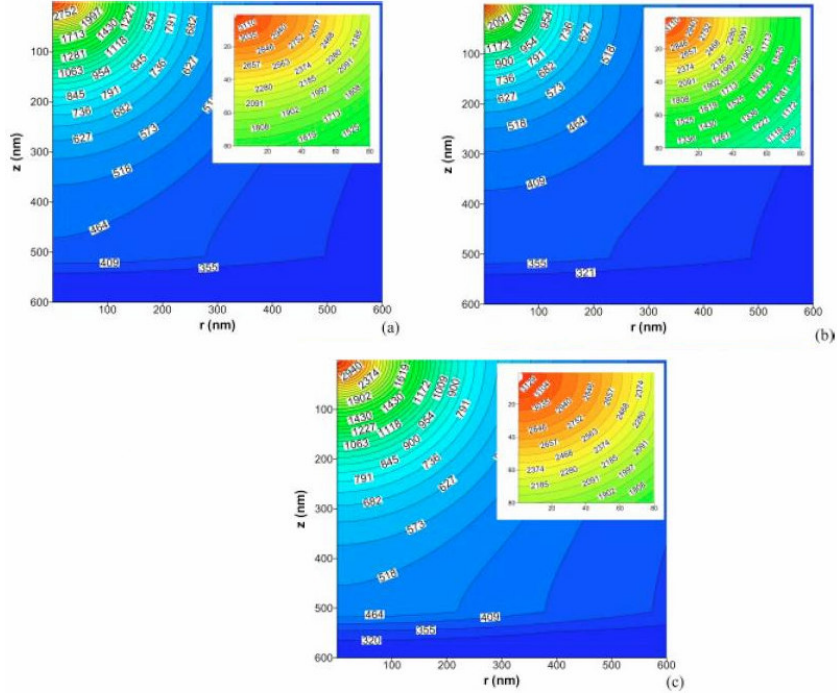
$E_0 = 4keV$), arasındaki genel akımı karşılaştırmak için, iki durumda da buharlaşma zamanı benzer olmalıdır. Bu sebeple $1ns$. yerine $t = 0.9ns$ 'de, $6 - keV$ ışın demetinin, buharlaşmaya yol açması için, gerekli girdi gücünü belirlemek önemli olmaktadır. $0.625W$ ışın demeti gücüyle, fazladan bir simülasyon gerçekleştirilmiş ve buharlaşma zamanının $0.8ns$ olduğu belirlenmiştir. Buharlaşma için zaman ve güç arasında doğrusal bir ilişki varsayıldığında, $6 - keV$ elektron demeti için, $0.9ns$ 'de buharlaşma başlatmak için, $4 - keV$ 'luk biri için $0.5W$ 'a zıt şekilde, yaklaşık $0.62W$ ihtiyaç duymaktadır. Bu ilki için $103\mu A$ 'lık bir akıma ve sonraki için, $125\mu A$ 'lık akıma yol açar. Bu ışın demeti enerjisi arttığında, buharlaşmayı gerçekleştirebilmek için gerekli akım gerçekten azalır gibi görünür. Yine de bu başlangıç niteliğindeki sonuç, buharlaşma zamanı ve tabakanın kalınlığı gibi, sonucu etkileyen diğer faktörler olduğundan, genelleştirilmemelidir.

Şekil 2.40(c) 'de dikkat edilmesi gereken diğer nokta, buharlaşma ilk olarak, beklenen altın buharı oluşturarak, yüzeyin altındaki katmanda oluşur. Elektron demetiyle depolanan en yüksek yoğunluklu enerjinin, yüzeyde değil, onun birkaç nanometre aşağısında olduğu Şekil 2.39(c)'den açıktır. Yine de yüzey buharlaşmadığından, buhar metalin içinde tutulur. Örnekte, şekilde görüldüğü gibi belirgin bir buharlaşma alanı bırakarak, başlangıçtaki öge çıkar ve buhar serbest kalır. Sıcaklık dağılımı üzerine yeni incelemeler, Şekil 2.40(a) ve (b) 'de, buharlaşan bölgelerin daha küçük olması dışında, benzer eğilimleri açığa çıkarır. Elektron demeti gücü veya birçok durum için tam hacim ve biçimi buharlaştırmak için istenen akımlar arasında karşılaştırma yapmada aydınlatıcı olsa da; nüfuz derinliği, elektron demetinin kinetik enerjisine bağlı olarak değiştiğinden, kullanışlı değildir.

(e) Elektron demeti ve lazer ışınına bağlı sıcaklık dağılımı:

CNT'den gerekli olan gücü azaltmak için bir alternatif, lazer ışını aracılığıyla, ek ısı sağlamaktır. Bunu araştırmak için ek sayısal simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Şekil 2.41, Şekil 2.40(a) 'da kullanılan aynı durumlar için, lazer ısısıyla elde edilen sıcaklık dağılımını gösterir. Diğer durumlarla tutarlı olmak için burada verilen sonuçlar, başlangıçtaki ögenin buharlaştığı örnekte $5.09 \mu W / nm^2 (= q_0'')$ lazer ısı akımı yardımıyla, $R_{lazer} = 300nm$ yarıçaplı alan içinde, altın tabakanın altındaki, z-ekseninden ölçüldü, buharlaşma için gerekli zaman $t = 0.9ns$ 'den (Şekil 2.40(a) 'daki gibi) $0.5ns$ 'e kısaltılmış. Gerekli lazer ısı değişimini bağlayarak, olay alanı ve

lazer ilk olarak vakum-alt tabaka ara yüzüne girdiğinde Fresnel yansıması, bu özel durum için gerekli lazer gücü, yaklaşık olarak $1.5W$ hesaplanır. Her ne kadar bu yaklaşım, elektron demetinden gereken gücü azaltabilir olsa da, lazer ışını iş parçasının arkasından ısıtma yaptığından, iş parçasının kalınlığı sınırlayıcı bir faktördür. Ayrıca metaldeki ışıyan enerjinin soğurulması güçlü, bu sebeple, lazer ısınmasının, gelen elektron demeti alanı içinde materyali yeterli şekilde etkileyebilmesi için, altın tabakanın kalınlığının olabildiği kadar küçük olması gerekir.



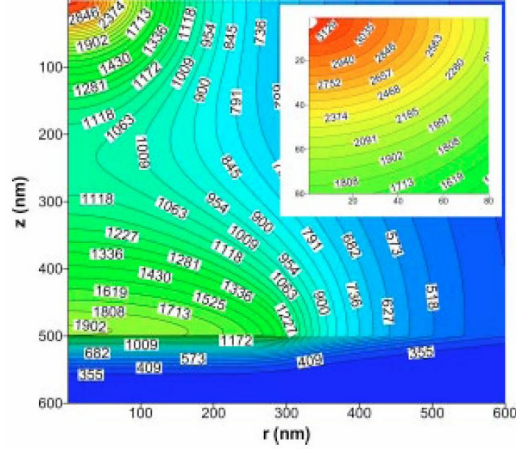
Şekil 2.40 (a) $t = 0.9ns$ 'de altın tabaka içinde, sıcaklık dağılımı (K). Elektron demeti iş parçasının üzerine çarpar ($z = 0$). $R_{elektron} = 100nm$, $1/e^2$ yarıçapı ve $E_0 = 4keV$ başlangıç

kinetik enerjisiyle bir Gaussian ışın demeti şekli ele alınır. Işın demetinin gücü $\dot{E} = 0.5W$ ile başlar. Simülasyonda kullanılan Δt değeri $0.005ps$ 'dir. Altın ve kuvars olan iş parçası ve alt tabakanın kalınlığının, sırasıyla $500nm$ ve $10\mu m$ olduğu varsayılır. Şekilde eş sıcaklık doğrusu için $z = 500nm$ 'de; iki farklı materyalin ara yüzünde; keskin bükülme var. Bunun, kaynağa en yakın hesaplanan ilk ögenin, buharlaşmanın gizli ısını aştığında ve buharlaşmaya başladığı andaki, sıcaklık alanının anlık fotoğrafı olduğu dikkate alınmalı. Sağ üst köşedeki küçük şekil, kaynağın yanında, $(rxz) = (120nm \times 120nm)$ alanı için, up-close sıcaklık alanını tanımlar. (b)

$R_{elektron} = 50nm$, $E_0 = 4keV$ ve $\dot{E} = 0.305W$ dışında (a)'daki koşullar kullanılarak,

$t = 0.7ns$ 'de altın içinde, sıcaklık dağılımı (K). (c) $t = 1.0ns$ 'de, $R_{elektron} = 100nm$,

$E_0 = 6keV$, ve $\dot{E} = 0.615W$ ile, (a)'daki aynı koşulların kullanımıyla, altın içinde sıcaklık dağılımı (K). [63]



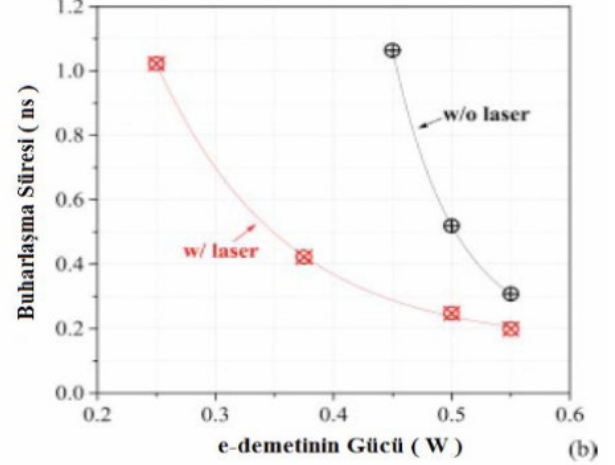
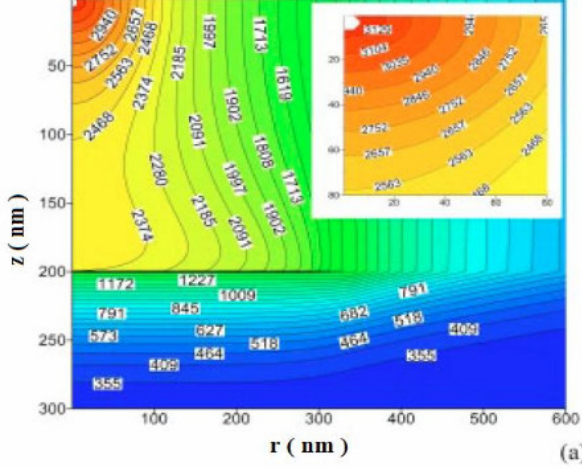
Şekil 2.41 $t = 0.5ns$ 'de altın tabaka içinde sıcaklık dağılımı (K). Elektron demeti ve lazer ışını birlikte ele alınır. Girdi parametreleri Şekil 2.40 (a)'dakilerle aynı. Lazer ışınının gücü $1.5W$ ve z -ekseninden $R_{lazer} = 300nm$ yarıçapını kapsar. Lazer ışını yardımıyla, kaynaktaki ilk elementin buharlaşması için gerekli süre, Şekil 2.40(a)'daki gibi, $t = 0.9ns$ 'den $0.5ns$ 'e geliştirilir. [63]

Şekil 2.42'de gösterilen simülasyon sonuçları için, altın tabakanın kalınlığı $200nm$ 'dir. Elektron demeti ve lazer ışınının açıklaması Şekil 2.41'dekiyle aynı kalır. Bu durumda elektron demetinden gerekli gücün azaltılmasında, lazer ışınması daha etkindir. Şekil 2.42(b), lazer ışını kullanımıyla ya da kullanmadan, çeşitli elektron demeti güçlerinin bir fonksiyonu olarak, $200 - nm$ altın tabaka katmanı için, buharlaşma için gerekli zamanı gösterilirken; Şekil 2.42(a), azaltılmış elektron demeti gücü $25W$ için, başlangıçta buharlaşmanın olduğu, yaklaşık $1ns$ 'de sıcaklık alanını gösterir. Şekilden çıkarılan açık bir gözlem, ısıma için iş parçasının arkasından lazer ışını kullanıldığında, buharlaşma için zamanın kısaldığıdır. Elektron demeti gücü azaltıldığında, buharlaşma zamanının arttığı da dikkate alınmalıdır. Güçlü bir elektron demeti için, buharlaşma zamanı oldukça kısa olduğundan, öyle ki, lazerle sağlanan ısıma tepeye iletilmeden evvel, iş parçası buharlaşmaya başlar, lazer ışını kullanmak gerekli olmayacaktır. Sadece elektron demeti ve lazer ışınının birlikte, olayın aynı noktasına doğru yönlendirilmesi durumunda, lazer ışınmasından en büyük avantaj elde edilebilir.

(f) Kaynağın geçici sıcaklığı:

Şekil 2.43, sonsuz küçük yarıçap $\Delta r = 1.25nm$ ve $\Delta z = 1.25nm$ derinlik civarında, başlangıçtaki ögenin geçici sıcaklığını gösterir. Çeşitli durumların açıklamaları, şekil açıklamasında bulunabilir. Kısaca, 1. durum, kalan dört durum için standart oluşturur; 2. durum, daha yoğun

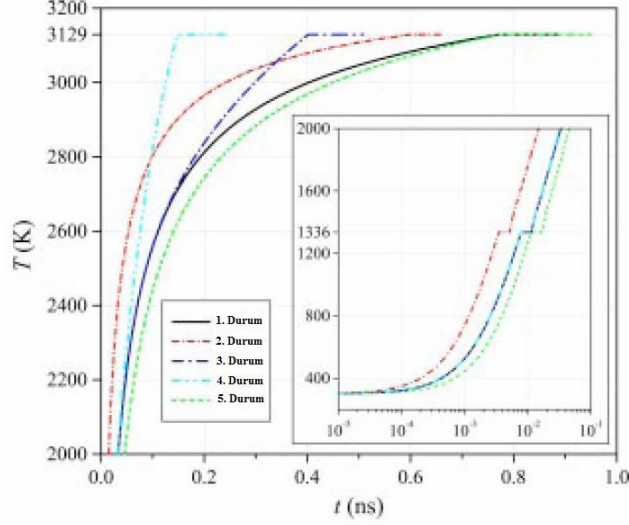
elektron demetine dikkat çeker; 3. durum lazer ışımalarının dahil edilişi; 4.durum lazer ışınlarıyla, azaltılmış altın kalınlığı; 5.durum, yüksek kinetik enerjiyle, bir elektron demetini ifade etmektedir.



Şekil 2.42 $t = 1ns$ 'de sıcaklık dağılımı (K), elektron dağılımı ve lazer ışınının birlikte alınır. Altın tabakanın kalınlığı $200nm$ 'ye küçültülür ve elektron demetinin gücü $0.25W$ olarak kurulu.

Geri kalan girdi parametreleri Şekil 2.41(b)'de verilenlere uyar. $200 - nm$ altın tabaka için elektron demetinin girdi gücünün bir fonksiyonu olarak, buharlaşma için gerekli zaman. [63]

Elektron demetinin daha darca yoğunlaşmasıyla, başlangıçtaki geçici sıcaklığın sonraki durum için her zaman daha yüksek olduğunu göstererek, geçici eğrinin sola kaydığı gözlemlenir (1. ve 2. durum). Bu durum, bu uygulamada, yerel sıcaklığı geliştirmede ve buharlaşma zamanını kısaltmada, yüksek derecede odaklanmış elektron demetinin gerekli olduğunu göstermektedir. Lazer ışınması, elektron demetiyle eş zamanlı kullanıldığında; dışlandıği duruma kıyasla, sıcaklık daha çok yükselmeye başladığı $t = 0.15ns$ 'ye kadar, başlangıç sıcaklığında, etkiye sahip olmaz (1. ve 3. durum). Elbette, lazer için, kaynakta ısıma sürecine destekte bulunmak için başlama zamanı, iş parçasının kalınlığını azaltarak kısaltılabilir. Bu 4. durumun geçici eğrisinden açıkça anlaşılabilir. Olay ışın demeti enerjisinin $6keV$ 'a azaltıldığı son durum dışında, bütün durumların, elektron demeti için aynı girdi gücüne sahip olduğuna dikkat edilmeli. Bu durum, $0.5W$ elektron demetinin kullanıldığı $6 - keV$ durum için gerekli hesapsal maliyetinin nispeten pahalı olmasından kaynaklanmaktadır. Bu sebeple, maliyeti azaltmak için, güç $0.615W$ 'a yükseltilir. Aynı zamanda düşük enerjili ışın demetiyle ısıtarken, düşük enerjili ışın demetince ışımanın her zaman düşük olmasına karşın, başlangıçtaki sıcaklık eğilimini sürdürür (1. ve 5.durum).



Şekil 2.43 $\Delta r = 1.25nm$ yarıçap ve $\Delta z = 1.25nm$ derinlikle, sonsuz küçük alan civarında, başlangıçtaki geçici sıcaklık. Elektron demeti için girdilerin, $R_{elektron} = 100nm$, $E_0 = 4keV$ ve

$\dot{E} = 0.5W$ olduğu ilk durum referans olarak oluşturulur. Altın tabakanın kalınlığının $500nm$ olduğu varsayılır. İkinci de, elektron demetinin $R_{elektron} = 50nm$ ile daha dar odaklanması dışında, referansla aynı girdilere sahiptir. 3. durum, lazer ışınmasıyla birlikte, birinciyle aynıdır. Kullanılan lazer ışını gücü $1.5W$ 'dır. 4.de, diğer girdiler 3.durumla aynıyken, $200nm$ kalınlığında altın tabakaya sahip durumdadır. Son durumun elektron demeti $R_{elektron} = 100nm$, $E_0 = 6keV$ ve

$$\dot{E} = 0.615W$$
 'a sahip, lazer ışını kapalı. [63]

Bu çalışmada, saydam bir alt tabakada depolanan ince metalik tabakada, nano talaş kaldırmayı elde etmenin olasılığı araştırılmıştır. Eş zamanlı elektron ve foton çalışmasının etkileri dikkate alınmıştır. Lazer ışınması tek boyutlu bir problem olarak ele alınırken; altın tabaka içinde elektron demetinin yayılımı, Monte Carlo simülasyonu kullanılarak, modellenmiştir. İş parçası içinde toplanan elektron ve foton enerjilerinin ikisi de ısı aktarımı iletim modelinde ısı üretimi olarak düşünülmüş. Bundan dolayı, iş parçası içinde sıcaklık alanı tahmin edilmiştir. Sonuçlar, yaklaşık $1ns$ boyunca, tek başına bir elektron demetinden yarım Watt güç girişi sağlanmasının, yerel buharlaşmayı başlatmak için yeterli olduğunu gösteriyor. Bu; 4 ya da $6-keV$ elektron demetinin kullanılmasıyla, elektron tabancasından yollanan elektronların uzaysal dağılımının $100nm$ 'den daha yüksek olmaması ve neredeyse tamamen Gaussian dağılımına benzemesinin sağlanmasıyla başarılabilir. İş parçası yeterince ince ise, yoğunlaşmış lazer ışınması yardımıyla, elektron demetinden gereken güç, yüzde 50 azaltılabilir.

Elektron demeti taşınması için, elektron enerjisinin çöküntü şeklinin kesinliğinin, Monte Carlo simülasyonu kullanılarak tahmin edilmesi, burada uygulanan, ayırık esnek olmayan saçılım yaklaşımı (DISA) kullanılarak geliştirilebilir. DISA, tüm saçılım olaylarını ayırık olarak ele almak için, iş parçası için, CSDA'da olduğu gibi durdurma gücü kullanımından daha kesin olan, özellikle, gelen elektron demetinin enerjisi $1keV$ civarındaysa, deneysel optik veri kullanır. Ayrıca, elastik olmayan dağılım sonucu, ikincil elektronların yayılımı (Elektron demetinin birincil elektronlarından, iş parçasının içindeki elektronlara, enerji kaybı); kullanılan Monte Carlo modeli için geçerli olmayan; elektron demetinden gelen enerjiyi, daha geniş bir hacim üzerinde yayacaktır.

Radyasyon kaybı ve basınç ve sıcaklık - bağımlı materyal özellikleri, iletim modelinde birleştirilmelidir. Bu etkilerin dahil edilmesiyle, elektron demeti için gerekli güç daha fazla ya da daha az olabilir. Işımsal kayıplar eklenseydi, iş parçası ısı kaybedecek olduğundan, gerekli güç kesinlikle daha yüksek olacaktır (anlamlı ise). Yine de, sıcaklık yükseldikçe, materyallerin daha fazla sıcaklık dirençli oldukları bilinir, bu sebeple ısıtma bölgesinde, iletimle ısı kaybının azaltılacağını ifade edilir. Sonuç olarak elektron demetinden gereken girdi gücü de azaltılmış olacaktır. Bu yalnızca elektron demeti kullanımı durumundan kesin yarar sağlar.

Fourier ısı iletimi modelinin kullanımı, elektron ve fotonların birlikte aynı sıcaklıkta olduğunu ifade eder. Bu yaklaşım iki sıcaklıklı modelle yer değiştirilmelidir (TTM). TTM, elektron ve fotonların farklı sıcaklıklarda olmalarına izin verir, bu da, elektron demeti enerjiyi ilk olarak iş parçasının içindeki elektronlara ilettiğinden ve elektron sıcaklığının yükselmesine neden olduğundan, önemlidir. Sonuç olarak elektronlar fotonlarınkinden daha yüksek sıcaklıkta bulunurlar. Elektron ve fotonların arasındaki etkileşim sonradan, ikisinin de tek sıcaklığa battıkları dengeyi kurar [36].

2.3.2 Proton Demeti ile Nano Ölçekte İşleme: Son İstasyon Tasarımı ve Test

Bugünkü mikro elektronik üretim teknikleri, aslında iki boyutlu (2D); mikro elektronikte, iki boyutlu (2D) için uygun topolojiler yaygındır. Yarı-iletken aygıtların boyut olarak küçültülmesi, hareketli kısımların birleştirilmesi ile daha küçük Mikro Elektro Mekanik Sistem (MEMS) aygıtları için artan taleple karşılaşılacaktır. Optik-elektronik aygıtlar için, yüksek en-boy oranlı,

üç boyutlu (3D), mikron altı detaylı mikro yapılar artan ilgi odağıdır. Bu sebeple yüksek en-boy oranlı, üç boyutlu (3D) mikro ve nano bileşenlerin üretimi için uygun yeni litografik tekniklerin geliştirilmesi, gereklidir. Üç boyutlu (3D) mikro talaşlama için, daha yerleşmiş tekniklerden biri; elektrolizle biçimlendirilmiş ve mikro biçimlendirilmiş X-ışını litografisi (LIGA), yine de bu süreçte bir dezavantaj; malzeme kıtlığından kaynaklı, nispeten yüksek üretim maliyetidir. Gelişmekte olan birkaç yeni litografi mevcuttur (örn; proton demeti yazısı [p-demeti yazısı], derin mor ötesi (DUV), litografi ve stereo mikro litografi). Proton demeti (p-demeti) yazısı, Singapur'un Ulusal Üniversitesinin Fizik Bölümünün İyon Demeti Uygulama Merkezinde (CIBA) geliştirildi ve umut verici yeni bir üç boyutlu (3D) litografik tekniktir. P-demeti yazısında, yüksek enerjili (örn; 2 MeV) proton demeti; direnç materyalinde üç boyutlu (3D) gizli şekil üretmek için, mikron altı noktasal boyuta ve gözden geçirilmiş uygun direnç materyaline (örn; SU-8 ve PMMA), odaklanmıştır. Bu yeni tekniklerin içinde, yüksek en-boy oranlı nano ve mikro yapıya, doğrudan yazma imkânı sağlayan yalnızca p-demeti yazısıdır. P-demeti yazısı, hızlı doğrudan yazma litografik tekniğidir, $400 \times 400 \mu m^2$ alandaki, karmaşık bir örnek birkaç saniyede, örneğin 150 μm derinliğe pozlanabilir. Bu özellikler, p-demeti yazısının; diğer açıdan sinkrotron ışınım kaynağı ve duyarlılık kalıbı gerektiren; LIGA sürecinden daha düşük bir toplam maliyette; 100 nm altında ayrıntılı, yüksek en-boy oranlı yapıların üretimi için, yüksek potansiyelli doğrudan yazma tekniği olmasını sağlar. Son zamanlarda CIBA da; litografi için MeV protonları ile optimize edilmiş, yeni bir özgül sistem tasarlanmış ve test edilmiştir. Bu sistem dünyadaki örnekleri arasında bir ilktir. Buradaki çalışma esas olarak donanımın tasarımına ve bu yeni sistemle gerçekleştirilecek ilk poza odaklanacaktır. İlk test, üç boyutlu (3D) nanoyapılara doğrudan yazmaya odaklanmış MeV proton demeti kullanımının olanaklı olduğunu gösterir (örn; 100 nm altı).

2.3.2.1 Donanım Tasarımı

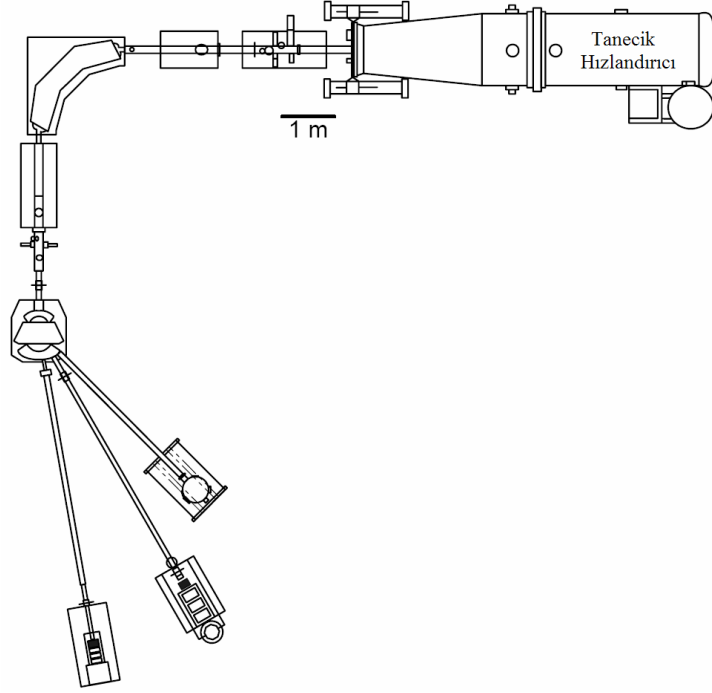
Kullanılan, proton demetli mikro talaşlama aracının sistemli gözden geçirilişi, Şekil 2.44'de gösterilmektedir. Nükleer hızlandırıcıdaki protonlar; 100 nm altındaki noktasal boyuta odaklanır ve direnç materyallerindeki doğrudan yazma modelleri için kullanılır. Son zamanlarda p-demeti yazımı, son teknoloji ürünün (yüksek parlaklıklı, tek uçlu hızlandırıcı [HVEE Singletron]) tanıtımı ile büyük ölçüde geliştirildi. Bu yeni makine; mikro talaşlama amacıyla daha önce

kullanılan, kayışla tahrikli Van de Graaff hızlandırıcısından, daha yüksek kararlılıkta ve parlaklıkta proton demeti üretir.

Hızlandırıcıdan elde edilen protonlar, 90° mıknatıs kullanılarak analiz edilmiş enerjilerdir. Nesne yarıklerini (kesiklerini) tanımlayan demet, akım kesici anahtarlayıcı mıknatısın bir metre önüne yerleştirilir. Buraya dikdörtgensel bir nesne açıklığı kurulmuştur; öyle ki; hedef odanın önüne yerleştirilmiş manyetik dört uçlu lens takımı yardımıyla açıklık boyunca iletilmiş ışın küçültülür ve küçültülen görüntü hedef odaya iletilir. Bir elektronik durgun huzme saptırma sistemi; kapayıcı gibi davranan nesne yarıklarından (kesiklerinden) sonra kurulur. Anahtarlayıcı mıknatısın kullanımıyla; protonlar, mikroskopla inceleme amacıyla ve proton demeti mikro talaşlamasının gelişimi için son birkaç yıldan beri kullanılan 30° nükleer mikroskop ışın demetine yönlendirilebilir. Son zamanlarda, Rutherford Backscattering çalışması için; odaklanmamış iyon demetinin kullanımını sağlayan, anahtarlayıcı mıknatısa göre 45° de, materyal tanımlama sistemi de kurulmuştur. Protonlar 10° ışık demetine de yönlendirilebilir, p-demet yazı aracı, mikro ve nano talaşlamaya adandı. P-demeti yazısı; üçlü yüksek uyarım kurulumunda, Oxford Microbeams yüksek küçültme merceklerini (OM52) kullanır. Bu mercekler sistemi; $7m$ nesne uzaklığında çalışır ve geliştirilmiş küçültme sisteminde $70mm$ indirgenmiş görüntü uzaklığı ile sonuçlanır (228×60 sırasıyla X ve Y doğrultusunda). Mercekler ve hedef arasındaki kısa çalışma uzaklığı sebebiyle, hedefin konumunu kontrol amacıyla kurulan optik mikroskop, zıt geometrik yapıdan kaynaklı sınırlı büyütme imkânına sahiptir. Hedef oda ve odaklayıcı mercek sistemi, titremeleri azaltmak amacıyla bir masa üzerine kurulur. Model; tüm eksenler için kapalı denge çözünürlüğü ile $25mm$ yol alımına sahip Burleigh Inchworm XYZ aşamasıyla kontrol edilen bir bilgisayara monte edildi. Sistem $6''$ 'e kadar Si ince plakası ile uyumlu olması için tasarlanmıştır. Bu yeni odaklama (ayar) sistemi; perdesiz doğrudan yazma litografisi için kullanılabilir; $100 nm$ altındaki noktasal boyuta kadar proton demeti üretebilir.

Pozlama sürecinde; doğrudan dört uçlu mercek sisteminin önüne yerleştirilmiş bir takım elektro manyetik tarama bobin kullanan direnç boyunca ışın demeti gözden geçirilir. Bu yolla $1 \times 1 mm^2$ 'ye kadar tarama alanları elde edilebilir. Yeni sistemle ilk testte, sadece manyetik tarama kullanılmış. Manyetik tarama sistemleri; manyetik tarama bobinlerinden kaynaklı olarak, düşük yazma hızıyla sonuçlanan görece uzun çökme zamanına sahip olduğundan; şimdilerde, pozlama zamanını kısaltılmasına izin verecek, daha hızlı bir elektrostatik tarama sistemi

kuruluyor. Ayrıca, ışın demetini, XYZ basamağının tam bir $25 \times 25 \text{ mm}^2$ menzili boyunca tarama imkânı verecek, bölüm taramada kullanılmıştır. Şimdiki sistemde, SU-8 için tipik pozlama oranı, yaklaşık 1500 s/mm^2 'dir. Optimize edilmiş kurguda; yanal doğrultuda mikron çözünürlük hala kullanılmaya devam ederken; yeni teknoloji protonda, elektrostatik tarama ile kontrol edilen, $1 \text{ nA}/\mu\text{m}^2$ pozlama oranının şu anki yoğunluğunun 20 s/mm^2 kadar hızlı olacağı beklenir.



Şekil 2.44 CIBA'da geliştirilen tanecik hızlandırma tesisinin şematik gösterimi. P-demet yazım ışını ile anahtarlayıcı mıknatıs arası 10° [27]

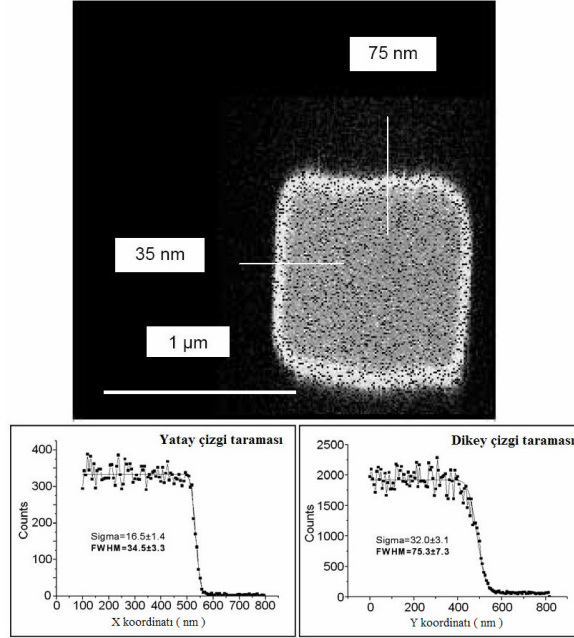
Tarama sistemi; dört 16 bit sayısal analog dönüştürücüye (DACs) ve minimum yenileme zamanına $1.0 \mu\text{s}$ sahip olan, yenice kurulmuş National Instruments NI 6731 Multi i/o kartı kullanır. İki kanal tarama bobinlerini kontrol eder ve üçüncü bir DAC huzme saptırmasını kontrol eder. Bu geliştirilmiş çözünürlük; mikro talaşlama demeti boyunca yeni atanmış proton demetinde mevcut indirgenmiş ışın demeti noktasal boyutu ile başa çıkabilmek için gereklidir.

Işın demeti direnç boyunca sayısal olarak taranırken, piksel başına sabit dozda bir protonu garantilemek ve miktarı normalleştirmek için iki ana yöntem geliştirilmiştir. İki yöntem de

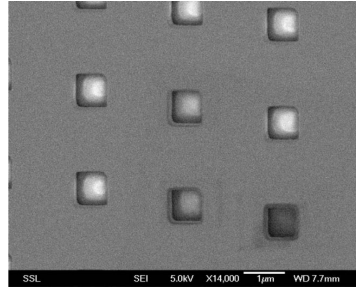
Rutherford Backscattering (RBS) sinyallerini algılamaya dayanıyor. İlk yöntemde ışın demeti, arkaya yayılmış protonların sabit bir miktarı saptandıktan sonra, taramada yeni bir konuma geçirilir (piksel normalizasyonu). İkinci yöntemde ışın demeti, yeterli miktara ulaşılan kadar, birçok defa bir model üzerinde hızla taranır (model tarama). İki durumda da, alan başına ortalama miktar (doz), tarama programından seçilebilir. Pürüzsüz yan duvarlarla, nanoyapı üretimini kolaylaştırmak adına, normalleştirme amacıyla, daha duyarlı geri beslemelerin kullanılması avantajlıdır. Yeni sistemde; proton başına arkaya yayılmış nükleer olay sayısına kıyasla; proton başına daha yüksek verimliliğe sahip ikincil elektron yayılımı ve iyona bağlı foton yayılımı gibi sinyallerin kullanımı için hazırlık yapılır.

Bu sistemle yapılan ilk testte, yeni mercekleme odaklanma kuvveti test edilmiştir (Şekil 2.45). 1 MeV protonlu ışın demeti; $2 \mu\text{m}$ kalınlıklı, serbest duran, $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ delikler içeren, X-ışını maskesi üzerinden taranmış. Maskedeki deliklerden geçen protonlar, silisyum bir yüzey engeli detektörü ile saptanmıştır. Dikey ve keskin olduğu varsayılan, deliğin $1 \mu\text{m}$ kenarında dikey hat taramaları kırıklarının engellenmesi; $35 \times 75 \text{ nm}^2$ noktasal boyutta ışın demetini gösterir. Şekil 2.46'da; ışın demetinin noktasal boyutunu çözmek/değiřtirmek için kullanılan, X-ışını görüntüsünün, tarama elektron mikroskopisini (SEM) görüyoruz. SEM mikroskopisi, deliklerin yan duvarlarının kusursuz olmadığını, fakat yaklaşık 30 nm doğal genişlik profiline sahip olduğunu gösterir. Bu ışın demetinin noktasal boyutunun belirlenmesinde, sınırlayıcı faktör rolü oynar.

Odaklanmış proton demeti; ışın demetinin optik parametrelerine ve ışın demetinin akım yoğunluğuna bağlı olarak, açısal sapmaya sahiptir. Yatay düzlemde, hedeften tipik ışın demeti sapması 1.5 mrad 'dir. Önceki hesaplamalara göre; p-demeti yazısının; 89.6° den daha iyi yan duvara sahip yapıları yapması/yazması için imkân sağlayan, ışın demeti; direnç materyalinde, ilk $5 \mu\text{m}$ 'de 6 mrad 'den daha az yayılmaya sahiptir. Yüksek doğrulukta nano talaşlama; ışın demetinin noktasal optimizasyonu ve yüksek kalitede çözünürlük standardı için; bilgisayar yayılımı içermesi gerekli bir odaklama protokolünün geliştirilmesini gerektirir.



Şekil 2.45 $1 \mu\text{m}$ 'lik delikten protonların ileri saçılarak Si üzerinde kazınma sonucu meydana gelen şeklin iki boyutlu (2D) krokisi. Altta ki şekiller ise $35 \times 75 \text{ nm}^2$ noktasal boyutta ışın demetinin çizgisel taramasını gösterir. [27]



Şekil 2.46 Si üzerinde $1 \mu\text{m}$ 'lik delikler için kullanılan proton demetinin noktasal boyutunu saptamak için SEM resmi. [27]

2.3.2.2 Direncin Pozlandırılması

P-demeti yazısında, materyaldeki yüksek enerjili bir protonun yönü (MeV), materyaldeki elektronlar ve çekirdek arasındaki etkileşime bağlıdır. Bir protonun elektronla etkileşme olasılığı; yörüngesinin ilk %50'sinde nükleer saçılma için olandan, büyüklük anlamında daha fazladır. Bu sebeple, ilk kısım proton yörüngesinde, proton-elektron etkileşiminin dikkate alınması gereklidir. Proton-elektron etkileşimleri; ($m_p/m_e \sim 1800$) kütle oranı sebebiyle, bir protonun yörüngesini güçlükle değiştirir. Bu da; bir protonun yönünün doğrusal bir çizgiden güçlükle sapacağı

anlamına gelir. Bu çarpışmalardaki enerji transferi, daha ziyade küçük olduğundan, 100 eV civarında zirve yapar, bir proton hareketsiz hale gelinceye (dinlenmeye geçinceye) kadar birçok çarpışma gerçekleşecektir. Bu sebeple proton yörüngeleri Monte Carlo hesaplamaları vasıtasıyla tam olarak simüle edilebilir. İyon/elektron etkileşimlerinin fiziksel özelliği, p-demeti yazısının; tahmin edilebilir ve aşağıdaki anahtar özellikler yardımıyla, son derece kuvvetli litografik teknik olmasını sağlar:

Protonlar, direnç materyalinde görece, geniş ve iyi tanımlanmış menzile sahiptir. Mesela 1.0 MeV veya 3.5 MeV proton enerjisi seçilerek; yuva, delik ve gömülü mikro kanallara izin verilmesiyle; sırasıyla 20 μm ve 160 μm yüksekliğine sahip yapılar üretilebilir. Örneklerin eğilmesi, paralel olmayan mikro yapıların üretimine imkân sağlar. Proton demetinin başlangıç rotasında, küçük açılı saçılımlarının gerçekte bulunmaması, yüksek en-boy oranlı yapıların üretilmesine imkân verir. Hesaplamalar gösterdi ki; bir 3.5 MeV proton demeti, 10 μm kalınlıklı direnç katmanında 100 nm'den daha az yayılacaktır. Sonuç olarak, proton taraması boyunca, proton demetinin başlangıç yönü boyunca; tek düze pozlama oranını garanti eden; nispeten sabit enerji çöküntüsü mevcuttur. Tekrar yüksek en-boy oranlı yüksek kaliteli nano ve mikro yapıların üretimine gereksinim söz konusudur.

Bu çalışmada, P-demeti yazma deneylerinde, SU-8 ve PMMA dirençleri kullanılmıştır. MicroChem Corp.'tan (MCC) elde edilen SU-8, Si ince plakası üzerine kaplanmıştır. SU-8'nun 200 nm tabakasını yapabilmek için, SU-8 5 Gamma Butyrolactone'nin her bir hacmi için iki parçaya seyreltilmiş ve 3000 rpm 2 dakika için kaplandı. Işınlama süresince, elektronları eyleme geçiren protonlar, SU-8 dirence bağlanacak veya zincir, PMMA direncindeki moleküler zincirleri kesecektir.

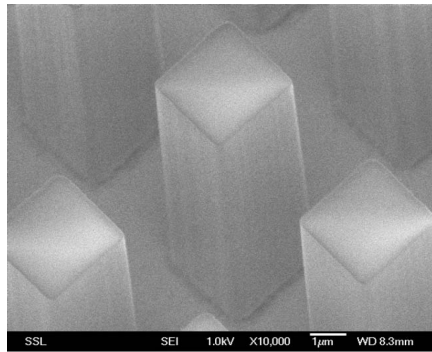
2.3.2.3 Yeni Bir Çözünürlük Standardının Tasarlanması

P-demeti yazısı kullanılarak üretilen önceki çözünürlük standartları $15 \times 15 \mu m^2$ 'lik karelerden p-demetli talaşlama ve yüksek en-boy oranlı, 15 μm kalınlıklı Ni ızgara oluşturmak için, Ni kaplamaydı. Bu çözünürlük standartlarının, yeni p-demeti yazı aracının geliştirilmiş performansı için oldukça kaba olduğu kanıtlandı. Bu standartlar, hedeflenen 130 nm yan duvar genişliğine uygun olarak 89.5° yan duvar açısına sahiptir. Daha iyi çözünürlük standardı üretimi için yapılan

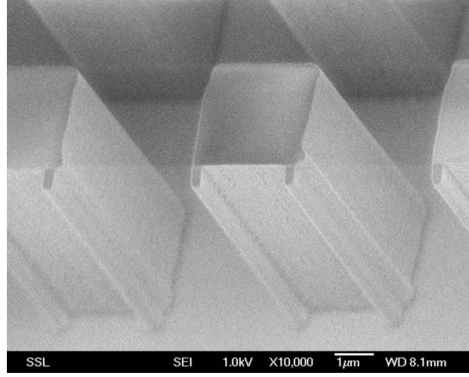
sonraki bir çalışmada, iletken alt tabakada uygulanan $10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 tabakayla yazılmış olan, $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik kareler tasarlanmıştır. Şekil 2.47 bu karelerin 7'ye 7 matrisinin bir bölümünün oldukça büyütülmüş SEM fotoğrafıdır. Onlar; $200 \times 200 nm^2$ noktasal boyuta kadar odaklanmış $2 MeV$ proton demetiyle üretilmiş. Bu kareler; $25 \times 25 nm^2$ piksel boyutu kullanılarak, $50 \times 50 \mu m^2$ 'lik bir alana yazıldı. Pozlama için kullanılan proton sayısı $60 nC/mm^2$ 'dir. Işın demeti boyutuna kıyasla daha küçük piksel boyutu kullanıldığından, karelerin kenarı boyunca depolanan enerji, ana parçaya kıyasla daha az ve böylelikle, kenar boyunca, yeterli çapraz bağlantı sağlayabilmek için, normal doza kıyasla çift doz kullanıldı. Görülebileceği gibi, kareler; keskin köşe ve yaklaşık 90° yan duvarlarla oldukça yüksek derecede pürüzsüzlüğe sahiptir. Sonraki basamakta, bu karelerin çevresine, $200 nm - 1 mikron$ yüksekliğinde, Ni kaplanmıştır. Bu Ni yapıların yan duvarlarında, eğimi $10 nm$ 'den daha az sınırlayacak ve daha önce gözlenmiş olandan daha iyi tanımlanmış ve daha açık kenar tanımı verecektir.

2.3.2.4 Yüksek En-Boy Oranlı Yapılar

Sonraki deneyde, Şekil 2.47'de gösterilen karelerinkine benzer koşullarda, $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik kareler, $10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 tabakalara yazıldılar. Karelerin yazımından sonra, karelerin kenarları boyunca, $200 \times 200 nm^2$ ışın demetiyle, ekstra bir satır yazıldı. Şekil 2.48'de görüleceği gibi, tek satır $200 nm$ genişliğinde dar bir duvara yükselir. Bu, 50'nin SU-8'inde son derece yüksek bir en-boy oranı karşılık gelir. Bunun; SU-8'deki yeni teknolojinin performansı olduğuna inanılır.



Şekil 2.47 $10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 ince plaka üzerine $2 MeV$ proton ışını odaklayarak yazılmış olan $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik karelerin SEM fotoğrafı. [27]

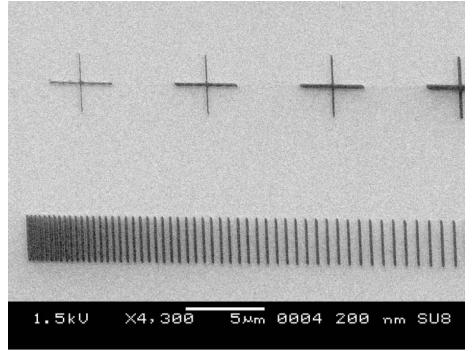


Şekil 2.48 $10 \mu m$ kalınlıklı SU-8 ince plaka üzerine $2 MeV$ proton ışını odaklayarak yazılmış olan $2.5 \times 2.5 \mu m^2$ 'lik karelerin SEM fotoğrafı. Bu karelere dik olan $200 nm$ genişliğindeki duvarlar karelerin kenarları boyunca yazılmışlar [27]

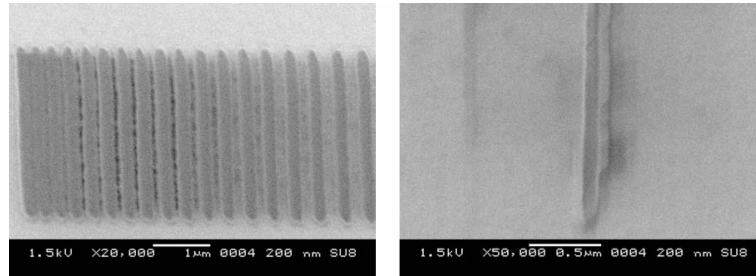
Yeni p-demeti yazma sisteminin, litografik yeteneğini belirlemek için, ilk test olarak; SU-8'in $200 nm$ kalınlıklı plakasına yazılan nanoyapılar, bir Si ince plakası üzerinde kaplandı. Bu plakada bir takım paralel satırlar, $120 \times 250 nm^2$ ışın demetiyle yazılmıştır. Test yapısı $40 \times 40 \mu m^2$ 'lik alanda, $2 MeV$ 'lik proton demetiyle yazılmış, şekil, her bir $20 \times 20 nm^2$ için 2048×2048 piksel ızgarada, sayısallaştırılmıştır. Satırlar $170 nm$ genişliğinde ve $3000 nm$ uzunluğundadır. Satırlar arasındaki uzaklık, minimum aralık boyutunu test etmek için değiştirilmiştir. Paralel satırların yanına, dikey satırlarda yazılmıştır. Şekil 2.49'dan görülebileceği gibi tüm yapılar görece pürüzsüz ve iyi tanımlanmış durumdadır. Bu yapılar; $30 nC/mm^2$ kullanılarak $2 MeV$ proton demeti ile yazılmış. Şekil 2.50, test yapısındaki küçük ayrıntıların, oldukça büyütülmüş iki SEM fotoğrafını gösterir. Şekil 2.50'de soldaki şeklin sol tarafında, satırların; tamamıyla birleşinceye kadar, birbirine yaklaştığı açıktır. En küçük aralık yaklaşık $50 nm$ 'den $80 nm$ 'ye kadar, ancak tam aralığı çıkarmak oldukça zordur. Güvenilir boyutların elde edilmesindeki sorun, geleneksel SEM görüntülemesinde, SU-8'in buharlaşma eğiliminde olduğu gerçeğidir. SU-8 yapılarının yüksek en-boy oranına sahip olmasının görüntüleme performansını sınırlamasından dolayı, atomik kuvvet mikroskobu (AFM) iyi bir alternatif değildir. Bu sınırlamaların üstesinden gelebilmek adına, bu kaplamadan sonra kaldırılmış olacak SU-8, SU-8 arasındaki boşlukları Ni ile kaplamak planlanmıştır. Bu tip metal yapıların görüntülenmesi, bir SEM kullanımıyla daha kolay olacaktır. Şekil 2.49'daki en küçük çaprazın

dikey çubuğunun oldukça büyütülmüş bir SEM fotoğrafı Şekil 2.50'de sağda gösterilir. SU-8'deki yazılmış olan en küçük tek satır olacağına inandığımız, çubuğun genişliği 90 nm 'dir.

İlginç şekilde bu deneyler boyunca, anlaşılması güç ışın demeti noktasal boyutu, X-ışını maske standardı kullanılarak, $120 \times 250\text{ nm}^2$ olarak ölçülmüştür. Yazılan satırın, SEM ölçümü kullanılarak gözlemlendiğinden, ölçülmüş ışın demeti noktasal boyutu, olduğundan fazla ölçülmüştür. Bu da çözünürlük standardı olarak kullanılan, X-ışını maskesinin kenar tanımının, yukarıdaki gözlemler sabit tutularak, 30 nm olduğunu gösterir. Bu bulgular; kenar genişliği için düzeltme yapılmadan, X-ışını maskesi çözünürlük standardı kullanıldığından; $35 \times 75\text{ nm}^2$ 'ye odaklanan proton demetiyle elde edilen en iyi sonucun oldukça korunumlu olduğunu ifade eder. Bu sebeple, geliştirilmiş çözünürlük standardının, daha küçük ışın demeti odağı elde edilmesini ve ölçülmesini ve sonrasında da daha küçük nano boyutlu yapılara yazılmasını sağlaması beklenir.



Şekil 2.49 2 MeV proton ışın demetinin odaklanmasıyla 200 nm kalınlığındaki SU-8 üzerine yazılan test modelinin SEM fotoğrafı [27]



Şekil 2.50 (Sol) Şekil 2.49'daki paralel satırların oldukça büyütülmüş hali. (Sağ) Genişliği 90 nm olan en küçük çaprazın dikey çubuğunun oldukça büyütülmüş fotoğrafı [27]

Sonuç olarak, bu çalışmada, dünyanın ilk proton demetiyle mikro talaşlama (p-demeti yazımı) aygıtının başarılı tanıtımı ele alınmıştır. Bu sistemde proton demetinin $35 \times 75 \text{ nm}^2$ 'ye ve bir direnç boyunca doğrudan taramaya odaklanabilmesiyle maskelemeye ihtiyaç ortadan kaldırılır. Bu çözünürlük, MeV protonları için, şu anda dünyadaki en iyi performanstır. Gelişigüzel şekiller uydurulabilir, PMMA ve SU-8 dirençlerinde yüksek en-boy oranı (100'den daha fazla) sağlanabilir ve şimdiye kadar elde edilen en küçük tek satır 200 nm kalınlıklı SU-8 tabakada 90 nm 'dır.

P-demeti yazısının potansiyel olarak yeni çözünürlük standartları üretebileceğini gösteren, testler gerçekleştirildi. Bu, sonuç olarak, p-demeti yazısının üretebilirliğini geliştirecektir. Bu çözünürlük standartları ışık demeti boyutunun daha iyi tahminlerini verecektir.

Yeni p-demeti yazı makinesinin tarama hızının; elektro statik tarama sisteminin tanıtılmasıyla; birkaç büyüklük emri ile artacağı beklenir. Bu durum; şu anki manyetik tarama sisteminde gereksinilen uzun çökme (oturma) zamanını bertaraf eder. Toplu üretim için, p-demeti yazısı, maskelenmiş işlemde daha yavaş olsa da, hızlı prototipler ve özellikle, parti (yığın) ve büyük hacimli üretimler için kullanılabilecek kalıpların ve damgaların imalatı için oldukça uygundur.

Yeni HVEE 3.5 MV hızlandırıcı ile $160 \mu\text{m}$ 'ye kadar derin yapılar, 3.5 MeV protonları ile üretilebilir. Yeni makine, artan ışın demeti parlaklığı ve yüksek enerji kararlılığından dolayı yolunu daha kesin mikro ve nanoyapılara doğru da yöneltmiştir. Proton demeti dirençte (X-ışınındakinden farklı olarak) oldukça iyi tanımlanmış menzile sahiptir. Ve bu sebeple, yapıların derinliği; iyi tanımlanmış derinlikle, oluk, kanal, ya da delik v.s, yapıları olanaklı kılan farklı proton enerjileri kullanılarak, kolaylıkla kontrol edilebilir. Bir tek direnç tabakasındaki, oyuk, kanal ve ya delikler için derinlik farklı olabilir. Ayrıca, direncin açısını, ışın demetine göre değiştirerek; karmaşık şekiller oldukça iyi tanımlanmış keskin kenarlarla üretilebilir [27].

2.3.3 İyon Işınımı Teknikleriyle Polimerik Alt Tabakaların Mikro/Nano Ölçekte İşlenmesi

Mikro elektronik endüstrisi için geliştirilen mikro fabrikasyon teknikleri son zamanlarda; biyolojik materyallerin mikro modellenmesinde, özellikle, biyo uyumlu polimerlerde uygulanmıştır. Moleküler ve hücrel biyosensörlerin, biyomateryallerin, genetik ve proteinsel

dizilerin geliştirilmesi açısından giderek daha çok önem kazandı. Birçok biyomodel yöntemi; süreçte, bir dereceye kadar fotolitografiyi kullanır. Her ne kadar tamamen gelişmiş bir teknik olsa da, biyo örnekleme uygulamasında hala bazı sınırlamalar var: (a) standart fotolitografinin, film toplama, pozlama, geliştirme ve kazımayı içeren çoklu basamakları var. Bu süreçte ele alınan birçok kimyasal madde, hücreler için zehirlidir ve biyo moleküllerin doğal yapısını bozar, (b) sadece topografya, modellerin yüzey kimyasının belirli bir biçimde uygun hale getirilmesi için sınırlı bir olasılık bırakarak modifiye edilebilir. Yukarıdaki eksikleri gidermek için, biyomodelleme süreci için yardımcı aday olarak, maskelenmiş iyon demeti litografisi dikkate alınmıştır. Bu; yarı iletken üretim yönteminde, “dopant” aşılması (katkılması) için önemli bir tekniktir. Bu ayrıca materyallerin, aşınma ve korozyon rezistansı gibi yüzey özelliklerinin gelişimi için de yararlı bir tekniktir. İyon katkılama son yıllarda, doku ve kan uygunluğunu geliştirmek için, polimer yüzeyleri değiştirmek (modifiye etmek) için de uygulanmıştır. İyon katkılamanın mikro fabrikasyon tekniği olarak kullanılmasının potansiyel avantajları; (a) tek basamaklı bir işlem olduğundan, modeller materyale maske içinden kontrollü olarak mikro talaşlanabiliyor. (b) Ca^{+} ve P^{+} gibi, katkılanacak doğru iyonun seçimiyle; kimi biyolojik süreçleri etkileyebilecek; biyouyumlu materyalin yüzey kimyası uygun hale getirilebilir. Bu çalışmada; polimetilmetakrilat (PMMA) filmin yüzey topografyası; potansiyel biyoMEM tipte aletler için, iyi tanımlanmış mikro-kuyuların oluşumuna yol açan; özellikle Ca^{+} iyonları ve P^{+} iyonları ile maskelenmiş iyon topografyası ile değiştirildi.

Anizolde (M_w) 495 K moleküler ağırlığı ile polimetilmetakrilatin (PMMA) eritilmesiyle, %4 wt bir çözelti elde edildi. Çözelti daha sonra, 0.2 mikronluk bir süzgeçten geçirildi. 1°'lik bir silisyum yonga plakası, standart işlemler izlenerek temizlendi ve hegzametildisilazan ($C_6H_{19}NSi_2 - HMDS$) ile kullanıma hazırlandı. Polimetilmetakrilat (PMMA) çözeltisinin yaklaşık 1.0 ml'si; 60 s'de 1800 rpm hızında dönmesinden önce, yongaya yayıldı. Film daha sonra 60 s için 130°C sıcaklıkta fırınladı. 200 yüzey profilometre (yüzey pürüzsüzlüğünü ölçen elektronik cihaz) Tencor Alphastep ile ölçüldüğünde, film tabakasının kalınlığı yaklaşık 217 nm idi.

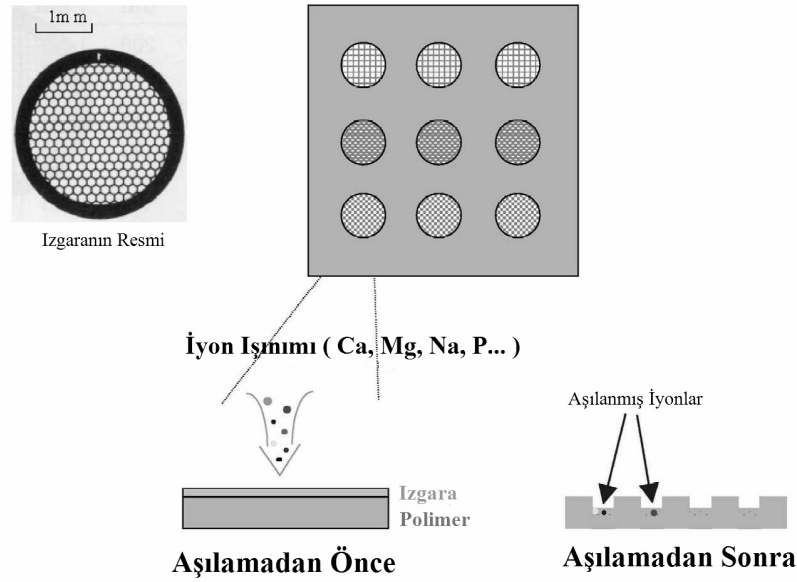
Buckbee-Mears St. Paul'dan ince nikel bir ızgara, MN; teller arasında maksimum %36 iletkenlik ve 7.62 μm boşlukla, maskeleyici gibi davrandı. Bir parça 0.7"×0.7" ızgara, bakır

şerit kullanılarak polimetilmetakrilat (PMMA) filme yerleştirildi. Daha sonra aşılama; Oak Ridge Ulusal Laboratuvarında, yüzey modifikasyonu ve karakterizasyon araştırma merkezinde, Freeman kaynağı ile modifiye edilmiş genel amaçlı bir Cockcroft-Walton tipte iyon aşılama ile Extrion aşılama hızlandırıcı üzerinde gerçekleştirilmiştir. Aşılama ızgara taramayla yaklaşık 4 cm^2 'lik alanın dairesel aşılama alanı üzerine iyon demeti ile gerçekleştirilmiş. Bu, bütün aşılama alanı üzerinde tek düze bir aşılama dozu sağlamaktadır. Modeller; oda sıcaklığında tutulan model tutamacına kenetlenmiştir. Model tutamacı; ikincil elektron yayılımını bastırmak için; $+67 \text{ V}$ meyillendi ve hem ikincil elektron bastırımı hem de ikincil iyon toplaması için -300 V 'de Faraday kafesiyle çevrelendi. Bastırmayla tam doğruluk genellikle %10'dan daha iyi durumdadır. Yine de doğruluk çoğunlukla %1'den daha iyidir. Model akımı; model tutamacı ve bastırıcıdaki akımın toplamı olarak ölçüldü. P^+ iyon katkılması; sırasıyla 1×10^{15} ve $1 \times 10^{16} \text{ iyon/cm}^2$ iyon akışıyla 85 keV enerjide gerçekleştirildi. Ca^+ iyon katkılması da $1 \times 10^{14} \text{ iyon/cm}^2$ iyon dozuyla, 85 keV enerjide yapıldı. Ca^+ katkılması için iyon akımı düşüktü; $4 \mu\text{A/cm}^2$ civarında. Sürecin şematik gösterimi Şekil 2.51'de verilmiştir. Pozlamadan sonra ağ kaldırıldı ve polimetilmetakrilat (PMMA) tabaka; yüksek performanslı CCD kamera ile donatılmış optik mikroskop (Nikon EFD-3, Japan) ve atomik kuvvet mikroskobu kullanılarak (AFM) (Nanoscope III, DI) karakterize edildi. Modellerin hidrofobiği; temas açısı ölçümü yapılarak araştırılmıştır (NRL temas açısı ölçer, NJ).

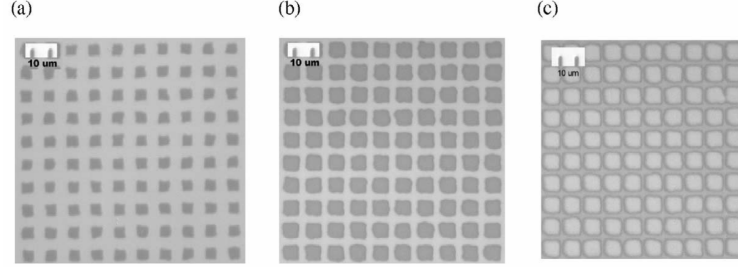
Sonuç olarak, modeller üzerindeki desen; optik mikroskop sonuçlarından görülebildiği gibi (Şekil 2.52), düzenli dağılmış kare kuyular olarak tanımlanabilir. Görüntüler $20 \times$ büyültme altında elde edilmiştir. Ölçek çubuğu $10 \mu\text{m}$ gösterir. Kuyular; maskenin açık alanının altında polimetilmetakrilat (PMMA) filmin iyon ışınlanması sonucunda biçimlenmiştir. Bu sebeple; model üzerine, maske üzerindeki desen kopyalanmıştır. P^+ iyon katkılama dozu arttıkça, desenler arasındaki boşluğun da azaldığı görülmüştür.

Desenleri daha iyi karakterize etmek, yüzey morfolojisini belirlemek için atomik kuvvet mikroskobu (AFM) kullanılmıştır. Görüntüleme; laboratuvar atmosferi koşullarında, atomik kuvvet mikroskobu (AFM) 'hafifçe vurma' modunda işletilerek gerçekleştirilmiş. Bu; örnek yüzeyini bozulmamış moda tutan; atomik kuvvet mikroskop (AFM) uç ve görüntülenen model arasında daha az ilişki sağlamıştır. Aynı sebeple görüntüler, oldukça düşük tarama

hızıyla, 1 Hz., toplandı. Standart silisyum sonda uçları (TESP), 125 μm uzunlukta 294 ve 375 kHz arasında tipik sıklıkta kullanıldı. Şekil 2.53'te verilen şekiller; görüntü alanı üzerine tek düze olarak dağıtılmış iyi tanımlanmış şekillerin deseniyle üç boyutlu (3D) model topografyasını gösterir. Böyle bir topografik görüntü türünde, yüzeyin üst kısmı her zaman daha açık bir renkle ifade edilir. Gözlemlenen desenler; yüzey kalınlığının, şeklinin, yüzey profilinin dağılımının belirlenmesiyle, oldukça detaylı olarak karakterize edilmiştir. Modeli ışıklayan Ca^+ iyonları (85 keV , 1×10^{14} iyon/cm²) üzerindeki kesit analizinin atomik kuvvet mikroskobu sonuçları (Şekil 2.53(a)); izole edilmiş adadaki iki sol kenar arasındaki uzaklığın yaklaşık $11 \pm 0.5 \mu\text{m}$ ve her bir adanın yüksekliğinin $87 \pm 2 \text{ nm}$ olduğunu göstermiş. Desenlerin detaylı analizi, deliklerin konik şekle sahip olduğunu göstermiş. Üstteki kısımların genişliği $6.6 \pm 0.3 \mu\text{m}$ idi ve alt kısım yaklaşık; $3.3 \pm 0.5 \mu\text{m}$ idi. Her ne kadar böyle bir değerlendirme atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ucunun şeklinden (zirve çapı) etkilenbilirse de, desenlerin derinliği oldukça düşüktü. Bu sebeple; atomik kuvvet mikroskobu (AFM) görüntülerinden tahmin edilen tüm boyutların gerçek olduğuna inanılmıştır. İlginç olan ise, desenli delikler arasındaki cidarlar da, alttaki deliklerle yaklaşık aynı kalınlıkta olması, $3.3 \pm 0.5 \mu\text{m}$.

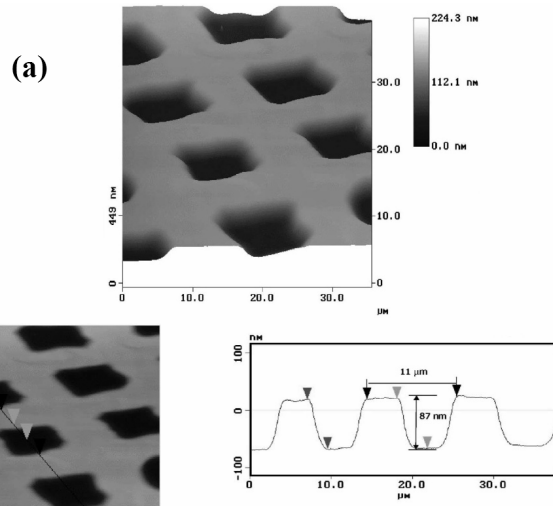


Şekil 2.51 MIBL prosesinin örnek şeması [19]

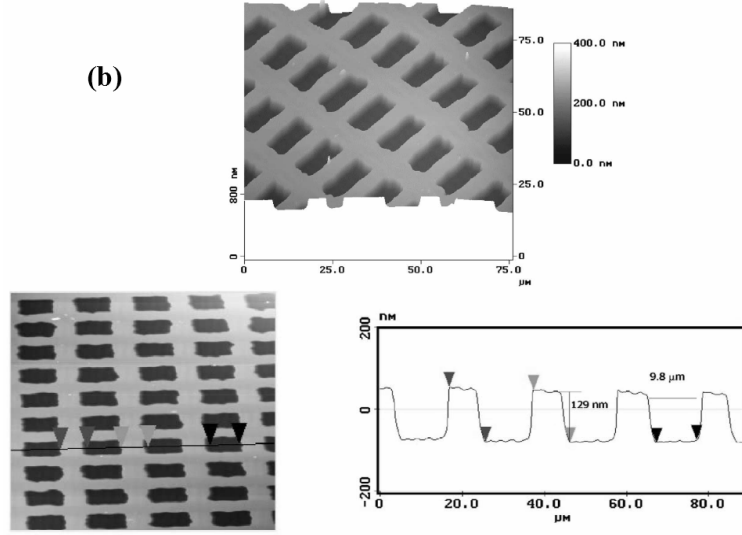


Şekil 2.52 (a) 85 keV , $1 \times 10^{14} \text{ iyon/cm}^2$ Ca^+ iyonları, (b) 85 keV , $1 \times 10^{15} \text{ iyon/cm}^2$ P^+ iyonları, (c) 85 keV , $1 \times 10^{16} \text{ iyon/cm}^2$ P^+ iyonlarının ışınlanması ile örneklerin optik mikroskobik sonuçları [19]

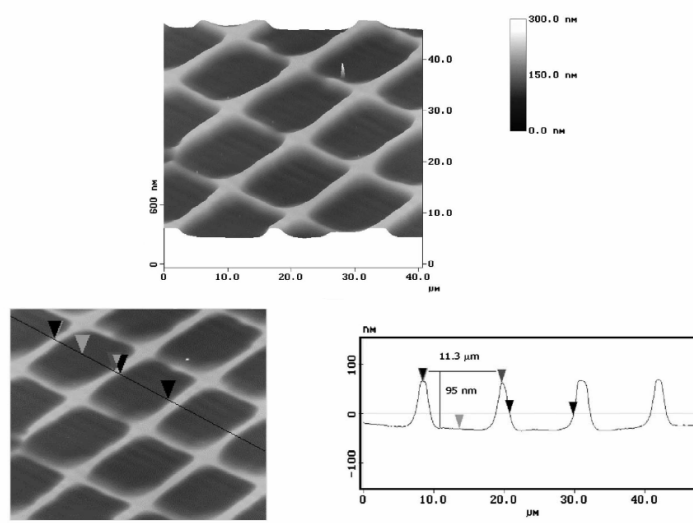
Şekil 2.53(b); P^+ iyonları (85 keV , $1 \times 10^{15} \text{ iyon/cm}^2$) için kaydedilmiş, $9.8 \mu\text{m}$ derinlikli ve 129 nm genişlikli bir modeli gösterir. Kesit analizi açık bir şekilde deliğin yine konik şekilde olduğunu gösterir. Yine de bu durumda, açıklıklar arasındaki cidarın daha ince olduğu bulunmuştur. Yüzey açıklığının etrafındaki cidarların da, her yüzde (kenarda) aynı olmadığı gözlenmiştir. Dikdörtgen açıklıkların daha kısa kenarları boyunca cidarların, diğer yönlerden yaklaşık %40 daha kalın olduğu görünür. Bu olguyu doğrulamak için, atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ucunu farklı yönlerde tarayarak resimler toplanmıştır ve sonuç olarak; desenlerin ve cidarların şeklinin, niteliksel ve niceliksel bağlamda, görüntüleme boyunca tarama yönüne bağlı olmadığı sonucuna ulaşılmıştır.



Şekil 2.53 (a) 85 keV , $1 \times 10^{14} \text{ iyon/cm}^2$ Ca^+ , (b) 85 keV , $1 \times 10^{15} \text{ iyon/cm}^2$ P^+ , (c) 85 keV , $1 \times 10^{16} \text{ iyon/cm}^2$ P^+ , iyonlarının ışınlanarak hafifçe vurma modunda çapraz kesit analizi ile kaydedilmiş tipik yüzey özelliklerinin karakterize edilmiş PMMA film yüzeyinin AFM görüntüsü [19]



Şekil 2.53 (b)

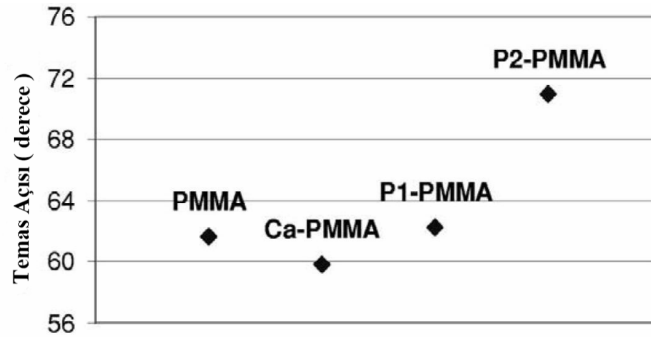


Şekil 2.53 (c)

Şekil 2.53 (c); pozlama koşulunun P^+ iyonu 85 keV , $1 \times 10^{16} \text{ iyon/cm}^2$ olduğu durumda, modelin görüntüsünü gösterir. Özellik arasındaki uzaklık $11.3 \mu\text{m}$ (genişlik) ve desenler 95 nm derindir. Yön bağlamında, desen cidarları arasında sistematik farklılıklar gözlenememiştir. Daha önce bahsedildiği gibi, doz artınca cidarlar incelmış. Bu; cidarların yanlardan aşınmasından kaynaklıdır. Başlangıçta sadece maskenin açıklığının altındaki bölge aşınır; ancak bu alanlar geriye doğru çekildikçe; cidarlar aşınmış alanlardan daha yüksekte kalmıştır. Her ne kadar cidarlar maskeyle gölgelenmiş olsa da; her bir bölgenin

merkezinden, dar bir açıdan püskürtülen iyonlar, çıkabilir ve cidarlara çarpar. Bu da cidarların yüzlerinden püskürtülmesiyle sonuçlanacaktır. Bu cidar yüzlerinin, aşılınmış alanlardan geri çekilmesine neden olacaktır ve cidarlar gittikçe inceleyecektir. Bu etki iyon dozajı arttıkça daha da çarpıcı oldu.

Modellerin oda sıcaklığında hidrofobikliği (su geçirmezliği); NRL temas açısı gonyometresi (açıölçeri) kullanılarak, desenli bölgenin yüzeyine düşen damıtık suyun temas açısının ölçümüyle araştırılmıştır. Sonuçlar Şekil 2.54'de gösterilir. Her bir değer üç ölçümün ortalamasıdır ($\pm 2^0$). Düzenli polimetilmetakrilat (PMMA) film ile kıyaslandığında; modellerin 1×10^{14} *iyon/cm²* Ca^{+} ve 1×10^{15} *iyon/cm²* P^{+} iyonlarıyla ışınlamasının temas açısını önemli ölçüde değiştirmedeği görünür. Yine de, düzenli bir polimetilmetakrilat (PMMA) için; P^{+} iyonlarının akışı 1×10^{16} *iyon/cm²* çıktığında, temas açısı 61.7^0 'ye kıyasla daha yüksek bir değere çıkar, 71.0^0 daha yüksek bir temas açısı, daha hidrofobik bir yüzey gösterir. Yüzey hidrofobisinin, yüzeyin kutupsallığıyla ilişkili olduğu bilinir. Yüzey kutbu daha az oldukça, daha hidrofobik olur. Hakikaten, iyon demetinin etkilerinden birisinin; yüzey oksijen işlevselliğinin değişmesi, bu durumda, metakrilat pandantif grubun kaybı olduğu gösterilmiştir. Sonuç olarak yüzey kutupsallığı; daha hidrofobik bir yüzeye yol açarak, düşer. Çalışmalar; yüzey hidrofobikliğinin; biyometaryallerin ve biyoMEM tipte aletlerin gelişimi için oldukça önemli olan; polimer yüzeyde farklı tipteki hücrelerin davranışlarını etkilediğini göstermiştir.



Şekil 2.54 85 keV , 1×10^{14} *iyon/cm²* Ca^{+} (Ca-PMMA), 85 keV , 1×10^{15} *iyon/cm²* P^{+} (P1-PMMA), 85 keV , 1×10^{16} *iyon/cm²* P^{+} (P2-PMMA) ile modellerine ışınlandırılmış düzenli polimetilmetakrilatın (PMMA) temas açısı değerleri [19]

Polimetilmetakrilat (PMMA) filmi üzerine tutulan iyon üzerindeki IR çalışma; yüzey kalınlığının yüzey hidrofobikliğini nasıl etkilediğiyle birlikte; pozlama işlemi süresince ilgili kimyayı keşfetmek için şu an yolundadır.

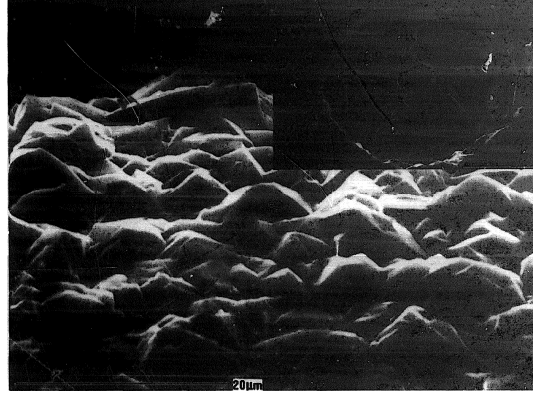
Özet olarak, Maskelenmiş İyon Demeti tekniği, polimetilmetakrilat (PMMA) film kullanan biyomateryal modellemesi için, çok yönlü bir yaklaşımla bu çalışmada test edilmiştir. Sonuçlar; Ca/P iyon katkılmasıyla; sadece alt tabakanın topografyasının değişebileceğini değil, yüzey kimyasının da uygun hale getirilebileceğini göstermiştir. Bu; biyoyumlu polimerik materyaller üzerinde üç boyutlu (3D) ve iki boyutlu (2D) mikro yapıların yapımı için şimdilik umut veren bir teknik olarak gözüküyor [19].

2.3.4 Seramiklerin Elmas Lifler (Fiberler) ile Nano Ölçekte Talahlı İşlenmesi

Elmas, bilinen en sert materyal ($\sim 113 \text{GNm}^2$) ve sentetik yüksek basınç ve yüksek sıcaklık, birleştirilmiş iri taneli elmas parçacıkları, genellikle aşırı aşındırıcı taşlama tekerlerinde kullanılır. Elmas taneciklerinin, kırılğan seramiğin taşlamasının çalışılması; oldukça küçük kesim derinliğinin, yüzey çatlağının keskinliğinde önemli bir azalmaya neden olabileceğini göstermiştir. Özel olarak tasarlanmış yüksek sertlikte makinalar, hassas takım beslemesi, tek uçlu elmas kesiciler, cam; sünek çatlaksız koşullar altında, işlenmiştir. Kimyasal buharlı çökelme yöntemi ile üretilmiş CVD elması, doğal elmasın birçok fiziksel, mekaniksel özelliklerine sahiptir ve CVD elmas lifler, tungsten telden çöküntüyle imal edilmiştir. Bu çalışmada, seramiğin sünek taşlanması, bu elmas lifler kullanılarak tamamlanmıştır, cam ve alüminyum oksit üzerindeki saha yüzeyinin topografyası tanımlanmıştır.

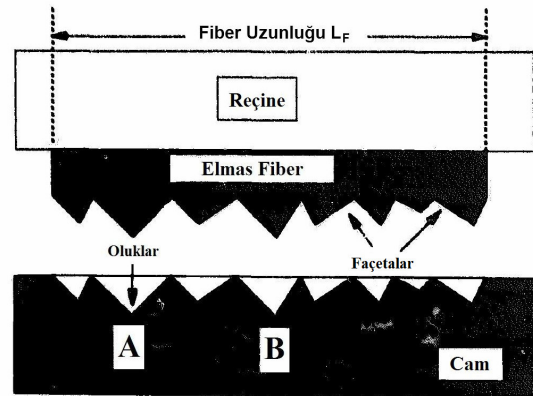
$\sim 100 \mu\text{m}$ çaplı (Şekil 2.55) elmas lifler, sıcak fitil reaktöründe $25 \mu\text{m}$ çaplı tungsten tel üzerinde $\sim 25 - 40 \mu\text{m}$ kalınlıklı elmas filmden üretilmiştir. Radyal doğrultusuna yöneltilmiş, elmas tabaka içindeki, lif eksenini çevresindeki, uzun kolon biçimli taneler; silindirik yüzeyde kenar ve uçlarla, kristal façetalara (elmasın yontulmuş yüzü) neden olur (Şekil 2.55). $\sim 5 \mu\text{m}$ yüzeyinde, elmas tanecik yarıçapıyla, lif yüzeyindeki kenar ve uç sayısı, 10^4mm^2 'dir. Taşlama; Şekil 2.56'da gösterildiği gibi $L_F = 1$ veya 5mm uzunluklu tek bir lif yüzeyi kullanılarak, yürütülmüştür. Bir lif yaklaşık, yarım lif yarıçapında reçine içine gömülmüş ve 25rpm devirde dönen cam diskle

bağlantılı, dengeli kola bağlanmıştır. Basit bir yüklü disk makinesinde $\sim 2N$ normal kuvvet uygulanan kol üzerine bir ağırlık yerleştirilmiştir. Çeşitli camlar ve alüminyum oksitler için test numuneleri, $\sim 50 \text{ mm}$ yarıçapındaydı ve aşınma izi yarıçapı, $\sim 0.05 \text{ ms}^{-1}$ yüzey hızını zorlamış. Bütün taşlamalar havada yağlayıcı olmadan gerçekleştirildi.



Şekil 2.55 Tungsten tel üzerinden alınmış numune üzerindeki CVD ile üretilmiş elmas lifin kesiti ve bu lif yüzeyinde oluşan facetaların büyütülmüş hali [51]

Lif eksenine normal olarak taşlama doğrultusunda yönlendirilmiş. Alçak yüklerde ve küçük kesim derinliğinde, tipik sünek taşlama koşullarında, sadece en yüksek elmas facetaya, başlangıçta camla ilişki kurar. İz; en yüksek elmas yüzeyince sebep olunan, tekil oluklardan oluşturulmuştur. Artan sayıdaki devirlerle veya yüklemelerle, kesim derinliği artmış, daha çok facetalar yüzeye ilişki kurmuş. Oluk izin tüm genişliğini kapsamış ve iz genişliği lif uzunluğuyla eşitlendi (Şekil 2.56).



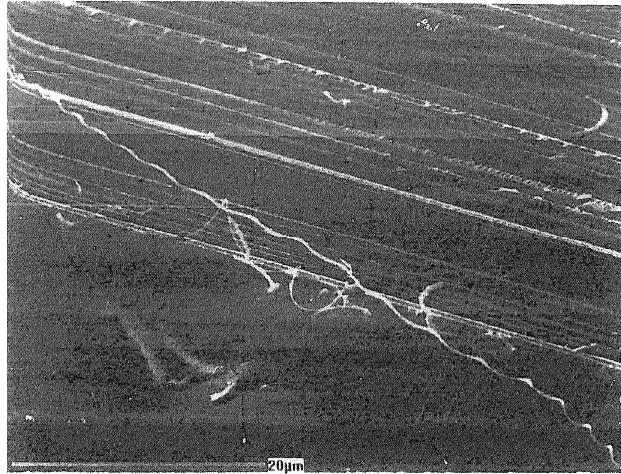
Şekil 2.56 Seramik yüzey üzerine paralel olarak monte edilmiş elmas lifin şeması ve oluklar ve facetalar [51]

Saha yüzeyi, optik ve tarama elektron mikroskobu (SEM) ve atomik kuvvet mikroskobunca, belirlenmiştir. Elmas lifler, taşlamadan önce ve sonra, SEM ve Raman spektroskopisi ile incelenmiştir.

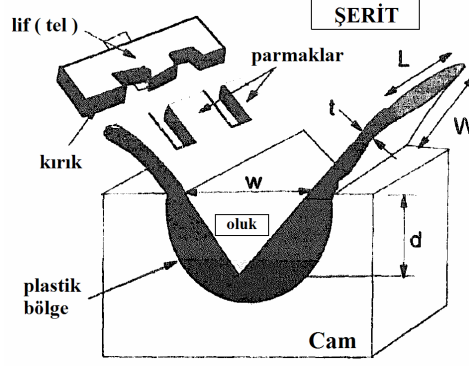
Sonuç olarak;

(a) Cam Yüzeyi:

Sünek sahadaki oluklar, optik cam yüzey, Şekil 2.57'de gösterilmektedir. AFM yüzey profili, oluk derinliğinin $< 100 \text{ nm}$ olacağını göstermiştir. Bu olukların yüzeyinde veya yüzeyin altında hiçbir çatlak görünür değildir. Materyallerin; camın plastik akışı ile oluktan ayrıldığı görülmüş. Bu, şematik olarak Şekil 2.58'de gösterildiği gibi, cam şeritlerinin oluşumunun; yaklaşık $1.4 \mu\text{m}$, genişliğinde ve $0.3 \mu\text{m}$ kalınlığındaki oluk yakınında olmasına yol açar. Bazı şeritler yüzeye bağlı kalır; fakat diğerleri lifimsi cam döküntüsü oluşturmak için oluğun kenarı boyunca ayrılır. Şeritlerdeki artık gerilmeler, fitillerin (tellerin) karmaşık şekline kanıtlanmıştır. Sarmal fitil (tel) parçalarının ve birçok milimetre uzunluğundaki tek bir fitil örnekleri Şekil 2.57'de gösterilir. Çoklu taşlama geçişi; fitillerin parçalanmasına ve daha çok eş eksenli döküntü ve $R_a = 28 \text{ nm}$ yüzey kalınlığına yol açar. Lifimsi döküntü, camın; tek uçlu elmas ile hassas işlenmesinin bir özelliğidir.



Şekil 2.57 Optik cam yüzeyi içindeki oluk kesintileri ve sarmal cam teller (fitiller) [51]

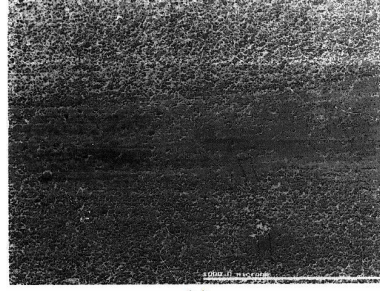


Şekil 2.58 Lifimsi cam döküntüsü oluşturmak için ayrılan oluk yakınındaki şeritleri üretmek için camın sünek akışı ile meydana gelen oluk oluşumunun şeması [51]

(b) Alüminyum Oksit Yüzey:

$L = 1 \text{ mm}$ ve 200 g yük altında bir lif tarafından, 1000 devirden sonra üretilen, gözenekli alüminyum oksit yüzeydeki taban izi, Şekil 2.59(a)'da gösterilmektedir. $R_a < 300 \text{ nm}$ yüzey kalınlık değeri, Şekil 2.59(b)'deki gözeneksiz alanda elde edilmiştir. Gözeneklilik; gözenegin kenarı ile taşlama façetalarının tekrarlanan etkimelerine neden olur, fakat arada sırada olan, façetanın ufalanması ve façetadaki ufak değişim; cam ve alüminyum oksit örneklerinin binlerce devrinden sonra, gözlenmiştir. Bir taşlama devrinden önce ve sonra, tekrar kristalize olmuş alüminyum oksidin gözeneksiz yüzeyi Şekil 2.60'da gösterilir. Başlangıçta, tanecikler yüzeyin birkaç mikron aşağısında ve yukarısında ve bu taşlama hızının süresiz olmasına neden olur. Şekil 2.60(b)'de, olukların bir bölgede kesiştiği; yüzey üzerinde üretilen bazı taneciklerin, taneler arası kırktan elendiği; $8 \mu\text{m}$ genişliğinde taban izi gösterilmektedir. Olukların pürüzsüz yüzey tabanının aşağısında, çatlak izi yoktu. $< 300 \text{ nm}$ yarıçaplı, oldukça ince eş eksenli toz döküntüsü, nihayetinde, façeta ile yağlayıcı olmadan, önlenen taşlama arasındaki, boşlukları doldurmuştur.

Sonuç olarak, $R_a < 100 \text{ nm}$ taban yüzeyi için, pürüzlülük değerleri ile gösterilen, kesimin sığ derinliği ve nano ölçek döküntü çatlaksız talaşlama ve yüzey artık gerilmelerinin, alçak derinliği ile tutarlıdır. Kesim façetasının yüksek yoğunluğunun; yüzeysel kesim derinliğine rağmen; çoklu lifler için 10^{-4} 'den 10^{-1} 'e $\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$ mikro taşlaması için, bahsedilen değer takımının en son ucunda; R 'nin tahminleri ile yüksek oranda materyal R yer değiştirmesine yol açması beklenmektedir [51].

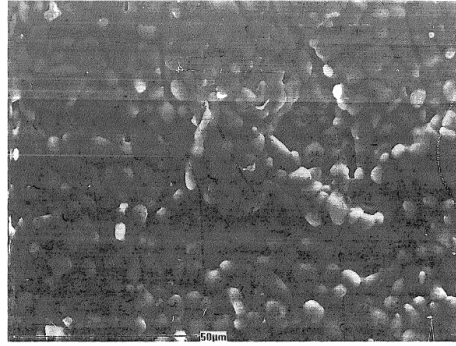


(a)

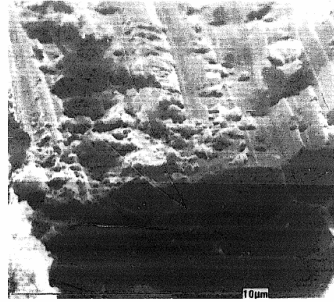


(b)

Şekil 2.59 Sinterlenmiş gözenekli alüminyum oksit yüzeyi. (a) taban izi, (b) gözenekler arası pürüzsüz alan, $Z_{rms} < 30nm$ [51]



(a)



(b)

Şekil 2.60 Gözeneksiz yeniden kristalize edilmiş alüminyum oksit yüzeyi (a) önce ve (b) taşlamadan sonra [39]

2.3.5 Nano Ölçekte Talaş Kaldırılmış Tek Kristalli Silisyumdaki Yüzey ve Alt Yüzey Çatlaklarının Tarama Kuvvet Mikroskobu ve Tarama Lazer Mikroskobu ile Değerlendirilmesi

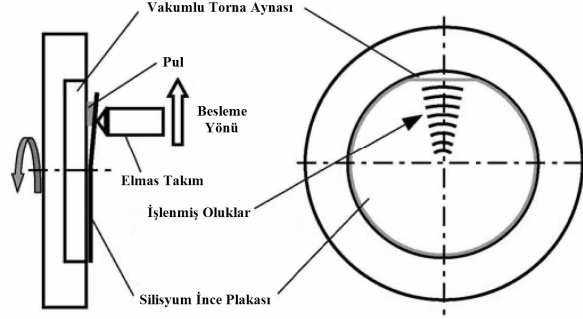
Kırılğan malzemelerin talaş kaldırılmasını bitirmenin bir yolu, cilalama ve alıştırma olarak ele alınır. Bu hassas çalışma koşulları çatlaksız talaş kaldırma için gerekli kriterleri sağlamaktadır. Bununla birlikte bu yöntemler, günümüzün ileri teknoloji gereksinimlerini (hızlı üretim ve yüksek kalitede yüzeyler) karşılamaz. Sünek modda talaş kaldırma olarak bilinen; aşırı duyarlı (hassas) taşlama ve kesimle çatlaksız talaşlama, geleneksel teknolojinin sınırlamalarının giderilmesinde potansiyele sahiptir.

Kırılğan malzemelerin; silisyum, cam, v.s, sünek modda talaş kaldırılması, yaygınlaşmıştır. Talaş kaldırma sürecinde, kırık mekaniği ve termal eylemden kaynaklı, çeşitli hasarlar oluşsa da; plastik deformasyonla malzeme uzaklaştırmanın, oldukça küçük kesim derinliğinde tamamlandığı ortaya çıkmıştır. Talaş kaldırmadan kaynaklı yüzey çatlaklarının varlığı veya yokluğu, genellikle, gevrek veya sünek mod arasında karar vermek için bir kriter olarak kullanılmaktadır. Cam üzerindeki, talaş kaldırma testinde, sınırın yanında, bir plastik ve elastik deformasyon bölgesi arasında, çeşitli tipte çatlaklar geliştiği bildirilmiştir. Bunlar; malzemenin içinde ilerleyen ve malzemenin yüzeyindeki gözlemlerde görülmeyen, alt yüzey çatlaklarını da içerir. Alt yüzey çatlakları kimi zaman, yüzey kalitesini etkilediğinden; kırılğan malzemelerin talaş kaldırılmasının analizinde, alt yüzey çatlaklarının gözlemlenmesi önemli rol oynamaktadır.

Bu çalışmada; tek kristalli silisyum yüzeylerin nano ölçek katmanları, keskin uçlu elmas takımla işlenmiştir. Yüzey çatlakları gibi alt yüzey çatlakları da, tarama kuvvet mikroskobu (SFM) ve tarama lazer mikroskobuyla (SLM) gözlemlenmiştir. Yumuşak-kırılğan geçiş noktası araştırılmış ve tek kristalli silisyumun talaşlamasının sünek modunun olabilirliği dikkate alınmıştır.

Buradaki deneyde kullanılan iş parçası malzemesi, tek kristalli silisyumdu (aygıt derecesi, n-tip, (100) yüzeyle, 75 mm (3 in.) ince plaka). Kesici takım olarak; 136° tepe açısıyla, tek kristalli Vickers elmas piramit dişlisi kullanılmış; kesim süresince takımın durumu, ışık optik mikroskobuyla takip edildi. Aşırı duyarlı döner makine; iş parçasının dolanımı için aerostatik yatak milinden; takım beslemesi için rulmanlı yatak lamından oluştu. İş parçası mil üzerine

monteli bir vakumlu torna aynasına sabitlenmiştir. İş parçasının yüzey dönüşü 170 veya 700 *m/dak* kesim hızı ve sabit 0.03 *mm/devir* besleme değeriyle, merkezden dışarı doğru gerçekleştirilmiştir. Spiral oluklar, Şekil 2.61’de gösterildiği gibi biçimlendirilmiştir. Çeşitli oluk derinlikleri üretebilmek için; monte edilmiş iş parçasına; iş parçasıyla, torna aynası yüzeyinin arasına kısmen eklenmiş ara halkasıyla eğim verilmiştir.

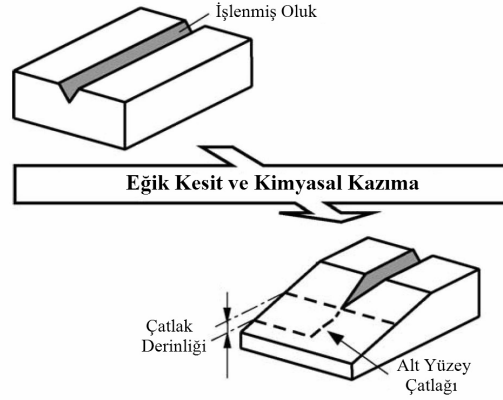


Şekil 2.61 Talaşlı üretimin ana bölümünün şeması [55]

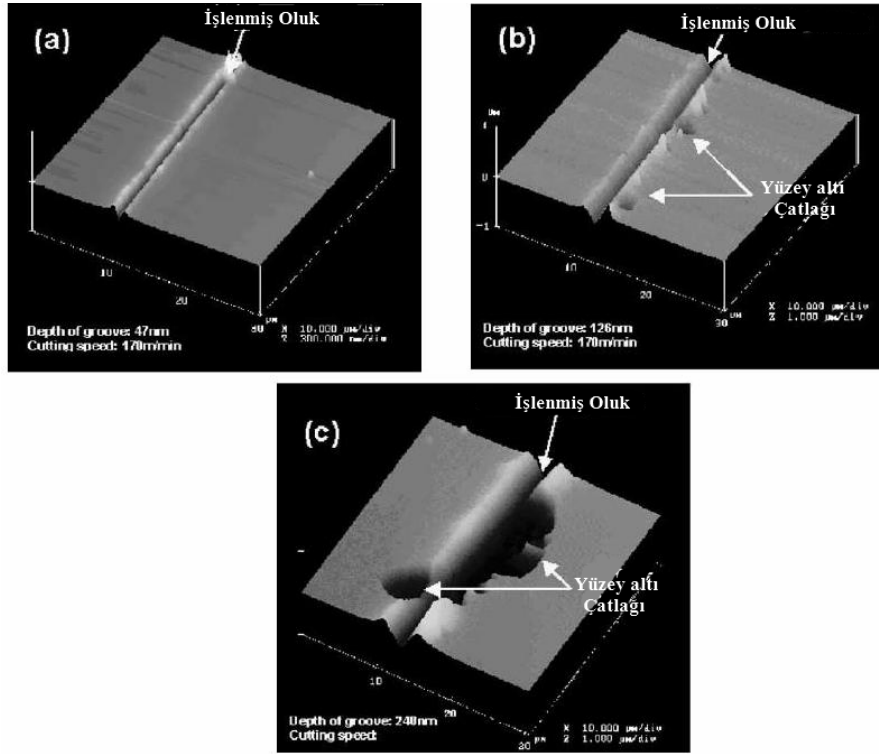
Araştırma, yüzey çatlaklarının ve iş parçası içinde büyüyen alt yüzey çatlaklarının gözlemlerini kapsamaktadır. İş parçasının yüzeyinin gözlemi için bir tarama kuvvet mikroskobu (SFM) kullanılmıştır (Nano alan III). Bu mikroskop aynı zamanda, oluk derinliklerini ve her bir oluğun yüzey çatlakları oranını ölçmek için kullanılmıştır. Sonraki; oluk boyunca üretilen yüzey çatlaklarının toplam uzunluğunun; bu olukların tarama kuvvet mikroskobundaki (SFM) gözlem alanındaki uzunluğuna oranıdır. Daha sonra; Şekil 2.62’de gösterildiği gibi, bir tarama lazer mikroskobu (SLM) (Lasertec 1LM15H) kullanılarak, alt yüzey çatlaklarının derinliğini ölçmek için; iş parçasının bir kısmı çaprazlanarak bölünmüş, sonra alt yüzey çatlaklarının görünümünü açığa çıkarmak için dağlanmıştır. Alt yüzey çatlak derinlikleri; oluğun en derin noktasından, alt yüzey çatlaklarının sonuna işaretlenmiş derinlik olarak değerlendirilmiştir.

Sonuç olarak, yüzey çatlakları esas olarak tarama kuvvet mikroskobu (SFM) ile gözlenmiştir. Kırılmanın özelliği, silisyum yonga plakasındaki kristalografik yöne bağlı olduğundan; gözlemler bu çalışmada, $\langle 110 \rangle$ yönünün bir kısmına odaklanmıştır. Çeşitli kesme derinlikleri için talaşlanmış olukların tipik görünümü Şekil 2.63’de gösterilmiştir. Şekil 2.63 (a)’da gösterildiği gibi; bu gözlemlerden, kesme derinliği küçük olduğunda, Vickers elmas dişlisinin çatlaksız oluklar üretebildiği ortadadır. Diğer taraftan, Şekil 2.63 (b)’de gösterildiği gibi; kesme

derinliğindeki çok küçük artışlarla; yanal çatlaklardan kaynaklanan, küçük ölçekte kırılmalar gözlemlenmiştir. Kesme derinliği daha da derinleştikçe, Şekil 2.63 (c)'de gösterildiği gibi; yanal çatlaklardan kaynaklı büyük kırılmalar yüzeyde görünür.

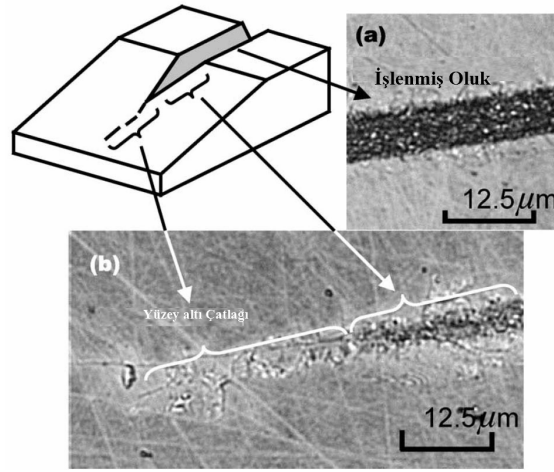


Şekil 2.62 Oluk altındaki yüzey altı çatlakların gözlemlenebilmesi için çapraz olarak bölünmenin ve kazınmış yüzeyin hazırlanması [55]



Şekil 2.63 (a) 47 nm , (b) 126 nm , (c) 240 nm 'lik kesme derinliklerindeki oluklar için talaşlı işlenmiş yüzeylerin tarama kuvvet mikroskobu (SFM) ile elde edilen resimleri [55]

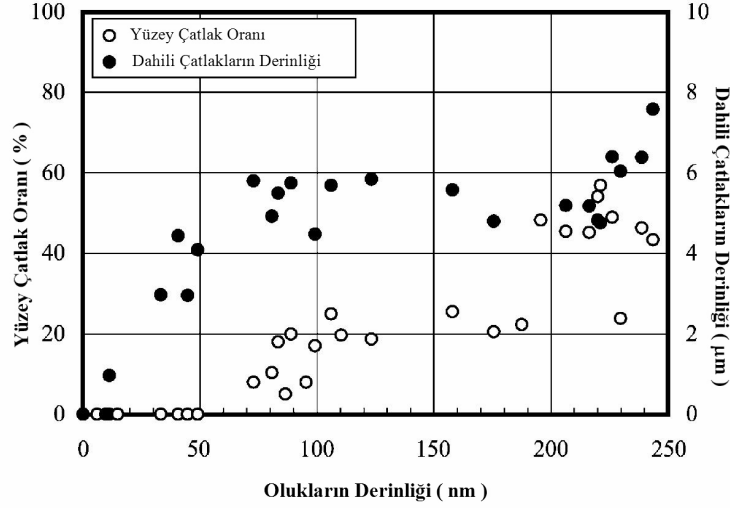
Ortanca çatlak olarak bilinen alt yüzey çatlaklarının, yüzey çatlaklarından evvel üretilmeye başladığı düşünülmektedir. Bu alt yüzey çatlakları, çatlaksız görünen yüzey gözlemlerinden kolay anlaşılır değildir. Şekil 2.64, 700 *m/dak.* kesim hızında, talaş kaldırılmış yüzeyin tarama lazer mikroskobu (SLM) görüntüsünü verir. Şekil 2.64 (a), görünüşte çatlaksız olan talaşlanmış oluğun yüzeyinin görüntüsüdür. Bununla birlikte, Şekil 2.64 (b); çapraz olarak bölünmüş ve dağlanmış yüzeyin; alt yüzey çatlaklarının olduğunu gösterir. Şekil 2.64 (a)'ya göre, çatlaksız kesim başarılı görünmekle birlikte; Şekil 2.64 (b), alt yüzey çatlaklarının oluklar altında ilerlediğini gösterir.



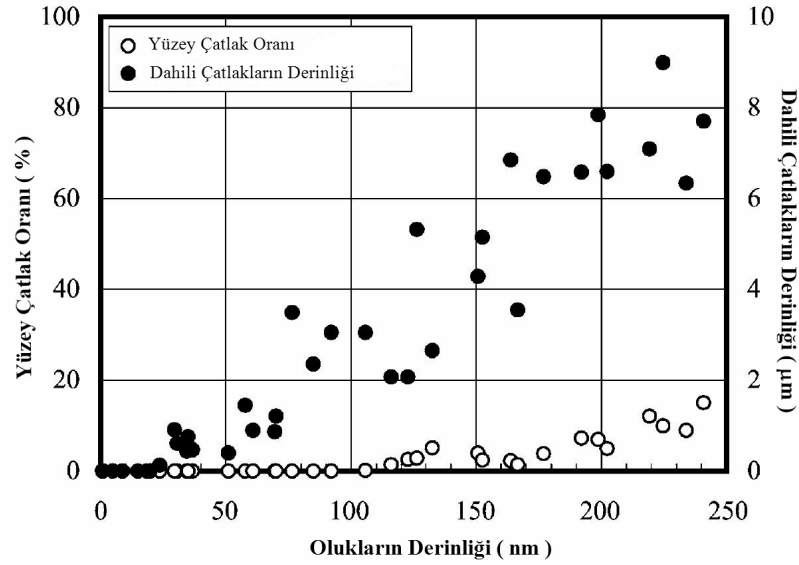
Şekil 2.64 Çapraz bölünmüş ve dağlanmış yüzeydeki yüzey altı çatlakların tarama lazer mikroskobu (SLM) resimleri [55]

Sırasıyla 170 ve 700 *m/dak.* kesim hızlarında talaşlanmış oluklar için; yüzey çatlaklarının oluk derinliği oranıyla, alt yüzey çatlaklarının derinliğindeki değişimler, Şekil 2.65 ve Şekil 2.66'da gösterilir. Yaklaşık olarak 50 ve 100 *nm* 'den daha küçük derinlikli oluklar çevresinde sırasıyla 170 ve 700 *m/dak.* kesim hızlarında, yüzey çatlakları gözlemlenmemiştir. Oluklar bu değerlerden daha derin olduğunda; yüzey çatlak oranı yavaş yavaş artış göstermektedir. Yüzey çatlaklarına dayanan sünek-gevrek geçiş noktaları, kendi kesim hızlarında, yaklaşık olarak 50 ve 100 *nm* olacaktır. Yani, geçiş noktaları kesim hızına bağlıdır. Kırılgan çatlama için kritik koşul; gerilmiş hacim içinde depolanan gerinim enerjisinin; gelişen bir çatlak alanı için gerekli, yüzey enerjisini sunmaya yeterli hale gelmesidir. Görece yüksek hızda kesim, çatlaksız yüzey menziline genişletir ve (görece yüksek hızda kesimin) alt yüzey çatlakları üretmesi olarak dışıdır. Diğer

taftan; derinlik, yukarıda bahsedilen geçiş noktasından daha küçük olsa bile, alt yüzey çatlakları, kesim oluklarının altında üretilir. Alt yüzey çatlaklarınca belirlenen yumuşak-kırılğan geçiş noktasının, yüzey çataklarınca belirlenenden (sünek-gevrek geçiş noktasından) daha yüzeysel olduğu açıktır. Bu sebeple, alt yüzey çatlakları özellikle bitirme işleminde önemlidir.



Şekil 2.65 170 *m/dak.* kesim hızlarında talaşlanmış oluklar için; yüzey çatlağının oluk derinliği oranıyla, alt yüzey çatlaklarının derinliğindeki değişimler [55]



Şekil 2.66 700 *m/dak.* kesim hızlarında talaşlanmış oluklar için; yüzey çatlağının oluk derinliği oranıyla, alt yüzey çatlaklarının derinliğindeki değişimler [55]

Tarama elektron mikroskobu alışımlı yüzey çatlağı bulma tekniğı olmakla birlikte tarama kuvvet mikroskobu (SFM) kadar yüksek yatay çözünürlüğe sahip olmakla birlikte, derinlik profillerini bulamaz. Tarama kuvvet mikroskobu (SFM) bu nedenle, hem yüzey çatlak oranını ölçmede hem de nanometre ölçekte çözünürlükle, talaşlanmış olukların derinlik profilini ölçmede uygundur. Akustik mikroskop da alt yüzey çatlaklarını bulmada kullanılmış ancak, birkaç mikrometre aşağıda, profili ve alt yüzey çatlaklarının konumunu ölçemiyor. Böylece mikrometre altı menzilde, alt yüzey çatlaklarını ölçmek için; talaş kaldırılmış numunenin çapraz bölünmesi ve yüzeyin, mikrometre altı menzilde yüksek dikey ve yatay çözünürlüklü yeteneğine sahip tarama lazer mikroskobu (SLM) ile gözlemi gerekmektedir.

Sonuç olarak, alt yüzey çatlaklarınca belirlenen sünek-gevrek geçiş noktası, yüzey çatlakları tarafından belirlenen geçiş noktasından daha yüzeyseldirler. İş bu sebeple, alt yüzey çatlaklarının tahmini özellikle bitirmede önemlidir. İki farklı kesim hızı kıyaslandığında, görece yüksek hızlı kesimin; çatlaksız yüzey menziline genişlettiğı görünür ve alt yüzey çatlaklarına sebep olmasının olanaksız olduğı düşünülmektedir [55].

3. SİMÜLASYON TEKNİĞİNİN İNCELENMESİ

Simülasyon, bir sistem veya duruma ait davranışı tanımlayan matematiksel ve mantıksal modelleri içeren nümerik bir metottur. Bilgisayar simülasyonlarının amacı, gerçek sistemlerin özelliklerinin elde edilmesi ve verilen bir potansiyel yoluyla etkileşen küçük parçacık sistemlerine ait model sistemlerin test edilmesidir.

Bilgisayar simülasyonları kullanılarak ideal hale getirilen teoriler basit modellerle test edilebilir. Bunun yanı sıra bilgisayar simülasyonlarından elde edilen sonuçlar gerçek deneylerle de karşılaştırılabilir. Böylece bilgisayar simülasyonunda kullanılan temel model test edilir. Eğer model iyiye, deneysel sonuçlar bilgisayar simülasyonları kullanılarak açıklanabilir ve yapılan deneyler mikroskobik seviyede anlaşılabilir.

Bilgisayar simülasyonları, deney yapılarak incelenmesi çok zor veya mümkün olmayan (yüksek sıcaklık plazması, hızlı iyon iletimi, enzim hareketi,... gibi) sistemler hakkında temel fikirler elde etmek için de kullanılabilir.

Bir fiziksel sistemin bilgisayar simülasyonunun yapılabilmesi için öncelikle ideal modelin geliştirilmesi gerekir. Bu model, sistemin başlangıç konfigürasyonunu ve parçacıklar arasındaki etkileşimi tanımlayan bir potansiyel içerir. Modeli bilgisayarda gerçekleştirebilmek için ise bir algoritma veya yöntem gereklidir. Algoritma oluşturulduktan sonra simülasyonu yapılan parçacıkların veri analizleri gerçekleştirilir [56].

3.1 Sistem Yaklaşımı ve Simülasyon

3.1.1 Sistem ve Simülasyonun Tanımlanması

Bilimlerdeki aşırı uzmanlaşma, verimlilik kavramının önem kazanması, otomasyon, problemin çok boyutlu ve karmaşık hale gelmesi gibi nedenlerle çeşitli disiplinlerdeki arayışların neticesi olarak yeni bir yaklaşım doğmuştur. Bu yaklaşım sistem yaklaşımı veya yöneylem araştırması yaklaşımı olarak da adlandırılmaktadır [16].

Sistem, arařtırmacılar tarafından bir veya daha çok amaca veya sonuca ulaşmak üzere aralarında ilişkiler olan fiziksel veya kavramsal, birden çok bileşenin oluşturduğu bir bütün olarak tanımlanmaktadır.

Yöneylem arařtırması ise sistem yaklaşımı ile paralel olarak sistemde ortaya çıkacak problemlere en iyi çözümü bulmak için, sistemin kontrol edilebilen bileşenlerine, çeşitli yöntem, teknik araçların uygulanması olarak tanımlanmaktadır.

Bu yaklaşımlardaki temel amaç; sistemin ve sistemdeki problemlerin belirlenmesi, daha sonra da sistemin tanımından hareketle sistemdeki problemin bir bütünlük içerisinde ele alınıp olabilir çözüm seçeneklerinin geliştirilmesidir. Bu çözüm seçeneklerini belirlemede etkin olarak kullanılan bir teknikte simülasyon tekniğidir [50].

Simülasyon, genişletilmiş zaman periyodu içinde, mantıksal ve matematiksel ilişkiler içerisindeki karmaşık gerçek hayat sistemlerinin yapısını, davranışını incelemek ve açıklamak için olayı bilgisayar ortamında canlandırıp, olay üzerinde kontrol kurma gayretlerinin bütünüdür. Yani, yöneticilerin karar almalarında alternatifleri daha iyi görebilmeleri için kararlarına temel oluşturacak iyi bir araçtır [28].

Bir başka tanıma göre; “Bir sistemin simülasyonu, bu sistemi temsil edebilecek bir model oluşturma işlemidir” [15].

Başka kaynaklar ise simülasyonu aşağıdaki şekilde tanımlamışlardır:

“Simülasyon gerçek sistemin modelinin tasarlanması ve bu model ile sistemin işletilmesi amacıyla yönelik olarak, sistemin davranışını anlayabilmek veya değişik stratejileri değerlendirebilmek için deneyler yürütülmesi sürecidir.”

“Simülasyon geliştirilen veya yeniden düzenlenen sürecin proses işlemlerini tamamlamada ve deneme çalışmalarını yürütmeye ve süreçlerin hata zamanlarını tahmin etmek için yapılan deneysel çalışmadır. Yeni sürecin değişikliklere gösterdiği olası reaksiyonları da anlayabiliriz.”

Simülasyon; önerilen veya gerçek dinamik bir sistemin modellenmesi ve zaman içindeki davranışın gözlenmesi işlemidir. Bir simülasyon çalışması, herhangi bir sistemin davranışının incelenmesi ve farklı parametrelerin çalışma durumuna etkilerinin araştırılması amacı ile yapılır. Simülasyon çalışmalarında uygulanan iki adım; model tasarımı ve deneylerdir. Model tasarımı sistemin tüm önemli durumlarını temsil eden bir modelin kurulmasıdır. Geçerli bir model kurulduktan sonra deneyler kısmı baslar. Simülasyon genellikle mevcut olmayan veya pahalı ve zor gerçekleştirilebilecek sistemlerin denenmesine imkan sağlar [75].

Simülasyon çalışması problem çözümede son derece güçlü bir yardımcı olup, yaygın kullanımının çeşitli nedenleri vardır. Bunlar şu başlıklar altında derlenebilir:

- Karmaşık yapıdaki gerçek sistemleri analitik olarak inceleyerek matematiksel modellerin kurulmasındaki güçlükler.
- Simülasyon; yeni politikalar, parametreler veya çalışma koşullarının denemesine imkan sağlayarak sistem performansının bu yeni koşullar için tahmini sağlar.
- Alternatif dizaynların birbiri ile karşılaştırılmasını mümkün kılar.
- Gerçek sistemin rahatsız edilmeden, bozulmadan, tehlikeye atılmadan denenmesi sağlanır.
- İncelenen sistemin farklı zaman akışlarında ele alınması mümkündür. Örneğin sıkıştırılmış bir zamanda çalışma hızlandırılarak sistem hakkında genel bilgi elde edilebileceği gibi, geniş bir zaman aralığında sistem hakkında ayrıntılı bilgi edinme mümkün olabilir.
- Simülasyon modeli üzerinde daha sonra yapılacak analiz için veri, çoğu kez gerçek hayatta olduğundan daha ucuz elde edilir.
- Simüle edilen sistemin ayrıntılı gözlemi, sistemin daha iyi anlaşılmasını, daha önce görülmemiş eksikliklerinin giderilebilmesini, daha etkin fiziksel ve operasyonel bir sistemin kurulmasını sağlayabilir.

Bu avantajlara rağmen, simülasyon çalışmalarının bazı dezavantajlarının da belirlenmesi gerekir:

- Simülasyon modelleri pahalı ve geliştirilmesi zor modellerdir.
- Simülasyon modellerinin stokastik yapısı, gerçek sistemle ilgili ancak tahminlerde bulunmayı sağlar.

- Simülasyon modelleri probleme en iyi çözümü bulmak yerine alternatif çözümleri karşılaştırır.
- Simülasyon sonuçlarının incelenen sistemi doğru yansıtması için modelin geçerliliği çok önemlidir.
- Simülasyonda bilgisayara olan bağımlılık, çalışmanın uzun sürmesine pahalı olmasına neden olur [75].

3.1.2 Statik Simülasyon Modelleri

Bir sistemin bir andaki veya dönemdeki durumu söz konusu ise buna ilişkin olarak (zaman boyutunu içermeyecek biçimde) kurulan model statik bir model olacaktır. Genellikle statik simülasyon modelleri Monte-Carlo simülasyonu olarak adlandırılmaktadırlar.

Statik modellerde zaman değişkeni tam olarak ele alınmaz. Yöneylem araştırmalarında sınırlı bekleyişler ile doğrusal programlama, doğrusal olmayan programlama ve oyun teorisi alanlarındaki çalışmaların birçoğu statik modellerle ilgilidirler. Statik modellerin analizinde simülasyon tekniğinin kullanılmasının amaçlarından biri de statik modellerin hemen hemen tamamının deterministik olması ve çözümlerinin belirli bir doğruluktaki analitik teknikler yardımı ile bulunabilmesidir.

3.1.3 Dinamik Simülasyon Modelleri

Zaman üzerinde gelişen sistemlerin gösterimini sağlayan simülasyon modellerine dinamik modeller adı verilmektedir.

Bu modeller zaman değişimi ile karşılıklı olarak etkileşimi olan matematiksel modellerdir. Bu modeller kendi aralarında aşağıdaki gruplara da ayrılabilirler:

- Statik ve durağan
- Statik ve tarihsel
- Dinamik ve nedensel
- Dinamik ve tarihsel

- Stokastik ve tarihsel olmayan
- Stokastik ve tarihsel

3.1.4 Deterministik Simülasyonlar

Davranışı daha önceden tahmin edilebilen ve gelecekte ne tür davranışlara gireceği bilinen modeller deterministik modellerdir. Deterministik modeller de ne dışsal (eksojen) ne de içsel (endojen) değişkenler tesadüfi değişken olarak tanımlanırlar ve işlem karakteristikleri olasılık yoğunluk fonksiyonlarından ziyade tam ilişkili oldukları varsayılır. Deterministik modellere örnek olarak tüm hastaların randevu saatlerine göre geldikleri bir dişi muayenesini gösterebiliriz.

Deterministik simülasyon modeli şematik bir şekilde aşağıdaki gibi girdi ve çıktı ilişkisine sahip genel bir kara kutu olarak gösterilebilir.



Şekil 3.1 Deterministik simülasyon modeli [50]

Bu sistemin (kutuların) daha iyi karakterize edilebilmesi için, elemanlar, elemanların özellikleri ve ilişkiler ayrımlarından yararlanmak gerekmektedir.

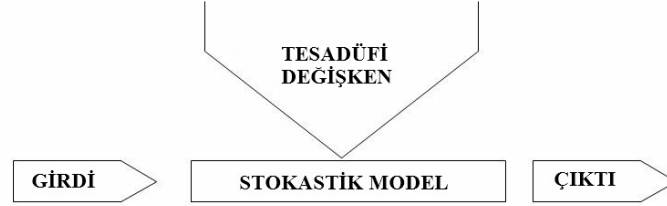
3.1.5 Stokastik Simülasyonlar

Davranışı daha önceden bütünüyle kestirilemeyen modeller stokastik modellerdir. Yani, bazı olayların hangi olasılıklarla meydana geleceği hakkında çeşitli söylemler oluşturulabilir.

Bu tip modellerde girdi değerleri ve süreç, olasılık dağılımları ile temsil edilebilmektedirler.

Stokastik modeller deterministik modellerden daha karmaşık olduğu için bu modellere çözümler bulmak ve bulunan çözümlerin analitik olarak yeterli olması oldukça güçtür. Bu açıdan simülasyon tekniği stokastik modellerin analizi ve çözümünde en çok başvurulan temel

tekniklerden biri olmuştur. Bu şekildeki simülasyon modelinin aşağıdaki kutu sistemi ile ifade edebiliriz.



Şekil 3.2 Stokastik simülasyon modeli [50]

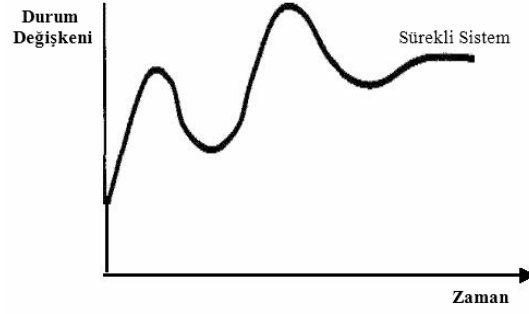
Deterministik modellerin aksine burada özellikleri tesadüfi değişkenler ile açıklanabilen ilave elemanlar ortaya çıkmaktadır. Bu şekildeki elemanların özellikleri bir tesadüfi deneyin sonuçları olarak tespit edilebilmektedir.

3.1.6 Sürekli Modeller

Sürekli simülasyonda zaman içerisinde her noktada sistem takip edilir. Sürekli ve kesikli simülasyon modellerinin her ikisinde de en son amaç simüle edilen sistemin davranışını açıklamak için kullanılacak uygun istatistikleri toplamaktır.

Sürekli sistemlerde, durum değişkenleri zaman üzerinde sürekli değiştiğinden dolayı, istatistikler yalnızca sistemdeki durumu sürekli bir şekilde gözlemleyerek elde edilir [50]. Bu sistemlere örnek olarak, bir barajdaki su yüksekliği gösterilebilir. Yoğun yağmur yağışından sonra sular, barajın arkasındaki göle akmaktadır. Su baskınını kontrol etmek ve elektrik üretmek için sular barajdan çekilmelidir. Burada, buharlaşma da su düzeyini azaltmaktadır. Böylece, durum değişkeni olan barajdaki su yüksekliğinde, bu etkiler altında sürekli bir değişim olmaktadır. Şekil 3.3’de sürekli durum değişkeninin bir zaman periyodunda nasıl değiştiği görülmektedir [75].

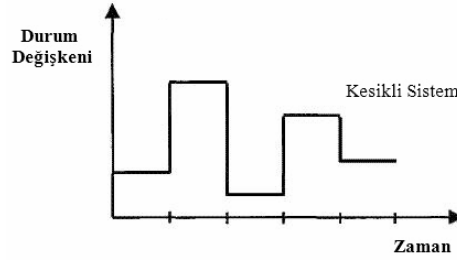
Bu değişkenler zaman süresince sürekli bir şekilde değiştiğinden bu yönüyle kesikli durumdakilerden farklılaşmaktadırlar. Sürekli simülasyonun yerine getirilmesi temelde doğrudan doğrudur ve buradaki simülasyon dilinin rolü görevlerin hazırlanmasında çeşitli kolaylıklar önererek modelin yorucu hesaplamalarını azaltmaktadır [50].



Şekil 3.3 Durum değişkenini sürekli sistemdeki değişimi [75]

3.1.7 Kesikli Modeller

Zaman içerisinde kesikli veya sayılabilir noktalarda sistemin temel değişkenlerinin değerleri değişime uğruyorsa bu sistemler kesikli sistemler olarak tanımlanmaktadır. Bir banka kesikli sisteme örnek olarak gösterilebilir. Çünkü durum değişkeni (bankadaki müşteri sayısı), bir müşteri geldiğinde veya müşteriye verilen servis tamamlandığında değişmektedir. Şekil 3.4'de kesikli durum değişkeninin bir zaman periyodunda nasıl değiştiği görülmektedir [75].



Şekil 3.4 Durum değişkeninin kesikli sistemde değişimi [75]

Kesikli sistemlerin simülasyonlarında, simülasyon zamanı içerisinde yalnızca seçilen belli noktalarda simüle edilen sisteme bakılır ve veriler toplanır. Verileri toplarken kullandığımız yöntem simülasyonun kesikli mi yoksa sürekli mi olduğuna karar vermede ana etkidir. Yani, kesikli sistemlerde durumun istatistikleri yalnızca bazı olaylar meydana geldiğinde değişebilir. Bu durumda yalnızca böyle olaylar meydana geldiğinde sistemi gözlemeye ihtiyacımız vardır. Diğer zamanlarda, sistem durgun vaziyette olduğundan istatistikleri toplama açısından gözlem yapmaya gerek yoktur.

“Kesikli Simülasyon” isminin kaynağı, zaman aralığında istatistikler bir noktadan diğer bir noktaya atlanarak toplandığından oluşmaktadır. Kesikli simülasyonda, modelin geliştirilmesi için yüksek derecede kullanıcının yaratıcılığına ihtiyaç duyulmaktadır. Kesikli modellerin yerine getirilmesini ve oluşturulmasını kolaylaştıracak, özel avantajlar sağlayan geliştirilmiş üç tane kesikli simülasyon yaklaşımı vardır.

- ✓ Sonraki olayların planlanması,
- ✓ Faaliyetlerin taranması,
- ✓ Yöntem-uyum yaklaşımı

Bu üç yaklaşımda, anahtar olayların meydana gelişlerinde istatistiklerin toplanması genel görüşü temeline dayandırıldığını belirtmekte fayda var. Bu yaklaşımları görünürde birbirinden farklı kılan şey, kullanıcı adına yaklaşımlardaki otomatikleşmenin ne kadar performans gösterdiği (hesaplama ve mantıksal kararlarda) yani ne kadar detaylı çalışmanın yapıldığıdır [50].

3.1.7.1 Sonraki-Olayların Planlanması (Next-Event Scheduling)

Buradaki ana düşünce, bir sonraki olay gerçekleşinceye kadar belli bir zaman dilimi içerisinde ilerleyerek gelecek olayın tipine bağlı olarak uygun olan durumların (pozisyonun) alınmasıdır. Olay meydana geldiğinde bu hareketlerin hepsinin tamamlanmış olması ve meydana gelecek olasılıklar için bütün hesaplamaların yapılmış olması gerekmektedir.

Sistemdeki istatistiklerin, sisteme bir giriş (varış) olayının gerçekleşmesi veya sistemden bir çıkış (ayrılış) olayının meydana gelmesi durumunda değişimi söz konusu olmaktadır. Bu veri elemanlarını simüle ederken sabit veya çoğu zaman durumu tanımlayan olasılık dağılımlarından örnekler alınmaktadır. Bulduğumuz zaman itibarı ile iç varış ve servis zamanlarının korunduğu varsayılmaktadır.

Sonraki olayların planlanması yönteminde başlangıç olarak zaman aralığındaki birinci olay seçilip, o zaman aralığında sırasıyla bütün yeniden çıkarılan olayların yerleştirilmesini de içeren bütün faaliyetler hazırlanmalıdır. Daha sonra, güncellenen zaman aralığındaki olay ile bir sonraki olay seçilir ve onun faaliyetleri hazırlanır. Bu işlemler gerekli olan simülasyon zamanına ulaşıncaya kadar tekrarlanmalıdır.

Simülasyon normalde bilgisayar ile yapıldığı için, olaylar listesi her satırın bir olay ile birleştirilmesi şeklinde iki boyutlu bir düzende depolandığı (sabit ebatta) düşünülmelidir. Sütunlar ise olayın tipini ve meydana geliş zamanını göstermelidirler.

Dolayısı ile yeni olayların depolanması, daha önce incelemeye alınan olaylar için kullanılan yapmacık metodun silinmesi, önceki olayların silinen yerlerine kullanılacak yeni olayların kaydedilmesidir. Olayların kronolojik bir sırada gibi yerleştirilmiş olarak tutulması için sistem göstergelerinin kullanılması gerekmektedir.

Sonraki-Olay simülasyon tekniği, dizi halinde meydana gelen olaylardan ziyade uyumlu bir şekilde meydana gelen çeşitli stokastik olaylara uygulanabilmektedir. Bu teknikte zaman, meydana gelen bir olayın zamanından sonraki bir olayın zamanına ilerletildiğinden, Sonraki-Olay yaklaşımı daha çok kesikli olayların simülasyonlarında kullanılmaktadır. Simülasyonun başlangıç şartları tahmin değerlerini büyük ölçüde etkilediğinden, etkiyi azaltmak için simülasyon süresinin mümkün olduğu kadar uzun tutulması gerekmektedir.

Sonraki olayın planlanması yaklaşımında zaman ilerletme olayını iki şekilde tanımlayabiliyoruz. Birincisi, sabit-zaman artırımı (fixed time incrementation), ikincisi ise, adımsal-faaliyet artırımı (event-step incrementation) veya değişken-zaman artırımıdır (variable-time incrementation).

Birinci durumda, olayların belirlenen bir periyot esnasında zamanı gelince, verilen bir noktada meydana geldiği varsayılmaktadır. Her periyodun başlangıcında girdi verileri alınmalı ve periyodun sonunda alınan bu veriler tekrar rapor edilmelidir. Bu yöntemle simülasyon zamanının tutulmasına Sabit-Zaman artırımı (Fixed-Time Incremenatation) adı verilmektedir. Eğer çoğu periyotlarda bazı olaylar meydana geliyorsa veya eğer her periyotta kesin belli bir zamanda meydana gelen bir olay simüle edilen işlemlerin verimliliğini önemli derecede etkiliyorsa bu yöntem elverişlidir.

İşletmenin performansının önemli bir unsuru olan, çeşitli olayların meydana geldiği, kesin bir zamanın mevcut olduğu birçok dinamik durum vardır. Bu bekleme hattı problemlerinin bir durumudur veya çoğu periyodunda hiç olay meydana gelmeyen problemler içindir. Simülasyon

zamanını bir sabitle (genelde küçük) ilerletmekten ziyade, her olayın işlemi tamamlandıktan sonra, simülasyon zamanını, simülasyonda bir sonraki en yakında meydana gelecek olayın planlanan zamanına ilerletilmektedir. Bu şekilde zaman ilerletme Adımsal-Faaliyet artırımı (Event-Step Incrementation) veya Değişken-Zaman artırımı (Variable-Time Incrementation) olarak adlandırılmaktadır.

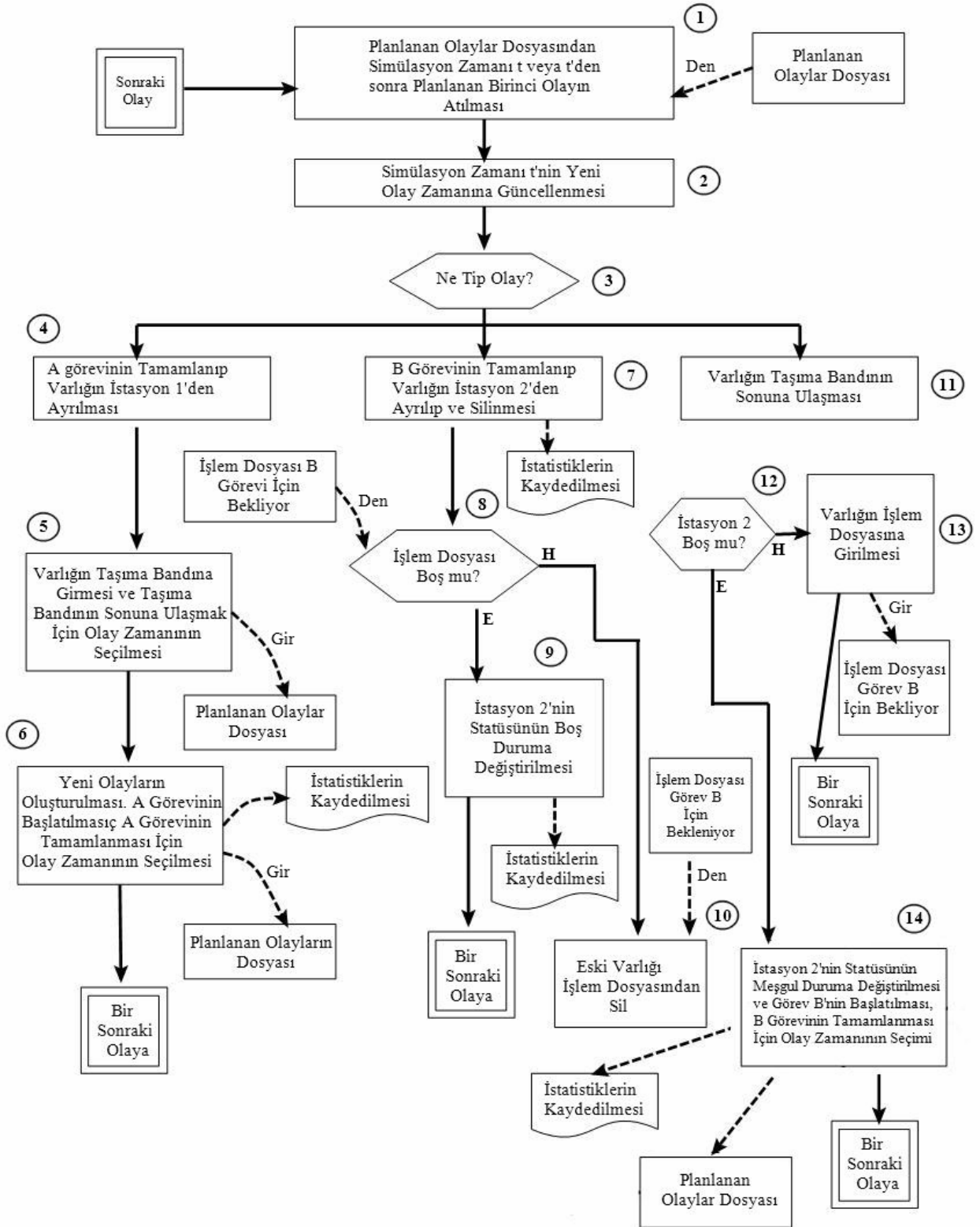
Değişken-Zaman artırımını kullanarak uygulanan bir simülasyonunun akış diyagramı Şekil 3.5'te ki gibi geliştirilmiştir. Burada zaman bir gün baz alınarak bütün olayların önceden belirlenmiş sabit bir dizi halinde her periyotta meydana geldiği varsayılmaktadır. Burada bütün olaylar baştan sona kadar kontrol edilerek akış diyagramının sonuna ulaşılmakta ve simülasyon zamanı bir periyot ilerletilerek tekrar başlangıca dönülmektedir. Bu işlemlere belirlenen periyot sayısına ulaşıncaya kadar devam edilmektedir. Adımsal-Olay artırımı kullanılan simülasyonlar için çok yönlü döngülü bir yapı kullanılması daha elverişli olmaktadır. Her döngüde simülasyon üç safhadan geçmektedir.

A safhasında, simülasyonda ki bir sonra meydana gelecek en yakın olay tespit ediliyor. Eşitlikler bazı uygun öncelik kurallarına göre kırılabilir. B safhasında, simülasyon işlemleri tamamlanıyor veya belirlenen olaylardan şartsız olarak ortaya çıkan faaliyetler başlatılıyor. C safhasında ise, diğer olayların tamamlanmasına veya başlamasına yol açacak şartların sağlanıp sağlanmadığı kontrol ediliyor.

3.1.7.2 Faaliyetlerin Taranması (Activity Scanning)

Faaliyetlerin taranması yaklaşımı Sonraki-Olay planlaması yaklaşımına çok benzerdir. Bu simülasyonda model kurucu üç olayla ilgilenmektedir.

Birinci olayda sisteme giren varlıklar sıraya koyulur ve bir sonraki sisteme girecek olayın planlaması yapılır. İkinci olayda, sistemdeki işlemlerin tamamlandığı ve sistemin boş olduğu belirtilir. Üçüncü olayda ise, yeni bir giriş için servis başlatılır, bir sonraki varlık sıraya alınır ve işlemleri biten varlığı sistemden ayrılışı gerçekleştirilir.



Şekil 3.5 Adımsal-Olay artırımı için akış diyagramı [50]

Sonraki-Olayın planlaması yaklaşımında olduğu gibi, faaliyetlerin gözden geçirilmesi yaklaşımında da zamanın geliştirilmesi veya iletilmesi sisteme giriş ve çıkış olayları tarafından kontrol edilmektedir. Ana farklılık olayların faaliyetlerini tamamlarken usulde meydana gelmektedir. Sonraki-Olayın planlanması yaklaşımında, olayın meydana gelişi, olayın şartlı veya şartsız faaliyetlerinin tümünün detaylı bir şekilde ifasından sonuçlanmaktadır. Faaliyetlerin gözden geçirilmesinde ise yalnızca şartsız faaliyetler icra edilmektedir. Bütün şartlı faaliyetler, gerçek bir olay meydana geldikten sonra icra edilme olabirliği gözden geçirilmesi gereken faaliyetlere aktarılmaktadırlar. Bu sebepten dolayı, faaliyet icra edilmeden önce bütün faaliyetler sağlanması gereken şartlar kümesi ile tanımlanırlar.

Faaliyetleri gözden geçirme yaklaşımının avantajı daha sade bir yapısının olmasındandır. Dezavantajı ise bir olayı icra etmeden önce bütün faaliyetlerin gözden geçirilip, onların şartlı faaliyetlerinin icra edilip edilemeyeceğinin kontrol edilmesidir. Doğrusu, orijinal faaliyetleri gözden geçirme yaklaşımı, bütün gerçek ve şartlı faaliyetleri tek bir faaliyetler listesi yapmak için gündeme getirir ve her defasında icra edilebilir bir şartlı faaliyetin olup olmadığından emin oluncaya kadar tekrar tekrar gözden geçirilmesini sağlar.

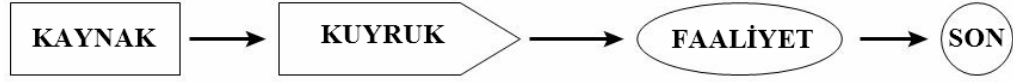
Böyle bir yolun takip edilmesinde gerçek olayların kronolojik bir sırada tutulmasına ihtiyaç yoktur. Bu yol hesaplama açısından pek kullanışlı değildir. En azından şartlı ve şartsız faaliyetlerin ayrı ayrı listelerde yerleştirilmesi durumu geliştirilebilir. Bu yaklaşımın sıkıcı hesaplamaları onun avantajlarını da yok ettiğinden araştırmacılar ve uygulamacılar tarafından pek fazla tercih edilmemektedir [50].

3.1.7.3 Amaca-Uydurma Yaklaşımı (Object-Oriented Approach)

Amaca-Uydurma yaklaşımı ilk iki yaklaşımdan, modeli oluştururken kullanıcı tarafından harcanan çabayı minimize etmesi açısından farklılaşmaktadır. Bunu açıklamak açısından tek servisli bir modeli ele alacak olursak, sistemi üç aşamada tanımlayabiliriz.

- **Kaynak:** Sisteme girdilerin hazırlanması
- **Kuyruk:** Sistemdeki bekleme disiplini ve düzenini sağlamak
- **Faaliyet:** Servisin tamamlanmasını sağlamak

Bunu şekil yoluyla açıklayacak olursak;



Şekil 3.6 Amaca-Uydurma yaklaşımı [50]

Bu metot da işlemci kendi içinde olayların planlanması yaklaşımının yolunu izlemektedir. Amaca uydurma simülasyonunun da belirgin avantajı yine sadeliğidir. Kullanıcı modelin verilerinin özet kapsülünü temin etmekte ve bu da faaliyetlerin icrasını bütünüyle hafifletmektedir. Bunun dezavantajı ise, daha önceden belirlenmiş şartlara dayanılarak geliştirilen işlemlerin zamanla çok tek düze kalması ve karmaşık durumlardaki çeşitli modellere uyum gösterememesidir. Buna ilaveten, zekice geliştirilecek olan bir işlemci, gerçek hayatta meydana gelecek durumların çoğuna cevap verecek duruma getirilebilir.

3.2 Simülasyon Modelinin Formülasyonu

3.2.1 Problemin Belirlenmesi

Simülasyon denemesini planlamadan önce gerçekleştirilmesi gereken olay araştırmanın açık olarak tanımlanmasıdır. Bu aşama simülasyon uygulaması boyunca problemin yeniden ifade edilmesini gerektirebilir.

Bu safha da sistem modelinde nelerin kapsanıp kapsanmayacağını tanımlanmasına yer verilmelidir. Yani, sistemin sınırları ile detaylarının düzeyleri belirlenmelidir. Burada ki amaç sistemin nasıl parçalara ayrılıp sistemin detayına ne kadar girileceği veya benzer sistem elemanları arasındaki ayrımların nasıl yapılacağıdır.

Model kurma yöntemindeki ikinci adım, modeli planlamak ve simülasyon modelini kurmaktır. Geçerli bir simülasyon modelini geliştirmenin yolu, modeli kurulacak sistemin işleyişini iyi anlamak ve sistemin davranışını etkileyen rasgele değişken değerlerini meydana getirme kabiliyetidir.

Bu safha da modelin gerek sistemin bir gsterici olması iin gerekli olan verilerin elde edilmesi gerekmektedir. Modelin detayı ne kadar fazla ise veya alanı ne kadar geniř ise veri toplama problemi de o kadar byk olmaktadır.

Model kurulurken dikkate alınması gereken diđer bir nemli faktr, model ile test edilen karar alternatiflerinin tipidir. Eđer detayına inilmiř kararlar test edilecekse, byle kararlara temel oluřturmak iin modelin verileri de gerekli olan detay seviyesinde olmalıdırlar.

Model, amacına bađlı olarak sistemin genelinin yalnızca belli bir alt sistemini ya da alt sistemlerin iřleyiřini temsil edecek bir řekilde de formle edilebilir. Model teřkil safhasında stokastik elemanların veya rastsal deđiřkenlerin belirlenmesi gerekli olup, rastsal deđiřkenlerin davranıřını aıklayan dađılım fonksiyonu belirlenmelidir.

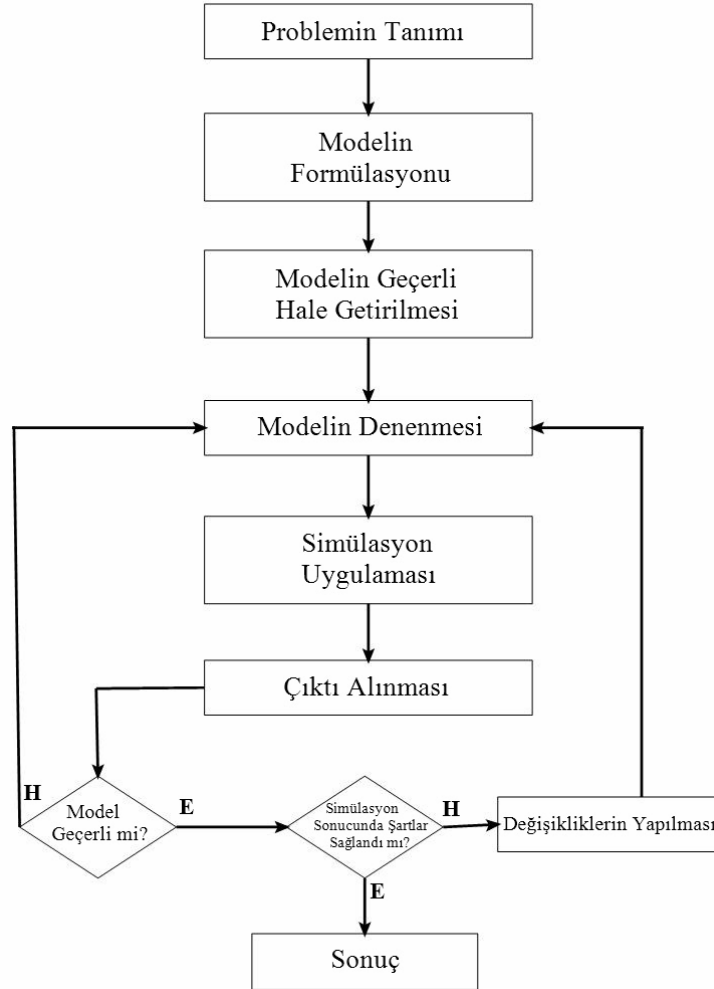
Aynı zamanda simlasyon modelini kurmak ve modeli denemede kullanılacak istatistiksel yntemi tanımlamak gerekmektedir. Simlasyon, rnekleme deneylerinin bir gerek sistem zerindeki bir modelle iliřkisinin sađlanmasını gerektirdiđinden, simlasyonun sonuları rnek gzlemler veya rnekleme istatistikleridir. Buradaki istatistiksel analizin amacı, elde edilen sonulardan, denenen model řartlarının ve durumlarının istatistiksel bir ıkarım yapmak iin yeterli olduđundan ve modeli yeterli derecede temsil ettiđinden emin olmaktır. Bir simlasyon modelleme yntemi řekil 3.7’de grlen akıř diyagramındaki yolu takip etmelidir.

3.2.2 Verilerin Toplanması ve İřlenmesi

Modeli oluřturacak herhangi bir problem tanımlanmadan nce yeterince verinin derlenmesi ve iřlenmesi geređi vardır. Bilgisayarda yapılacak bir simlasyon projesini bařarabilmek iin ařađıdaki faktrler dikkate alınmalıdır.

- Kantitatif veriler nceden hazır hale getirilmelidir.
- Anlamlı bir dzeye indirgenen verilerin, sistemin davranıřlarını arařtırmak iin matematiksel bir model kurmaya imkan verip vermediđi kontrol edilmelidir.
- Veriler simle edilmekte olan sistemin matematiksel modelini iyileřtirmek iin uygun olmalıdırlar, yani bu deđiřikliđe imkan tanınalıdırlar.

- Verileri sistemin durum deęişkenlerinin çalışma karakteristiklerinin parametrelerini tahmin etmek için kullanılabilir özellikte olmalıdırlar.
- Veri olmaksızın simülasyon modellerinin geçerliliğini araştırmanın imkanı yoktur.



Şekil 3.7 Simülasyon modelleme yönteminin akış diyagramı [50]

Stokastik simülasyon modellerinin tasarımında öncelikle tecrübeler dayanan verilerin veya teorik olasılık dağılımlarının kullanılmasına karar verilmelidir. Bu seçim önemli bir aşamadır ve araştırmanın temelini oluşturur. İşlem görmemiş ham verilere göre çalışma geçmişin simülasyonudur. Modelin işlenmesi için gerekli rasgele deęişkenleri üretirken tablolar yerine teorik dağılımların kullanılması sırasında bilgisayar zamanı ve bellek etkin biçimde kullanılmalıdır. Çözümleyici modelinin duyarlılığını çalıştığı olasılık dağılımlarına göre belirlemelidir.

O halde kullanılan veriler geçerlilik, verilerin dağılımı, teorik dağılımlara uygunluk simülasyonun başarısını etkileyen faktörlerdir.

Temelde simülasyon bir deney olduğundan, simüle edilen sistem hakkında uygun istatistiksel sonuçlar çıkarabilmek için, gözlemlerin istatistiksel olarak bağımsız ve aynı şekilde dağılmış olmaları gerekmektedir.

Herhangi bir fiziksel deneyde, çıktı değişkeninin takdiri normalde n tane bağımsız gözlem değerinin ortalaması temeline dayanır. Simülasyonda, simülasyon sisteminin performansının ölçüsünü takdir yine n tane gözleme dayandırılmaktadır.

Simülasyondan bağımsız gözlemlerin elde edilmesi normal bir laboratuvar deneyinden çok daha zordur. Simülasyon deneylerinin ilk çıktılarında sabit-durum olmaz sonra ulaşılır. Burada dikkate alınması gereken şey, gözlemlerin simülasyonun ilk evrelerinde alınmaması gerektiğidir. Çünkü bu safhada edinilen bilgiler büyük değişimlere maruz kalmaktadır, dolayısıyla sistemin gerçek davranışını ortaya koyamayabilirler.

Amaç gözlemleri mümkün olduğu kadar küçük örnekleme hatası ile elde etmek olduğundan, bu sonuca ideal olarak ulaşmak,

- Sabit-durum'a ulaşma şansını yakalamak için uzun müddetli simülasyon uygulaması yapılmasını,
- Simülasyon'un icrasının rasgele sayıların değişik dizinleri ile yapılmasını ve her bir uygulamanın tek gözlemi göstermesi için kullanmayı gerektirir.

Rasgele sayıların değişik dizinlerini kullanmak, sonuç gözlemlerini simülasyon deneylerinde istenildiği gibi, gerekli şekilde bağımsız yapmaktadır. Her ne kadar da sabit-durum şartları altında gözlemlerin elde edilmesi örnekleme hatasını düşürse de, bu gözlemlerin ortalamasını alarak, örnekleme hatasını daha da düşürebiliriz. n tane gözlemin ortalamasının standart sapması

tek tek gözlemlerin standart sapmasının $\frac{1}{\sqrt{n}}$ 'ine eşit olduğundan dolayı bu sonuca varmaktayız.

3.2.3 Bilgisayar Programının Hazırlanması

Simülasyon modelinin bilgisayar ile yapılması şu aşamalardan oluşur:

- Akış diyagramının çizilmesi
- Kodlama
 - Genel amaçlı derleyici
 - Özel amaçlı simülasyon dilleri
- Hataların ayıklanması
- Verilerin kullanılması ve başlama şartları
- Verilerin üretilmesi
- Çıktı raporunun üretilmesi

Akış diyagramının hazırlanmasından sonra özel amaçlı bir simülasyon dilinin kullanılması daha çok bilgisayar zamanından tasarruf sağlamak içindir.

Bilgisayar programının geçerliliğini araştırmak için, bilgisayar çıktısı, bilgisayar uygulamasında kullanılan verileri kullanarak el işlemleri işe yapılan simülasyonun sonuçlarıyla karşılaştırılabilir.

3.3 Rasgele Sayıların Üretilmesi ve Test Edilmesi

3.3.1 Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

Simülasyon modellerindeki stokastik olayların, olasılık dağılımları ile üretilmesi için, rasgele sayılara gereksinim duyulmaktadır. Düzgün rasgele sayılar ile olasılık dağılımlarından rasgele değişkenler aşağıdaki gibi elde edilir.

a) Kesikli Dağılımlar İçin:

Önce verilen dağılımın birikimli olasılık fonksiyonu elde edilir. Sonra rasgele değişkenin her değerine karşılık olan birikimli olasılık değerleri ile orantılı olarak, rasgele sayılar tahsis edilir. Üretilen rasgele sayı hangi aralığa giriyorsa, buna karşılık olan birikimli olasılık, (dolayısıyla rasgele değişken değeri) istenilen rasgele değişkendir.

b) Sürekli Dağılımlar İçin:

Süreç, tamamen kesikli dağılımlardaki gibidir. X , rasgele bir değişken olmak üzere önce,

$$F(x) = P(X \leq x) \quad (3.1)$$

birikimli yoğunluk fonksiyonu elde edilir. Sonra 0 ile 1 arasında değişen düzgün bir rasgele sayı üretilir.

Sonuncu adım, $P(X \leq x)$ 'i rasgele sayıya eşitleyip x 'e göre çözmektir.

Stokastik problemlerin pratik olarak daha kolay hesaplanabilmesi için belirli bir dağılıma uyum gösteren yeterli büyüklükte tesadüfi sayılara ihtiyaç vardır. Tesadüfi sayıların üretilebilmesi için gerekli olan ve kullanılan metodu, tesadüfi sayılar üreticisi olarak adlandırabiliriz. Bir tesadüfi sayı üreticisinde aşağıdaki özellikler bulunmalıdır.

- ❖ Elde edilen rasgele sayıların sonucu, önceden verilen dağılım fonksiyonuna mümkün olduğunca uyum sağlaması gerekir.
- ❖ Takip eden rasgele sayıların tekrar üretilebilmesi imkanı.
- ❖ Bir küme halinde üretilmiş takip eden rasgele sayılar, yeteri kadar büyüklükten sonra tekrar etmesi gerekir.
- ❖ Kısa sürede sayı üretme.
- ❖ Az kayıt yeri işgal etme.

Eğer tablo kullanmadan rasgele sayılar çıkarılacaksa bu matematiksel bir yöntem gerektirmektedir. Bu matematiksel yöntemlerle elde edilen rasgele sayılar Pseudo-Rasgele sayıları olarak adlandırılmaktadırlar. Bu sayılar çeşitli istatistiksel testlerden geçirilerek rasgele oldukları ispatlanır. Her rasgele sayı tekrarlanan bir matematiksel ilişkiden sonra elde edildiğinden, bir önceki rasgele sayıyı tekrar elde etmek mümkündür. Simülasyon açısından sade rasgele sayıları kullanmak yerine Pseudo-Rasgele sayılarını kullanmak daha elverişlidir. Pseudo-Rasgele sayılarını uygulayarak çok sayıda deney yapma imkanı vardır. Bilgisayarların çoğunda rasgele sayılar üreten alt programlar mevcuttur. Bunlara örnek olarak RANDU (ISEED), RN (0) ve RND (x)'i verebiliriz.

3.3.2 Üretilen Sayıların Rasgeleliğinin Test Edilmesi

Stokastik modellerle ilgilenildiği sürece rasgele değişkenler yapay tablolardan veya parametreleri verilen teorik olasılık dağılımlarından elde edilirler. Bilgisayarda rasgele sayı üretildiği zaman rasgele sayılar dizisinin gerçekten rasgele olup olmadığını anlamak için bazı testler uygulanmaktadır. Bunlardan bazıları, frekans testi, seri testi, aralık testi v.b. gibi testlerdir.

Üretilmiş bir sayı dizisinin rasgele olup olmadığını test etmek için önce düzgünlüğünün test edilmesi gerekir. Bu iş için esas olan iki temel test vardır. Bunlar sırasıyla Ki-Kare ve Kolmogorov-Smirnov testleridir. Bu iki testte üretilmiş olan rasgele sayı dizisinin meydana getirdiği örnek dağılım ile teorik düzgün dağılım arasındaki uygunluğun derecesi ile ilgilenir. Aslında bu iki test de rasgele sayıların oluşturduğu dağılım ile teorik dağılım arasında dikkate değer fark olmadığını ifade eden sıfır hipotezine dayanır.

3.3.2.1 Ki-Kare Uygunluk Testi

X^2 testi gözlenen frekanslar ile teorik frekanslar arasında bir karşılaştırma yapmayı esas alır. Bunun için, önceden bir hipoteze göre teorik frekansların hesaplanması gerekir.

Söz konusu kıyaslama yapılırken “tek yönlü tablolar” da,

$$X^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(g_i - t_i)^2}{t_i} \quad (3.2)$$

formülüne ve “çift yönlü tablolar” da,

$$X^2 = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^c \frac{(g_{ij} - t_{ij})^2}{t_{ij}} \quad (3.3)$$

formülüne göre hesaplanır. Burada, g_i ; i 'inci sınıftaki gözlem değeri, t_i ; i 'inci sınıftaki teorik (beklenen) değeri, r ; toplam satır sayısını ve c ; toplam sütun sayısını göstermektedir.

Yukarıdaki hesaplamalarda elde edilen X^2 değeri ile tablodan bulacağımız, $n-1$ serbestlik dereceli ve a , anlamlılık düzeyindeki, $X_{n-1,a}^2$ değeri ile karşılaştırmalıyız. Bunun sonunda,

hesapladığımız X^2 değeri tablodan bulduğumuz $X_{n-1,\alpha}^2$ değerinden büyük ise düzgün rasgele sayı üreticisi şüphe ile karşılanmalıdır.

3.3.2.2 Kolmogorov-Smirnov Uygunluk Testi

Uygunluk testleri genel grupları arasında yer alan diğer bir testte birikimli frekans dağılımını kullanmayı gerektiren Kolmogorov-Smirnov testidir. Bu test 1933'de Rus matematikçisi A. N. Kolmogorov tarafından önerilmiştir. Kolmogorov tek örnek için uyum iyiliği testini önerdikten sonra 1939'da yine bir Rus matematikçisi olan N. V. Smirnov iki bağımsız örnek için uyum iyiliği testini önermiştir. Kolmogorov testi ve Smirnov testi benzerlik nedeniyle uygulamada Kolmogorov-smirnov uyum iyiliği testleri olarak bilinirler.

Bu testin uygulaması ise, X_1, X_2, \dots, X_n , $F(x)$ gibi bilinmeyen bir dağılımdan rasgele çekilmiş verilerdir. Buradaki varsayım, örneklemenin rastsal olduğudur. $F^*(x)$ tamamıyla tanımlanmış bir dağılım fonksiyonu olmak üzere hipotezimizi aşağıdaki gibi tanımlayabiliriz.

Çift taraflı testlerde:

$$H_0 : F(x) = F^*(x) \quad \text{bütün } x \text{ 'ler için} \quad -\infty < x < \infty$$

$$H_1 : F(x) \neq F^*(x) \quad \text{en az } x \text{ 'in bir değeri için}$$

Tek taraflı testlerde:

$$H_0 : F(x) \geq F^*(x) \quad \text{bütün } x \text{ 'ler için} \quad -\infty < x < \infty$$

$$H_1 : F(x) < F^*(x) \quad \text{en az } x \text{ 'in bir değeri için}$$

veya

$$H_0 : F(x) \leq F^*(x) \quad \text{bütün } x \text{ 'ler için} \quad -\infty < x < \infty$$

$$H_1 : F(x) > F^*(x) \quad \text{en az } x \text{ 'in bir değeri için}$$

Hipotezleri böyle tanımladıktan sonra, X_1, X_2, \dots, X_n 'in ampirik dağılımının $S(x)$ olduğunu varsayarsak test istatistikleri T , test istatistiği olmak kaydıyla, aşağıdaki gibi tanımlanır.

Çift taraflı test için;

$$T = \underset{x}{\text{Max}} |F^*(x) - S(x)| \quad (3.4)$$

Tek taraflı testler için;

$$T^+ = \underset{x}{\text{Max}} |F^*(x) - S(x)| \quad (3.5)$$

veya

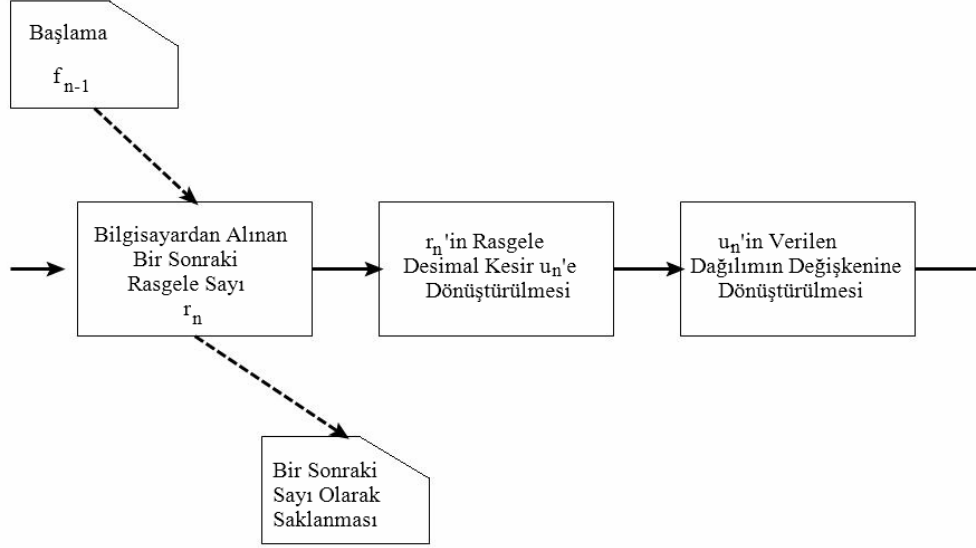
$$T^- = \underset{x}{\text{Max}} |S(x) - F^*(x)| \quad (3.6)$$

Bu test istatistiklerine göre eğer a düzeyinde T , T^+ veya T^- test istatistikleri tablodan aldığımız T_{1-a} değerinden büyük ise H_0 hipotezini reddediyoruz.

3.3.3 Rasgele Sayıların Dönüştürülmesi

Gerçek sistemlerin niteliklerinin tamamının stokastik davranışı düzgün dağılımla karakterize edilemezler. Aslında bir sistem içerisinde düzgün dağılımdan daha sık kullanılan teorik (Normal, Üstel, Gamma v.b) dağılımlara rastlamak mümkündür. Sistemi temsil edecek uygun bir teorik dağılımın bulunmamasından dolayı ampirik (deneysel) dağılım kullanılabilir. Sistemin stokastik özelliğinden dolayı düzgün dağılımdan elde edilen rasgele sayıların, teorik ya da ampirik dağılımlara dönüşümlerini gerektirir.

Pratikte uygulamaların birçoğunda düzgün dağılımlardan başka, teorik dağılımlara uygun rasgele sayılar kullanılır. Bu amaç için önce düzgün dağılımlı sayılar alınır ya da bilgisayarda meydana getirilerek bir dönüşüm yöntemi ile istenilen dağılıma geçilir. Dönüşüm, istatistiksel anlamda herhangi bir dağılımdan örnek almak demektir. Bu iş için üzerinde çalışılan dağılımı tanımlayan parametrelerin de verilmesi şarttır. Bu yöntemi aşağıdaki şekilde akış diyagramı ile gösterebiliriz.



Şekil 3.8 Rasgele değişken elde edilmesinin akış diyagramı ile gösterimi [50]

3.3.3.1 Ters Dönüşüm Metodu

Sürekli dağılıma sahip olan bir rasgele değişkenin simülasyonu için genel metot olan ters dönüşüm metodu aşağıda açıklanan yöntemler temeline dayanır.

Burada U 'nun $(0,1)$ aralığında düzgün dağılan rasgele değişken olduğunu kabul edelim. Herhangi bir sürekli dağılım fonksiyonu F için X rasgele değişkeni

$$X = F^{-1}(U) \quad (3.7)$$

olarak tanımlarsak, rasgele değişken olan X 'in dağılım fonksiyonu F 'dir. Burada $F^{-1}(U)$, X değerine eşit kabul edilmektedir ve $F(X)=U$ olmaktadır. Örnek olarak, üstel bir rasgele değişkeni simüle etmek istersek, eğer

$$F(X) = 1 - e^{-x} \quad (3.8)$$

ise, $F^{-1}(U)$, X 'in $1 - e^{-x} = U$ değerine eşittir veya,

$$X = -\log(1 - U), \quad (3.9)$$

$U(0,1)$ aralığında düzgün rasgele bir değişken olduğundan,

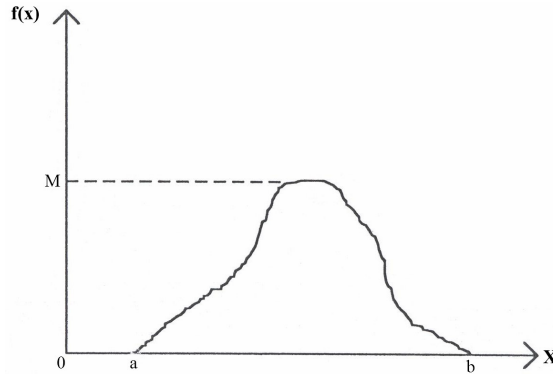
$$F^{-1}(U) = -\log(1-U) \quad (3.10)$$

fonksiyonu ortalama 1 ile dağılmıştır diyoruz. $(1-U)$ 'da $(0,1)$ aralığında düzgün dağıldığından $-\log U$ 'da ortalama 1 değeri ile üstel dağılmıştır. X ortalama 1 ile üstel dağılmıştır. X ortalama 1 ile üstel dağılıyorsa, cX 'de ortalama c ile üstel dağılmaktadır ve bunu da $-\log U$ 'nun ortalama c ile üstel dağıldığı takip etmektedir.

3.3.3.2 Reddetme Metodu

Reddetme yöntemi, uygun bir dağılımdan rasgele bir değer seçilmesi ve bunun kullanılması, kabul veya reddedileceğinin tespit edilmesi için bir seri testten oluşur. Kısaca x değişkeni (a, b) ile sınırlı aralığında değişiyorsa ve $f(x)$ yoğunluk fonksiyonu bu aralıkta sınırlı ise bu yöntem kullanılabilir.

Yukarıda ki tanımdan; $f(x)$ 'in $x < a$ ve $x > b$ için; $f(x) = 0$ gibi yoğunluk fonksiyonu olduğunu varsayalım ve $a \leq x \leq b$ için $0 \leq f(x) \leq M$ 'i aşağıdaki şekilde gösterelim.

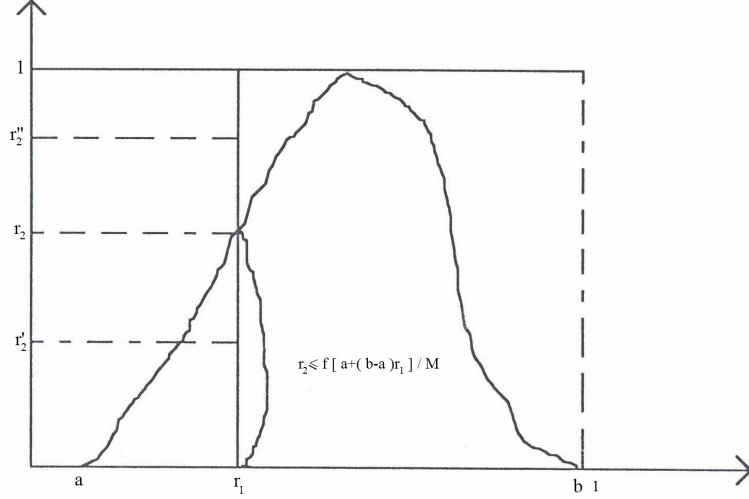


Şekil 3.9 Varsayılan yoğunluk fonksiyonu[50]

Şimdi yöntemin aşamalarını sıralayabiliriz.

1. İki tane r_1 ve r_2 gibi düzgün rasgele sayı üretilmelidir,
2. Daha sonra değişim için $f(x)$; $x = a + (b - a)r_1$ 'i bulmamız gerekiyor,
3. $r_2 \leq f(a + (b - a)r_1)/M$ olup olmadığını kontrol ediyoruz,

4. Şayet (3)'de belirtilen eşitlik sağlanıyorsa, $x = a + (b - a)r_1$ 'i $f(x)$ yoğunluk fonksiyonundan üretilen bir değişken olarak kabul edebiliriz.
5. Şayet (3)'de belirtilen eşitlik sağlanmıyorsa, bu takdirde $x = a + (b - a)r_1$ 'i $f(x)$ yoğunluk fonksiyonundan elde edilen bir değişim olarak alamayız. Bu durumda (3) reddedilir. İşlemlere böylece devam edilir. Burada M 'in, $f(x)$ 'in modu olduğuna dikkat etmek gerekir.



Şekil 3.10 Reddetme yönteminin açıklanması [50]

Bu yöntemin esasını oluşturan teori, $(1/M) f(x)$ 'den daha az veya buna eşit olan r_2 'nin bulunma olasılığının $(1/M) f(x)$ olduğu esasına dayanır. Dolayısıyla bir aşama sonra, $x = a + (b - a)r_1$ 'e uygun olarak rasgele seçilirse ve eğer $r_2 > (1/M)f(x)$ olursa reddedilir. Bu yöntemle kabul edilen x 'lerin olasılık yoğunluk fonksiyonu $f(x)$ 'e eşit olacaktır. Şayet yaptığımız çalışmada hiç reddetme durumu olmadığı takdirde (yani, ikinci aşama uygulanırken), x ; a ile $a + b$ arasında düzgün bir şekilde dağılmış olacaktır. Bununla beraber, kullanılacak reddetme yöntemi ile $f(x)$ 'e uygun x 'ler kabul edilecektir.

3.3.4 Geometrik Dağılım İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

İlk başarı meydana gelmeden önce bir seri Bernoulli deneyindeki başarısızlık sayısı olarak tanımlanan x rasgele değişkeni, geometrik rasgele değişken olarak tanımlanır. Sonucu ikili olan olaylarda, sonucun birisi, olasılığı p olan başarı, diğeri de olasılığı q olan başarısızlık olarak

nitelendirilirse; yapılan deneylerde başarının ilk kez görülmesinden önceki deneme sayısı olan x rasgele değişkeni geometrik değişkendir.

Geometrik dağılım için olasılık yoğunluk fonksiyonu; $x = 0,1,2,\dots$ için $f(x) = pq^x$. Tanım olarak p ; Bernoulli deneyindeki başarı olasılığıdır ve $q = 1 - p$ 'dir. Birikimli dağılım fonksiyonu aşağıdaki şekilde belirlenir:

$k = 0,1,2,\dots, x$ için;

$$F(x) = \sum_{k=0}^x pq^k \quad (3.11)$$

Geometrik dağılımdan rasgele bir değişken üretebilmek için; $[1 - F(x)]/q$ birim aralığına sahip olduğundan $1 - F(x) = q^{x+1}$ yazabiliriz. Ters dönüşüm yöntemi ile $r = q^x$ yazılabilir. Böylece,

$\ln r = x \ln q$ ve

$$x = \ln r / \ln q \quad (3.12)$$

arzu edilen geometrik değişkendir.

3.3.5 Weibull Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

Weibull dağılımının yoğunluk fonksiyonu,

$x \geq 0$ için;

$$f(x) = a\beta x^{\beta-1} e^{-ax^\beta} \quad (3.13)$$

$x > 0$, $a > 0$, $\beta > 0$ için, Weibull yoğunluk fonksiyonu a ve β değer değiştirdikçe bir grup olasılık yoğunluk eğrisi üretir.

Bir Weibull rasgele değişkeni üretebilmek için, ters dönüşüm yöntemi kullanılabilir. Bunun için birikimli dağılım fonksiyonunun tanımında,

$$F(x) = a\beta \int_{t=0}^x t^{\beta-1} e^{-at^\beta} dt \quad (3.14)$$

olur.

$y = at^\beta$ diyelim. Bu takdirde $dy = a\beta t^{\beta-1} dt$ olur. $F(x) = a\beta \int_0^x t^{\beta-1} e^{-y} \frac{dy}{a\beta t^{\beta-1}}$ dolayısıyla,

$$F(x) = 1 - e^{-ax^\beta}, \text{ dır.} \quad (3.15)$$

Şimdi ters dönüşümü yani, $F^{-1}(r)$ 'yi bulmaya çalışalım.

$$F(x) = r = 1 - e^{-ax^\beta}$$

$$1 - r = e^{-ax^\beta}$$

$$r = e^{-ax^\beta}$$

Burada, r düzgün dağılıma ait olup, $(1 - r)$ 'de düzgün bir dağılıma aittir. Böylece,

$$x = \left[-\frac{1}{a} \ln r \right]^{1/\beta} \quad (3.16)$$

bizim Weibull dağılımı için istediğimiz rasgele değişkendir.

3.3.6 Poisson Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

Poisson dağılımının olasılık yoğunluk fonksiyonu;

$x = 0, 1, 2, \dots, \infty$ için,

$$f(x) = \frac{\lambda^x e^{-\lambda}}{x!} \text{ dir} \quad (3.17)$$

Burada λ , her zaman birimi için, beklenen olay sayısıdır. Böylece olaylar arasındaki zamanın, $1/\lambda$ ortalaması ile üstel olarak dağılmış olduğu anlaşılır.

Üstel ve Poisson dağılımları arasındaki bu ilişki Poisson dağılımından değişkenlerin üretilmesi için kullanılabilir. Bir poisson değişkeni olan x şu şekilde tanımlanabilir:

$$\sum_{i=1}^x y_i \leq 1 \leq \sum_{i=1}^{x+1} y_i \quad (3.18)$$

Buradaki y_1, y_2, \dots, y_{x+1} , ortalaması ile üstel dağılımdan elde edilen rasgele değişkenlerdir. Bunlar ters dönüşüm yöntemi ile üretilirler.

$$y_i = -\frac{1}{\lambda} \ln r_i \text{ dir.} \quad (3.19)$$

r_i , düzgün dağılımdan elde edilen değişkendir. Birikimli toplamlar eşitsizlik sağlanıncaya kadar üretilir. Eşitsizlik sağlandığında x , istediğimiz rasgele Poisson değişkenidir.

3.3.7 Üstel Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

$\lambda > 0$, $x \geq 0$ için;

Üstel dağılımın olasılık yoğunluk fonksiyonu,

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x} \text{ dır.} \quad (3.20)$$

Birikimli olasılık fonksiyonu,

$$F(x) = \int_0^x e^{-\lambda t} dt = 1 - e^{-\lambda x} \text{ dir.} \quad (3.21)$$

Üstel dağılımdan rasgele değişken üretmek için ters dönüşüm yöntemi uygulanabilir.

$F(x) = 1 - e^{-\lambda x}$ olduğuna göre, düzgün rasgele (r) değişken için, $r = F(x) = 1 - e^{-\lambda x}$ 'dir. Ters dönüşümü bulmak için;

$$r = 1 - e^{-\lambda x},$$

$$1 - r = e^{-\lambda x}$$

yazılır. $(1 - r)$ 'de düzgün bir dağılım olduğundan dolayı,

$$r = e^{-\lambda x} \text{ veya}$$

$$x = -\frac{\ln r}{\lambda} \quad (3.22)$$

üstel dağılım için rasgele değişkendir.

3.3.8 Beta Dağılımı İçin Rasgele Sayıların Elde Edilmesi

Beta dağılımının yoğunluk fonksiyonu;

$0 \leq x \leq 1$ için,

$$f(x) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1} dx \text{ dir.} \quad (3.23)$$

Burada α ve β dağılımın parametreleridir ve

$$\Gamma(\phi) = \int_0^{\infty} x^{\phi-1} e^{-x} dx \text{ dir.} \quad (3.24)$$

Olasılık yoğunluk fonksiyonu $f(x)$ 'in şekli α ve β tarafından belirlenir. Birikimli dağılım fonksiyonu;

$$F(x) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_0^x x^{\alpha-1} (1-x)^{\beta-1} dx \text{ dir.} \quad (3.25)$$

Beta dağılımından rasgele değişken üretebilmek için öncelikle reddetme yönteminde açıklanan M 'in değerinin belirlenmesi gerekir.

$$M = \text{mod} \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad (3.26)$$

$$M = \frac{\alpha - 1}{\alpha + \beta - 2} \quad (3.27)$$

M 'in sadece bazı α ve β değerleri için tanımlandığına dikkat edilmelidir. Reddetme yönteminin uygulama aşamaları aşağıdaki gibi sıralanabilir:

- (1) α ve β 'nin saptanması.
- (2) $M = (\alpha - 1)/(\alpha + \beta - 2)$ 'nin saptanması.
- (3) Normal reddetme yönteminin uygulanması ve işlemlerin sürdürülmesi.
- (4) r_1 ve r_2 gibi iki ayrı rasgele sayının üretilmesi.
- (5) a) Şayet;

$$r_2 M \leq f(x = r_2) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} r_2^{\alpha-1} (1 - r_2)^{\beta-1} \text{ sağlanıyorsa, rasgele değişken } r_2 \text{ 'ye}$$

eşittir.

- b) Şayet eşitsizlik sağlanmıyorsa, yani

$r_2 M > f(x = r_2)$ ise o taktirde, (4) no'lu aşamaya geri dönüp işlemleri yeniden tekrarlamak gerekecektir [50].

3.4 Monte Carlo Metodu

Monte Carlo metodu, ilk kez 1940'ların sonunda parçalanabilir maddelerin nötron difüzyonunun incelenmesi amacıyla kullanıldı. Monte Carlo (MC) metodu bir olasılık yaklaşımı kullanarak matematiksel problemlerin çözümünü bulmak amacıyla kullanılır ve değişik alanlarda farklı problemlere uygulanabilir [57].

Monte Carlo metodu düzgün dağılımdan rasgele değişkenler elde etmek ve bunları uygun bir şekilde ilgilenilen dağılıma taşımaktır. Bir düzgün dağılım, değişken değerlerinin özel bir alanla sınırlandırılmış olması ve eşit şanslara sahip olması durumunda veya aynı olasılıklara sahip olması durumunda mevcuttur. Çoğunlukla bu düzgün rasgele değişkenlerden rastsal sayılar olarak bahsedilir. Bu sayılar iki önemli şartı sağlamaktadırlar;

1. Bütün değerlerin meydana gelmesi eşit şansa sahiptir.
2. Bütün yeni değerler bütün önceki çıkarılan değerlerden bağımsızdır.

Diğer bir deyişle, eğer biz tek haneli rasgele sayıları çıkarıyorsak, sıfırdan dokuzaya kadar olan sayıların çıkarılma olasılığı geçmişte çıkarılan sayılardan bağımsız olarak birbirine eşittir. Yani 3 sayısının %10'luk gelme olasılığı 0–9 arasındaki sayıların hepsiyle aynıdır. Simülasyon modeli için rasgele düzgün sayıların ihtiyacımız olan rasgele değişkenlere çevrilmesini çeşitli yollarla meydana getirebiliriz. En basiti sayıları alt kümeler şeklinde özel olaylara tahsis etmektir. Öyle ki alt kümedeki sayıların olasılıklarının birleşimi modeli kurulan olayın olasılığına tam olarak karşı gelmelidir.

Monte Carlo (MC) örnekleme bir simülasyondan ziyade olasılıklı simülasyon modelleri ile birleşik olarak kullanılan bir yöntem veya metottur. Monte Carlo metodunu gerçek bir durumun stokastik modelini oluşturup, bu model üzerinden örnekleme deneyleri hazırlama tekniği olarak tanımlayabiliriz. Bu tip simülasyonlar, stokastik yapıda birbiriyle ilişkili çok sayıda değişkene sahip sistem çıktılarının çalışılmasında kullanılmaktadırlar [50].

Monte Carlo metodu sistemdeki parçacıkların rasgele yer değiştirmelerine bağlı olarak moleküler konfigürasyonlar grubu meydana getiren bir metottur. Yeni konfigürasyon konulan bir kriter gere göre kabul veya ret edilir. Oluşan konfigürasyon Boltzmann faktörü ile orantılı bir olasılıkla meydana gelir ve modelin başlangıç konfigürasyonundan bağımsızdır [66].

Monte Carlo simülasyonları, sistemin bir A özelliğine ait denge ortalama değerinin bulunması için sisteme uygun uzayın belirlenmesini amaçlar. Bunun için aşağıda verilen integrasyon değerlendirilebilir:

$$\langle A \rangle = \int A(r)P(r)dr \quad (3.28)$$

$P(r)$ olasılık dağılım fonksiyonu şu şekildedir:

$$P(r) = \frac{\exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right)}{\int \exp\left(-\frac{E(r)}{k_B T}\right) dr} \quad (3.29)$$

$E(r)$; r koordinatlarıyla verilen sistemin enerjisi iken, Denklem 3.28'deki ifade sistemin bölünme fonksiyonudur. Bu iki denklem analitik olarak çözülemediğinden nümerik integrasyon yöntemini kullanarak hesaplama yapılabilir. Bununla birlikte çok küçük sistemler için hesaplanan sayılar makul değildir. Bu integraller tüm durumlara ait tipik örnekleri sağlamak için farklı örnekleme konfigürasyonlarıyla da değerlendirilebilir. En basit şekilde sistemin koordinatlarında rasgele değişimler yapılır. Her harekette hesaplanan enerjilerden, $A(r)P(r)$ tahmin edilebilir ve $\langle A \rangle$ bulunabilir. Bu yaklaşım integrale eşit olarak katkı veren her konfigürasyon gibi kusurludur. $P(r)$, Boltzmann faktörüyle orantılı olduğundan, sadece düşük enerjili konfigürasyonlar integrale önemli katkı verir. Ayrıca, geniş sayıdaki konfigürasyonlar moleküller arasında enerjinin üst üste binmesi nedeniyle küçük Boltzmann faktörüne sahiptirler. Böylece, konfigürasyon uzayının sadece küçük bir kısmı fiziksel gözlenen durumlara uygun üst üste binmenin olmadığı düşük enerjili konfigürasyonlara uygun olur. Bu yüzden üretilen konfigürasyonların çoğunun çok az etki yarattığı veya hiç etki yaratmadığı durumlarda doğru simülasyon yaratılamaz. Simülasyon problemi, Metropolis Monte Carlo metodunun esası olan önemli örnekleme modeliyle çözülebilir. Bu metot çok yaygın olmasından dolayı basitçe Monte Carlo (MC) metodu olarak tanımlanır. Bu önemli özellik (3.29) denkleminde önemli katkı yapan konfigürasyonların üretilmesine neden olur. Belirgin biçimde Boltzmann dağılımıyla seri durumlar üretilir ve eşit olarak hesaplanır. Bu da eşit olasılıkla üretilen durumlar oluşturarak onlara Boltzmann ağırlığı saptayan kaba metottan farklıdır. Simülasyon yeni konfigürasyonların oluşturulması için bir işleme sahip olmalıdır. Böylece simülasyonun sonunda uygun olasılık dağılımı oluşturulabilir. Aşağıda verilen iki koşula uygunluk sağlayan Markov zinciri olarak bilinen denemler dizisi yardımıyla bu dağılım oluşturulabilir.

- a) Her deneme sonucu sonlu sonuçlar kümesine aittir, $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_m, \Gamma_n, \dots\}$ durum uzayı adını alır.
- b) Her deneme sonucu sadece kendinden hemen önceki deneme sonucuna bağlıdır.

Bu koşullar doğru limit dağılımlar ve topluluk ortalamalarının üretilmesini gerektirir [66].

3.4.1 Kanonik Toplulukta (sabit NVT) Metropolis Monte Carlo

Kanonik toplulukta sabit sıcaklık ve hacimde (sabit NVT) N parçacığa sahip bir sistem düşünelim ve parçacıklar arasında iki yönlü etkileşimler olduğunu kabul edelim. Toplam enerji;

$$v = \sum_{i \neq j}^N U(X(i), X(j)) \quad i, j \in [1 \dots N] \quad (3.30)$$

Burada X ; konumlar, yönelimler ve sistemin momentumunun bir grubudur. Bu toplulukta zamana bağlı bir özellik aşağıdaki denklemden elde edilebilir.

$$\langle A \rangle_{reel} = \int \rho_{NVT}(X) A(X) dX^N \quad (3.31)$$

$$\rho_{NVT} = \frac{e^{-\beta v}}{Q_{NVT}} \quad (3.32)$$

Q_{NVT} ; kanonik topluluk için bölünme fonksiyonudur. Eğer sistem ergodik ise $\langle A \rangle_{reel}$ yeterli sayıdaki durum noktaları üzerinden ani değerlerin ortalaması alınarak elde edilebilir.

$$\langle A \rangle_{reel} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i \quad (3.33)$$

Metropolis grubu, her konfigürasyonun $e^{-\beta v}$ olasılığı ile ortaya çıktığı kanonik toplulukta böyle bir durum noktaları dizisi oluşturmak için stokastik bir yöntem tasarladı. Bu dizi yalnızca bir önceki durumla bağlantılı olan bir Markov zincirine uyar.

Markov zincirleri teorisi a durumundan b durumuna genişleyen sistemin ρ_b olasılığını gösterir.

$$\rho_b = \rho_a \pi_{ab} \quad (3.34)$$

Burada π_{ab} geçiş matrisidir. π_{ab} 'nin özellikleri şu şekildedir: $\pi_{ab} \geq 0$ ve

$$\sum_b \pi_{ab} = 1 \quad (3.35)$$

Mikroskobik tersinirlik durumunda;

$$\rho_a \pi_{ab} = \rho_b \pi_{ba} \quad (3.36)$$

b 'den a 'ya gitme olasılığı a 'dan b 'ye gitme olasılığına eşit olmalıdır.

Göz önüne alınan sistemin geçiş matrisi doğrudan elde edilemez. Bununla birlikte ρ_∞ limit dağılımı kanonik topluluğun (ρ_{NVT}) olasılık yoğunluğu olarak kabul edilir ve şöyle verilir;

$$\begin{aligned}\rho_\infty &= \rho_{NVT}(\Gamma_\infty) \\ &= \frac{1}{Q_{NVT}} e^{-\beta v(\Gamma)}\end{aligned}\quad (3.37)$$

Metropolis çözümü (3.35) ve (3.36) denklemlerine uygun bir faz uzayı yörüngesinin oluşmasına izin verir.

Temel olarak, Metropolis metodu N atoma sahip iki boyutlu bir sistem göz önüne alır. Faz uzayı rasgele bir i parçacığı seçerek ve bu parçacığın yer aldığı keyfi büyüklükteki bir kare içinde rasgele yeni bir konum belirleyerek denenir. Eğer enerjide azalma varsa ($\delta v_{ab} = v_b - v_a \leq 0$) hareket kabul edilir. Bununla birlikte eğer enerjide artış varsa ($\delta v_{ab} > 0$) hareket $e^{-\beta \delta v_{ab}}$ olasılığı ile kabul edilir. Bu $\xi \in [0:1]$ aralığında yer alan ve rasgele üretilen bir sayıyla sağlanır. Eğer $\xi \leq e^{-\beta \delta v_{ab}}$ ise hareket kabul edilir, aksi takdirde reddedilir. Bu parçacığı seçme-hareket ettirme dizisi yeterli sayıda hareket elde edilene kadar tekrarlanır. Kanonik topluluğun Monte Carlo algoritması şu şekilde verilir:

- Rasgele bir i parçacığı seçilir,
- Rasgele yeni bir konum ve yönelim belirlenir,
- Eğer ($\delta v_{ab} < 0$) ya da ($\xi \leq e^{-\beta \delta v_{ab}}$) ise hareket kabul edilir aksi halde reddedilir,
- Ani gözlenebilirler kaydedilir,
- n tane basamak çalıştırılıncaya kadar ilk basamağa geri dönülür,
- Gözlenebilirlerin ortalaması hesaplanır.

3.4.2 İzotermal-İzobarik Topluluğa Genişleme

Metropolis çözümü izotermal-izobarik gibi diğer topluluklara da kolayca genişletilebilir. Monte Carlo (MC) metodunun bir diğer topluluğa genişletilmesi topluluğun ρ_{ens} olasılık yoğunluğunun bilinmesini gerektirir. İzotermal-izobarik topluluk için bu şöyle verilir:

$$\rho_{NPT} = \frac{1}{Q_{NPT}} e^{-\beta(v(\Gamma)+PV)} \quad (3.38)$$

Burada P ; basınç, V ise hacimdir. Bu toplulukta Monte Carlo (MC) metodunun kullanımı $e^{-\beta(v(\Gamma)+PV)}$ ile orantılı bir durum olasılığıyla Markov zincirinin oluşturulmasını gerektirir. Bu kanonik topluluktakine benzer bir algoritma kullanılarak gerçekleştirilir fakat burada basıncı sabit tutmak için hacim değiştirilir. Hacim değişkenleri δH entalpisine göre değerlendirilir.

$$\delta H_{ab} = \delta v_{ab} - P(V_b - V_a) - \frac{N}{\beta} \ln \left(\frac{V_b}{V_a} \right) \quad (3.39)$$

Eğer $\delta H_{ab} \leq 0$ ya da $\xi \leq e^{-\beta \delta H_{ab}}$ ise verilen hacim değişim hareketi kabul edilir aksi halde reddedilir.

3.4.3 Rasgele Yönelimlerin Üretilmesi

Rasgele yönelimler üretmek için iki metottan bahsedeceğiz. Bu metotlar Barker-Watts ve Local-Frame metotlarıdır. Burada amaç, \hat{u}_0 başlangıç yönelimlerini kullanarak yeni bir \hat{u}_n yönelimi üretmektir.

\hat{u} yönelim vektörleri sırasıyla Euler açıları θ ve ϕ 'ye göre tanımlanır.

$$\hat{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

Burada $\theta \in [0 : \pi]$, $\phi \in [-\pi : \pi]$ 'dir. \hat{u}_n 'in üretilmesi şu açılarla sağlanır;

$$\theta_n = \theta_0 + \delta\theta \quad (3.41)$$

$$\phi_n = \phi_0 + \delta\phi \quad (3.42)$$

3.4.3.1 Barker-Watts Metodu

Baker-Watts metodu, rasgele ve hızlı yönelimler üreten bir metottur. Bu metotla yeni bir yönelim şöyle üretilir;

$$\hat{u}_n = A_a \hat{u}_0 \quad (3.43)$$

Burada A_a rasgele seçilen A_x , A_y , A_z dönme matrislerinden biridir.

$$A_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_R & \sin \theta_R \\ 0 & -\sin \theta_R & \cos \theta_R \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

$$A_y = \begin{pmatrix} \cos \theta_R & 0 & -\sin \theta_R \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta_R & 0 & \cos \theta_R \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

$$A_z = \begin{pmatrix} \cos \theta_R & \sin \theta_R & 0 \\ -\sin \theta_R & \cos \theta_R & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

ve $\theta_R \in [0 : \theta_{mak}]$ aralığını sağlayan rasgele bir açıdır. Bu metot çok hızlı olmasından dolayı avantajlıdır.

3.4.3.2 Local Frame Metodu

Bu metotta yöntem uygun bir dönme matrisi kullanılarak f sistemindeki u_n^f birim vektörüne dönüştürülen f' sistemindeki $u_n^{f'}$ birim vektörü için rasgele bir yönelim üretmektedir. $u_n^{f'}$ şöyle verilir;

$$u_n^{f'} = \begin{pmatrix} \cos \phi_R \sin \theta_R \\ \sin \phi_R \sin \theta_R \\ \cos \theta_R \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

$$\cos \theta_R = 1 - \xi_\theta (1 - (\cos \theta_{mak})) \quad (3.48)$$

$$\phi_R = (2\xi_\phi - 1)\pi \quad (3.49)$$

Burada ξ_θ ve ξ_ϕ $[0:1]$ aralığında yer alan rasgele sayılardır. $u_n^{f'}$ 'nin u_n^f 'e dönüşümü şu şekilde verilir.

$$R_T = R_{\theta,y} R_{\phi,z} \quad (3.50)$$

$$R_T = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

$$R_T^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \theta & -\sin \phi & \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \cos \theta & \cos \phi & \sin \phi \sin \theta \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

Bu metot Barker-Watts metodundan daha yavaştır [57].

3.4.4 Nano Ölçekte Talaş Kaldırmanın Monte Carlo Simülasyonu

Moleküler dinamik simülasyon (MD) nano ölçekte kesme işlemini modellemek için güçlü bir tekniktir. Bununla birlikte, burada bu işlem ile ilgili (i) Doğru potansiyel enerji yüzeylerinin elde edilebilirliği, (ii) Yüksek kesme hızları kullanma ihtiyacı ($100-500 \text{ ms}^{-1}$) ve (iii) Daha az sayıda iş parçası atomlarının göz önünde bulundurulması (birkaç bin) olarak isimlendirilen üç önemli kısıtlama söz konusudur. Son ikisi hesap zamanını kabul edilebilir bir değerde tutmak için

kullanılır. Bu sınırlamaların getirmiş olduğu kaygılar, bu alan üzerinde çalışan birçok araştırmacının daha büyük iş parçaları (birkaç milyon atom ve daha fazlası) ve konvansiyonel kesme hızları ($2-5 \text{ ms}^{-1}$) için nano ölçekte talaş kaldırma işlemini simüle etme düşüncelerinin doğmasına neden olmuştur. Şu an, bunun güçlü paralel işlemcilerle donatılmış en hızlı bilgisayarlarını bile kullanarak moleküler dinamik simülasyonunu (MD) gerçekleştirmek mümkün değildir.

Yukarıdaki sınırlamaların son ikisinin üstesinden gelebilmek için bir çözüm yolu olarak, zamanın veya kesme hızının doğrudan işleme dahil edilmediğinden Monte Carlo (MC) yöntemi kullanılmaktadır. Aynı zamanda, moleküler dinamik (MD) simülasyonlarında ayrıntılı vakit alan hesapların bazıları küçük bir parçada olsa kullanışlıdır. Örneğin, atomların denge konumlarına ulaşmalarından önceki zamanda kesin hareketleriyle ilgili olarak hiçbir şekilde ayrıntılı bilgi önem taşımayabilir. Bu şekilde önemi olmayan konulara yer vermeyen bir yöntem kullanırsak, değerli hesaplama zamanı ve bellek idareli kullanılabilir.

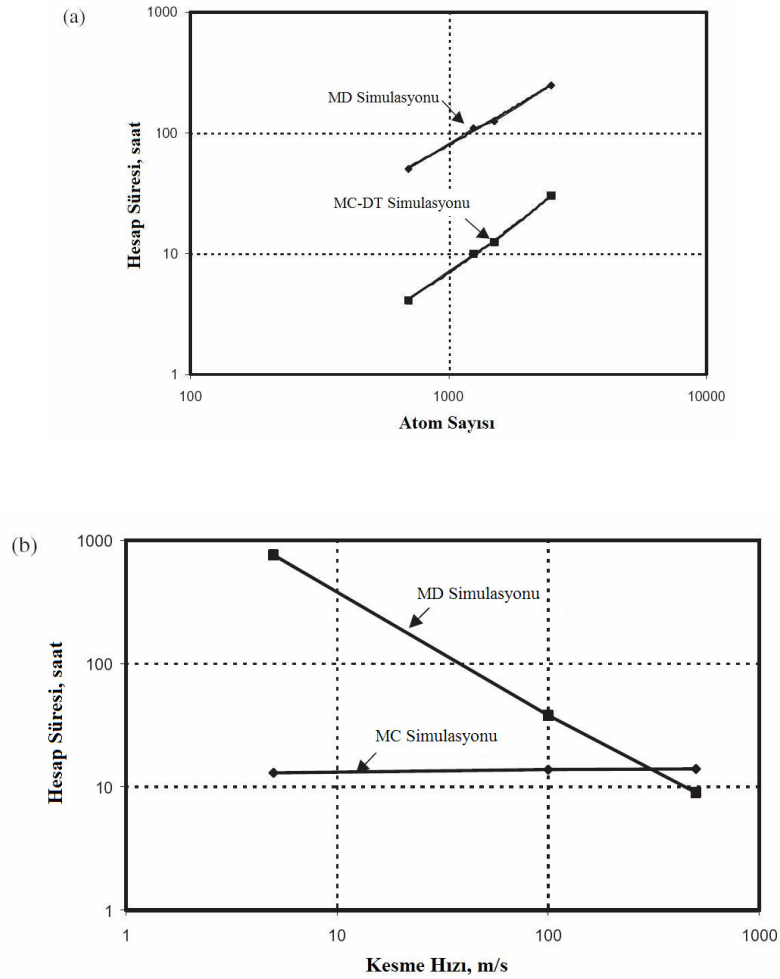
Bu araştırmada, nano ölçekte talaş kaldırma işlemi ne doğal ne de mikro-doğal sistemlere uygulanabilen konvansiyonel kesme hızlarının (5 ms^{-1}) kullanıldığı yeni bir Monte Carlo metodu kullanılarak simüle edildi. Kesme hızlarının Monte Carlo hesaplamalarına doğrudan dahil edilmiyor olsa da, etkileri, kesme hızı ile kesme sıcaklığı birbiriyle ilişkili olduğundan beri, kesme bölgesinde sıcaklık oluşumu aracılığıyla dolaylı olarak görülmektedir. Komanduri ve Hou tarafından konvansiyonel kesme işlemi için geliştirilmiş olan Termik Analiz Yöntemi, kesme bölgesinde izin verilen yerel sıcaklıkların tahmini için nano ölçekte rejime uzatıldı. Bu sıcaklık daha sonra, simülasyondaki MC hareketlerinin kabul ve reddini belirlemek için kullanılan Boltzmann olasılık dağılımı fonksiyonunda (PDF) kullanılır. Bu yöntem, nano ölçekte talaş kaldırmanın Monte Carlo simülasyonunun konvansiyonel kesme hızlarında (5 ms^{-1}) Moleküler Dinamik (MD) simülasyonda olduğu gibi önemli zaman hesapları ile sistemi ispatlamaya gerek olmadan gerçekleşmesini sağlamaktadır. Nano ölçekte talaş kaldırma işlemi konvansiyonel kesme hızlarında (5 ms^{-1}) talaş açısının, kuvvetler, özgül enerji ve talaş oluşum yapısı üzerindeki etkilerini incelemek amacıyla 10^0 , 30^0 , 45^0 olmak üzere üç farklı pozitif talaş açısı kullanılarak gerçekleştirildi.

500 ms^{-1} dolaylarındaki yüksek kesme hızlarında, Monte Carlo simülasyonu çok fazla kazanç sağlanmadığı durumlar için genellikle moleküler dinamik simülasyon tercih edilmektedir. Kesme hızları düştükçe, Monte Carlo yöntemleri daha etkili ve yararlı hala gelecektir. Aşağıdaki şekilde sırasıyla tek eksenli gerilim ve nanometrik kesimde sırasıyla MC ve MD simülasyonları için Şekil 3.11(a) hesap zamanı ile atom sayısı arasındaki, Şekil 3.11(b) ise hesap zamanı ile kesme hızı v_c arasındaki değişimi sırasıyla göstermektedir. Dikkate alınan atom sayısı çok küçük olduğu zaman, iki yöntem arasındaki hesaplama zamanındaki fark oldukça küçüktür (Şekil 3.11(a)). Örneğin, Komanduri, FCC (Yüzey Merkezli Kübik) metallerinin nanometrik tek eksenli gerilme testi için, birleştirilmiş MC-sönümlü yörünge (DT) yönteminin; 2500 atomlu bir sistem için MD simülasyonun gerektirdiği zamanın yaklaşık %16'sını kullandığını gösterdi. Bu fark, dikkate alınan atom sayısı arttıkça önemli derece de artar, mesela 10.000 atom ya da daha fazla, daha da artmaktadır. Bu eğilim, nanometrik kesim durumu için de aynı şekilde olacaktır. Bu fark; nanometrik kesimde; kesim hızı, Şekil 3.11(b)'de gösterildiği gibi, 500ms^{-1} 'den makul kesim hızı değerlerine (yaklaşık $2-5\text{ms}^{-1}$) düştüğünde, daha belirgin olacaktır. Bu; yüksek kesim hızlarında (500ms^{-1}), MD ve MC simülasyonlarında hesapsal zaman arasında fazla bir fark yokken; kesim hızındaki bir düşüşle (yaklaşık $2-5\text{ms}^{-1}$), MC simülasyonu için gerekli zaman nerdeyse kesim hızından bağımsızken, MD simülasyon zamanı kesim hızının düşmesine orantılı olarak artar. Bundan başka; gerilimin karmaşıklığı artarken, MC hesaplamaları genellikle daha uygulanabilir olur; örneğin, basit gözlemsel gerilim çiftinden, gömülü atom geriliminde olduğu gibi, karışık gerilime geçişte. Bu durum; Monte Carlo hesaplamalarının sadece gerilimin kendisine gereksinirken, moleküler dinamik hesaplamalarının gerilimin türevinin belirlenmesine de ihtiyaç hissetmesinden kaynaklanmaktadır.

Nanometrik kesimin birçok moleküler dinamik simülasyonu, hesapsal zamanı azaltmak için, yüksek hızlarda ($100-500\text{ms}^{-1}$) gerçekleşir. Hesapsal zamanının önemli bir kısmı; etkileşen parçaların, belirli bir zamanın üzerinde, boşlukta yeni oluşumlar elde edebilmesi için klasik Newton hareket denklemlerinin sayısal entegrasyonu ile bağıntılıdır. Bu hesaplamaların birkaçı elenebilirse, hesapsal zamanda önemli bir tasarruf sağlanır.

Monte Carlo yöntemlerinde, hesapsal zaman kısaltılabilir, çünkü zaman değişkeni doğrudan işleme dahil edilmiyor. Atomların konumunun zamansal bağımlılığı, Newton denklemleri

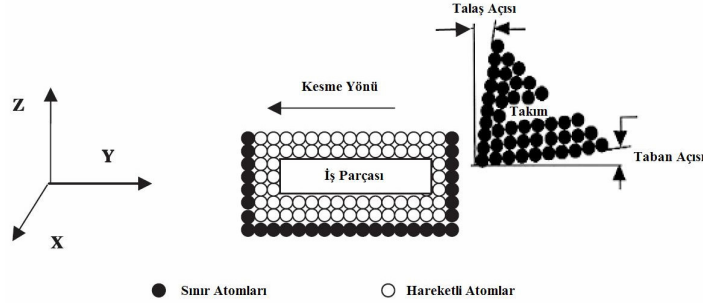
kullanılarak hesaplanmaz, yerine; bir dizi denklem oluşumu elde etmek için, tesadüfi Markov hareketleri kullanılır. Şekil 3.12, bir nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunun şematik diyagramıdır. İş parçası atomları, hareketli atomlar ve sınır atomları olarak ikiye ayrılır. Sınır atomlarının görevi, yığını taklit etmek, dolayısıyla bu atomların simülasyon boyunca hareket etmesine izin verilmez. Sonuç olarak sınır atomları arasındaki etkileşim hesaplanmaz. Bütün takım atomları sınır atomu olarak tayin edilir, yani takımların son derece sert olacağı düşünülür. Aynı zamanda, takımın sınır atomları, iş parçasının sınır atomlarıyla da etkileşmez.



Şekil 3.11 (a) Monte Carlo ve Moleküler Dinamik simülasyonlarında, tek eksenli gerilim testinde atomların sayısı ile, hesapsal zamandaki değişim; (b) Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarında, kesim hızıyla hesapsal zamandaki değişim [39]

Moleküler dinamik simülasyonundakinin tersine, Monte Carlo simülasyonunda, bir çevresel bölgeyi dahil etmek gerekli değildir. Moleküler dinamik simülasyondaki çevresel atomların

amacı; kesim işlemi boyunca üretilen ısıyı dağıtmaktır; daha çok talaş ve kesici takım ve iş parçası malzemesine ek olarak yağlayıcı tarafından tutulan ısıyı dağıtmak gibi. Bu yolla, gelişmiş bir örgü model için geçerli katı içindeki enerji nakli üzerindeki etki hesaplamalara dahil edilir. Monte Carlo simülasyonlarında, momentum ve ısı kaybı terimleri doğrudan dahil edilmez. Bu sebeple, çevresel atomlara ihtiyaç yoktur.



Şekil 3.12 İlgilenilen çeşitli bölgeleri gösteren, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunun şematik diyagramı [39]

Doğa herhangi bir sistemi her zaman en kararlı kurulumuna veya minimum gerilime V_{\min} , yönlendirdiğinden; Monte Carlo simülasyonlarında, sistemi minimum gerilimine taşıyacak kurulumu tesadüfi olarak seçiyoruz. Birçok durumda olasılık dağılımı fonksiyonu (PDF) bilinmez, bundan dolayı bu seçim, açık bir şekilde başarılabilir. Bu tip sorunlarla baş etmek için kullanılan genel bir yöntem, Metropolis örneklem işlemiyle oluşturulan Markov zincirlerini kullanarak tesadüfi kurulumun üretilmesini içerir.

N -parçacıklı bir sistem için, q_0 başlangıç kurulumunu düşünün. Doğal sistemler için Boltzmann dağılım fonksiyonu $P(q_0)$ şu şekilde verilir;

$$P(q_0) = C \exp\left(-\frac{u(q_0)}{KT}\right) \quad (3.53)$$

u ve T , q_0 kurulumu için, sırasıyla, gerilim ve sıcaklık; K , Boltzmann sabiti ve C bağıntı sabitini ifade eder.

Şimdi tüm N -parçacıktan, m -parçacıklı bir altküme seçilir ve bu parçacıkların koordinatları tesadüfi olarak değişir. Burada, N 'e kıyasla m oldukça küçüktür. Örneğin Monte Carlo simülasyonunda, birkaç bin atomdan oluşan bir sistemde, m genellikle 1 ile 5 atomlu i 'nci atom için, izleyen denklem sistemi kullanılarak yeni bir kurulum elde edilir:

$$(x_i)_{new} = (x_i)_{old} + (0.5 - \xi_{i1})\Delta x, \quad (3.54)$$

$$(y_i)_{new} = (y_i)_{old} + (0.5 - \xi_{i2})\Delta y, \quad (3.55)$$

$$(z_i)_{new} = (z_i)_{old} + (0.5 + \xi_{i3})\Delta z, \quad (3.56)$$

i 'nci atom için; $(x_i)_{new}$, $(y_i)_{new}$ ve $(z_i)_{new}$ alandaki yeni kurulumlar; $(x_i)_{old}$, $(y_i)_{old}$ ve $(z_i)_{old}$ eski kurulumlardır. Δx , Δy ve Δz ; X , Y ve Z yönleri boyunca, maksimum adım boyutları ve ξ_i , $[0,1]$ aralığından seçilen tesadüfi sayı.

Doğal sistemler için, bu yeni kurulum noktaları, (3.53) numaralı denklemde verilen Boltzmann olasılığındaki değişimlere bağlı olarak, kabul ya da ret edilecek. Hareket şu şekildeyse kabul edilir;

$$\exp\left(-\frac{\Delta u(q_0)}{KT}\right) \geq \xi_i, \quad (3.57)$$

ξ_i , i 'nci Morkov hareketinde 0 ve 1 arasında oluşturulan tesadüfi bir sayıdır ve $\Delta u = u_{new} - u_{old}$ 'tur. Yine de, sistem büyük sıcaklık eğimlerine sahip olduğundan doğal bir sistem değil ve (3.57) numaralı denklemin uygulanması açık değildir.

m ve maksimum adım boyutunun çok büyük olacak şekilde seçimiyle; sistemdeki tüm parçacıklar için, kurulum alanlarının, tüm bölgelerinin hızla örneklenmesi mümkün olur. Sonuç olarak gerilimdeki değişim Δu çoğunlukla çok büyük ve $\exp[-u(q_0)/KT(q_0)]$ çok küçük olacak. Bu nedenle verilen Metropolis hareketinin uygun bulunma olasılığı oldukça düşük olacaktır. Böylece, büyük sayıda reddedilmiş hareket dolayısıyla, oldukça fazla hesapsal zaman harcanmış olacaktır. Diğer taraftan, maksimum adım boyutunu çok küçük olacak şekilde alırsak, Δu çok küçük olacak ve kabul olasılığı yüksek olacaktır. Bununla birlikte; kurulum alanını layıkıyla

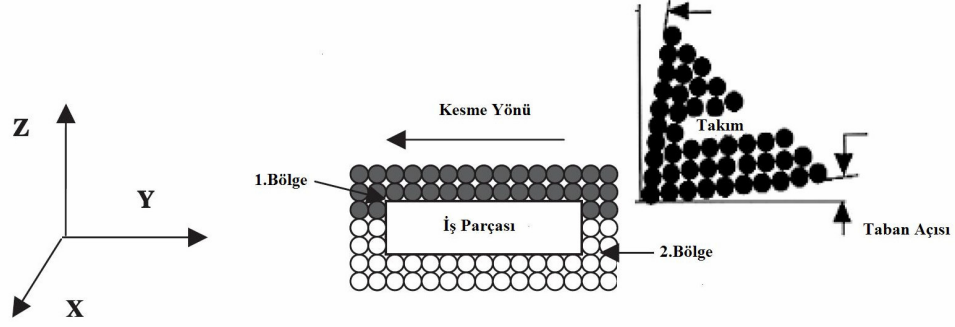
örnekleme ve yakınsamaya ulaşmak için, birçok kabul edilmiş hareket gerektirecektir. Bu iki uç bu sebeple, yararlı değil. Δx , Δy ve Δz değerleri, kabul ret oranı a/r , $0.7 \leq a/r \leq 1.3$ sınırında olacak şekilde seçilmeli. Bu araştırmada m , 1 olarak ve tüm yönlerde maksimum adım boyutunun değeri 0.2 \AA olarak alınır.

(3.53) numaralı denklem dikkate alındığında, daha düşük gerilime yol açan hareketlerin kabul edildiği görülür. Başka bir deyişle, $\Delta u < 0$, ise hareket kabul edilir. Böylece, nihayetinde sistem minimum gerilime hareket eder. Diğer taraftan, gerilimdeki değişim pozitif ise ki, gerilimin arttığını ifade eder, $\exp[-u(q_0)/KT(q_0)]$ değeri, belirli bir Markov hareketinin kabulü için oluşturulmuş tesadüfi ξ_i sayısından büyük olmalıdır. Hareket, artan Δu ile üssel olarak azalan olasılıkla kabul edilir. Hareket reddedilirse, atomun eski konumu korunur. Bu döngü bir Markov hareketi olarak değerlendirilir. Markov hareketleri, evrensel bir minimuma ulaşıncaya kadar tekrarlanır.

Verili sistem de hareket edecek m parçacıklı belirli bir alt kümenin seçiminde, genellikle iki yöntem kullanılır. Birinci yöntemde, sistemdeki N parçacıktan, her harekette, altkümedeki m parçacık, tesadüfi olarak seçilir. İkinci yöntemde, herhangi bir parçacık tekrar hareket etmeden önce, tüm parçacıkların hareketini sağlayan, bazı sistematik seçim yöntemleri kullanılır. Sonsuz sayıda Markov hareketi için, bu iki yöntem de denk olabilir, fakat sonlu bir sayı için, bir yöntem diğerlerinden daha hızlı bir yakınsama sağlayabilir. Şu anki araştırmada, bir atom, herhangi bir zamanda, tesadüfi olarak seçilir ve Markov hareketi verilir. Bu işlem, yerel gerilim korununcaya kadar tekrar edilir.

Kesimde, kesici takımın önünde, makaslama bölgesinde, önemli miktarda plastik deformasyon oluşur. Bu sebeple, kesme derinliği bölgesindeki takımda ya da yanındaki iş parçasındaki atomlar, yığın malzemedekine benzer biçimde kalan, iş parçasının daha aşağısındaki atomlardan daha fazla deforme olur. Yani, iş parçasındaki takımın ucundaki veya yanındaki atom gerilimindeki değişim, iş parçasının daha aşağısındaki atom gerilimindeki değişimlerden daha fazladır. Kesme derinliğindeki iş parçası atomları, yığından, talaş şeklinde taşınır ve yükseltilmiş gerilime hareket eder. Bu nedenle, kesim bölgesindeki atomların yakınsamaya ulaşabilmesi için, büyük sayıda Markov hareketi gerekir.

Bir Monte Carlo adımı iki bölümden oluşur. İlk kısımda; Şekil 3.13'te gösterildiği gibi, kesim bölgesindeki atomlardan (1. Bölge), bir atom seçilir. Daha sonra bu atomda bir Markov hareketi gerçekleştirilir. Tüm bu işlem, tüm sistem için gerilim minimize edilene kadar devam eder. Bu noktada kesici takım küçük artışlarla ilerler ve tüm işlem yeni takım konumları için tekrarlanır.



Şekil 3.13 Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonundan iki bölge gösteren şematik diyagram [39]

Monte Carlo simülasyonu için kullanılan gözlemsel gerilim, yüzey merkezli kübik (FCC) malzemeler için basit ve daha uygun bulunduğu için, bir çift Morse gerilimidir. Şu şekilde ifade edilebilir;

$$u(r) = D \{1 - \exp[-\alpha(r_a - r_e)]\}^2 \quad \text{veya}$$

$$u(r) = \begin{cases} D \{ \exp[-2\alpha(r_a - r_e)] - 2 \exp[-\alpha(r_a - r_e)] \} & r \leq R^* \quad \text{için} \\ 0 & r > R^* \quad \text{için} \end{cases} \quad (3.58)$$

r_a , herhangi iki atom arasındaki uzaklık; r_e , denge uzaklığı; D , dengeden ayrılma enerjisi; R^* , kesik yarıçapı; α , etkileşim alanı. Üç parametre r_e , D ve α sırasıyla, atomlar arasındaki en yakın aralıktan elde edilir; sırasıyla, (denge örgü aralığı), Debye sıcaklığı ve süblimleşme enerjisi. Kesim yarıçapı $u_{(R=R^*)}/u_{(r=r_e)} = 0.04$ olarak uyarlanmış. Verili bir malzeme için, kristalin kararlılığı kadar, fonksiyonun kesinliği; örgü sabiti, sıkışabilirlik ve esnekliğini içeren çeşitli özellikler için de onaylandı. Tüm takım-ış parçası sisteminin gerilimi; iş parçasının örgü atomları arasındaki gerilim terimlerinin ikili toplamı ve ikinci bir toplama; takım atomlarıyla, iş parçası atomları arasındaki Morse geriliminin ikili toplamıdır. Bu çalışmada, öncelikli olarak, deneysel

gerilimlerin yeniden üretilmesiyle ilgilenmediğimiz belirtilmelidir. Odak noktamız, uygulamalı kesim hızlarında talaş kaldırma uygulamaları için Monte Carlo yöntemlerinin geliştirilmesidir.

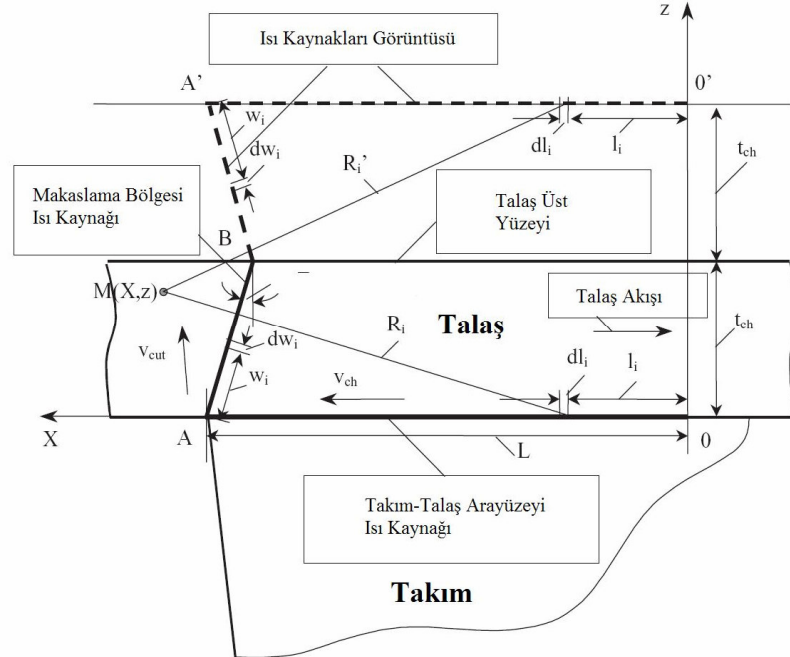
Sivri bir kesici takımla metal kesiminde, iki temel ısı kaynağı var; birincil makaslama bölgesindeki, makaslama yüzeyi ısı kaynağı ve takım-talaş ara yüzeyindeki sürtünme ısı kaynağı. Bu çalışmada, nanometrik kesimde kesim bölgesindeki sıcaklığı tahmin etmek için Komanduri ve Hou tarafından makro ölçekte geliştirilen geleneksel metal kesiminin termal modeli, benimsenmiştir.

Komanduri ve Hou ilk olarak, sonsuz bir orta bölgede meyilli olarak hareket eden bant ısı kaynağının Hahn'ın (1951) modelini kullanarak; talaş kaldırmada iş parçası ve talaştaki, kesme bölgesi ısı kaynağından kaynaklanan sıcaklık dağılımıyla ilgilenmişlerdir. Komanduri ve Hou daha sonra, talaş tarafındaki ve takım tarafındaki sıcaklık dağılımını eşleştirme amacıyla, takım-talaş ara yüzü boyunca, tek düze olmayan sıcaklık dağılımını ele alan, Chao ve Trigger'ın (1955) çalışmasına dayanarak, takım-talaş ara yüzünde, sürtünmeden kaynaklı ısı kaynağını inceledi. Komanduri ve Hou, değişken ısı dağılımı sorununa değinmek için, ilk olarak Chao ve Trigger (1955) tarafından ileri sürülen fonksiyonel analiz yaklaşımı kullanılmıştır. Komanduri ve Hou daha sonra; iş parçası, talaş ve takımdaki sıcaklık dağılımını belirlemek için makaslama bölgesi ısı kaynağı ve takım-talaş ara yüzündeki sürtünme ısı kaynağının etkilerini birleştirmişler. Bu model şu anki çalışmayla birleştirilmiş olduğundan, ilerleyen kısımlarda, kısaca değinilecektir.

(a) Takım-Talaş Ara Yüzey Isı Kaynağı ile Makaslama Bölgesi Isı Kaynağının Kombine Etkileri:

Şekil 3.14, iki ana ısı kaynağını gösteren ısı aktarımı modelinin şematik diyagramıdır, yani, makaslama bölgesi ısı kaynağı AB ve takım-talaş ara yüzey sürtünme ısı kaynağı OA , genel koordinat sisteminde eş zamanlı olarak işler. Komanduri ve Hou; makaslama bölgesinden talaş boyunca ısı akışı ve takım-talaş ara yüzeyinden takıma olan ısı akışının sürekli olduğunu düşünerek; makaslama bölgesi ısı kaynağının, takım-talaş ara yüzeyinde sıcaklık artışına etkisinin talaş tarafında da ve takım tarafındakiyle aynı olacağını buldular. Bu sebeple, makaslama bölgesi ısı kaynağının, takım-talaş ara yüzeyindeki sıcaklık artışına katkısı, iki taraf içinde toplam sıcaklık artışında içerildi.

Şekil 3.14'e gelince, makaslama bölgesi ısı kaynağı ve takım-talaş ara yüzey sürtünme ısı kaynağı birlikte, (talaş düşünüldüğünde) talaş akımına zıt yönde, v_{ch} talaş hızıyla hareket ediyor. Tüm makaslama bölgesi ısı kaynağı, B noktası dışında (her zaman için sınır yüzeyinde), talaşın üst yüzey sınırının altında olduğundan, sanal bir ısı kaynağı $A'B$ ele alındı. Komanduri ve Hou ana makaslama bölgesi ısı kaynağı ve onun sanal ısı kaynağı için, sonsuz bir orta bölge için, meyilli oynar bant ısı kaynağı kullandılar. Benzer şekilde, iki ana ısı kaynağından kaynaklanan takımdaki herhangi bir noktadaki toplam sıcaklık artışı da iki kısımdan oluşur. Birincisi; takım tarafında, takım-talaş ara yüzündeki sürtünme ısı kaynağından, ikincisi makaslama bölgesi ısı kaynağından kaynaklı olan. Yine de, bu problemde kullanmak için farklı ısı aktarımı modeli gereklidir. Talaş ve takım-talaş ara yüzünden takıma, makaslama bölgesi ısı kaynağından gelen ısı kısmının, takım-talaş ara yüzeyinde yerleşmiş durağan ısı kaynağı gibi davrandığını düşündüler. Dolayısıyla bu durumdaki ısı kaynağı, makaslama bölgesi ısı kaynağı dolayısıyla uyarılmış durağan dikdörtgensel ısı kaynağı olarak ele alınır. Komanduri ve Hou, tarafından geliştirilen termik modelin analizi, kapsamlı ve kabaca değinilmiştir. Bu nedenle burada bu çalışmanın nihai sonuçları verilir.



Şekil 3.14 İki ana ısı kaynağının (yani, makaslama bölgesi ısı kaynağı ve takım-talaş ara yüzünde sürtünme ısı kaynağı) birleştirilmiş etkileri için genel koordinat sistemiyle, ısı akımı modelinin şematik diyagramı [39]

Takım-talaş ara yüzündeki sürtünme ısı kaynağı tarafından şu şekilde verilir;

$$\begin{aligned} \theta_M = \frac{q_{pl}}{\pi\lambda} \left\{ B_{chip} - \Delta B \int_{l_i=0}^{L_u} \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v_k}{2a_i}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v_k}{2a_i}\right) \right] dl_i \right. \\ + 2\Delta B \int_{l_i=0}^{L_u} \left(\frac{l_i}{L_t}\right)^m \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v_k}{2a_i}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v_k}{2a_i}\right) \right] dl_i \\ \left. + C\Delta B \int_{l_i=0}^{L_u} \left(\frac{l_i}{L_t}\right)^k \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v_k}{2a_i}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v_k}{2a_i}\right) \right] dl_i \right\} \end{aligned} \quad (3.59)$$

Talaşta, takım-talaş ara yüzü boyunca tüm noktalar dahil herhangi bir noktadaki sıcaklık artışı, makaslama bölgesi ısı kaynağından kaynaklanan sıcaklık artışı tarafından şu şekilde verilir;

$$\begin{aligned} \theta_M = \frac{q_{pls}}{\pi\lambda} \int_{l_i=0}^L \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0 \frac{v_k}{2a} \left[(X-X_i)^2 + (z-z_i)^2 \right]^{1/2} \right] \\ + K_0 \left(\frac{v_k}{2a_i} \left[(X-X_i)^2 + (2t_{ch} - z - z_i)^2 \right]^{1/2} \right) dw_i \end{aligned} \quad (3.60)$$

İş parçasının herhangi bir noktasındaki toplam sıcaklık artışı Komanduri ve Hou, tarafından şu şekilde verilir;

$$\begin{aligned} \theta_M = \frac{q_{pl}}{\pi\lambda} \left\{ B_{chip} - \Delta B \int_{l_i=0}^L \exp\left(\frac{-(X-l_i)v}{2a}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v}{2a}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v}{2a}\right) \right] dl_i \right. \\ + 2\Delta B \int_{l_i=0}^{L_u} \left(\frac{l_i}{L}\right)^m \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v_k}{2a_i}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v_k}{2a_i}\right) \right] dl_i \\ + C\Delta B \int_{l_i=0}^{L_u} \left(\frac{l_i}{L_t}\right)^k \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0\left(\frac{R_i v_k}{2a_i}\right) + K_0\left(\frac{R'_i v_k}{2a_i}\right) \right] dl_i \left. \right\} \\ + \frac{q_{pls}}{\pi\lambda} \int_{l_i=0}^{L_u} \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0 \frac{v_k}{2a_i} \left[(X-X_i)^2 + (z-z_i)^2 \right]^{1/2} \right] \end{aligned}$$

$$+ K_0 \left(\frac{v_k}{2a_i} \left[(X - X_i)^2 + (2t_{ch} - z - z_i)^2 \right]^{1/2} \right) dw_i \quad (3.61)$$

Komanduri ve Hou, termik modeli, makroskopik düzeyde metal kesiminin iki haline uygulamışlar. Yani; karbür bir takım, yüksek Peclet sayısında ($N_{pe} \approx 5 - 20$) çelikten geleneksel talaş kaldırma (Chao ve Trigger, 1953) ve tek kristalli elmas takım, düşük Peclet sayısında ($N_{pe} \approx 0.5$) alüminyumdan son derece keskin talaş kaldırma (Ueda, 1998) ve analitik ve deneysel sonuçlar arasında güvenilir uyum buldular.

(b) Nanometrik Kesimin Monte Carlo Simülasyonuna Metal Kesimin Termik Modelinin Uygulanması:

Talaş kaldırma uygulamalarındaki mevcut doğal olmayan sistemlere, Monte Carlo yöntemini uygulamak için, yaklaşık 100 atomlu grup için, yerel sıcaklığın anlamlı şekilde tanımlanabileceğini varsayılmıştır. Bu varsayım, (3.57) numaralı denklemdeki sıcaklığı T , her bir Markov adımında hareket eden atomların, uzaysal koordinatlarına bağlı olan bir sıcaklıkla değiştirilmesine imkan sağlar. (3.57) numaralı denklemdeki T ile (3.61) numaralı denklem kullanılarak hesaplanan uzaysal bağımlı sıcaklığı $T(q_0)$ yer değiştirilmiştir.

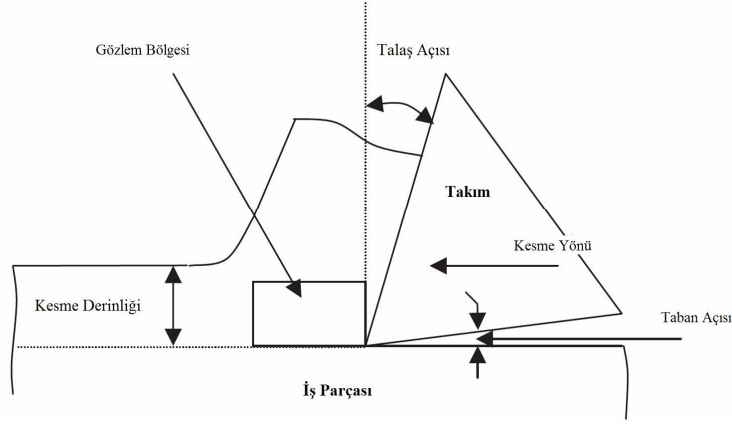
Belirtildiği gibi, Komanduri ve Hou (2001b) tarafından geliştirilen termik model, literatürde bahsedilen deneysel sonuçlarla, makroskopik düzeyde doğrulandı. Bu çalışmada bu model ilk kez, nanometrik kesim için uygulanır. Bu modelin geçerliliğinin kontrolü için, 10° ve 30° talaş açılı takımlarla, $500ms^{-1}$ kesim hızında, bu ikili eşleşme için önceden tanımlanmış gerilim kullanılarak, tek kristalli alüminyumun nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonu gerçekleştirildi. Sonuçlar, nano ölçekte metal kesimin termik analiziyle karşılaştırıldı.

Moleküler dinamik simülasyonundaki sıcaklığın tahminiyle, kesim bölgesinde (Şekil 3.15) takımın önünde küçük bir bölge seçildi ve tüm simülasyon boyunca sürekli olarak gözlemlendi. Bu bölgenin genişliği, iş parçasının genişliğiyle aynıdır. Bağımsız harmonik salınım grubu için olduğu gibi, toplam enerjinin kinetik ve gerilim enerjileri arasında eş paylaştırıldığı varsayımıyla, bu bölgedeki sıcaklık her takım hareketiyle ölçüldü (Şekil 3.16). Bu varsayım kesim bölgesinde aşağıdakine eş bir sıcaklığa yol açar;

$$T = \sum_{i=0}^P \frac{1}{3} \frac{m_a v_i^2}{K} \quad (3.62)$$

P , ilgilenilen bölgeye düşen toplam atom sayısı; m_a , atom yığılımı; v_i , aynı bölgede i 'nci atomun hızını ifade etmektedir.

Bölgenin boyutu; uygun bir istatistiksel ortalama sıcaklık değeri elde etmek için, bölgede yeterli sayıda atomu sağlayabilmek için seçilir. P için çoğunlukla 50–100 atom alınır.

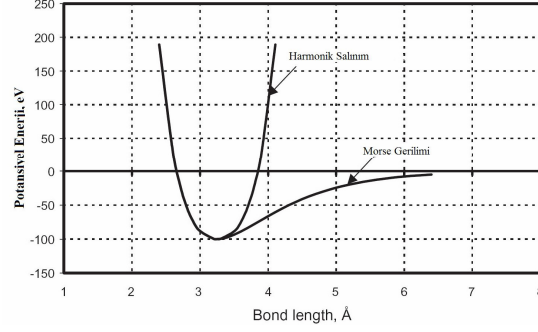


Şekil 3.15 Nanometrik kesimde sıcaklık tahmini için, kesim alanındaki gözlem bölgesini gösteren şematik diyagram [39]

Kesme ve itme kuvvetleri, nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonundan elde edilir. Şekil 3.17 (a) ve (b), 10° meyilli takımla nanometrik kesim için kesim zamanıyla, sırasıyla kesme ve itme kuvvetlerindeki değişimi gösterir. Şekil 3.18 (a) ve (b) 30° meyilli takım için değişimleri gösterir. Bu güçler daha sonra, kesme yüzeyi ve takım-talaş sürtünme ara yüzeyindeki ısı kaynaklarının yoğunluğunu belirlemek için, Merchant'ın (1945) güç döngü diyagramı kullanılarak takım yüzeyi ve kesim yüzeyi boyunca ayrıştırılır. Bu ayrıştırılan güçler, (3.61) ve (3.65) numaralı denklemler için gerekli miktarlar kesim bölgesi ve takım-talaş ara yüzeyinde üretilen ısıyı hesaplamak için kullanılır.

Takım-talaş ara yüzeyinde üretilen ısı şu şekilde verilir;

$$q_{pl} = \frac{F_{fr} v_{ch}}{L_t w} \quad Jcm^{-1}s^{-1} \quad (3.63)$$



Şekil 3.16 Morse gerilimiyle, harmonik salınımın karşılaştırılması [39]

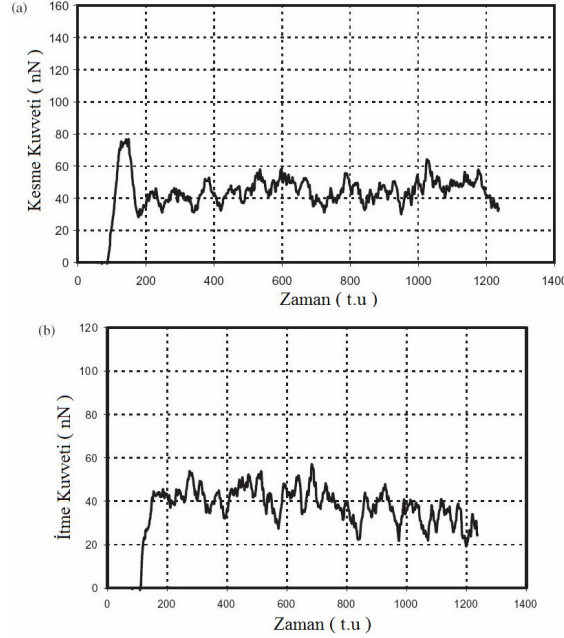
Benzer şekilde makaslama yüzeyinde üretilen ısı şu şekilde verilir;

$$q_{pls} = \frac{(F_c v_c - F_{fr} v_{ch})}{AB \times w} \quad Jcm^{-1}s^{-1} \quad (3.64)$$

F_{fr} , takım-talaş yüzeyi boyunca etkiyen sürtünme kuvveti; F_c , kesim kuvveti; L_H , sürtünme ısı kaynağının uzunluğu; v_{ch} , talaş hızı; w , kesme derinliği; AB , makaslama ısı kaynağının uzunluğu ($t/\sin \phi_c$).

Moleküler dinamik simülasyonunda, takımın sonsuz derecede sert olduğu düşünülüyor. Dolayısıyla atomlar kendi denge durumlarında titremiyorlar. Yani takım atomlarında moleküler kinetik enerji yoktur. Bu tüm simülasyon boyunca takımın sıcaklık yükselişinin olmamasını açıklamaktadır. Başka bir deyişle, termik modeli uyguladığımızda, takım; takım-talaş ara yüzeyinde üretilen ısıyı paylaşmaz, ilk tahmin, talaşın tüm enerjisi götürdüğüdür. Bu sebeple (3.61) numaralı denklem $\Delta B = 0$ ve $B_{chip} = 1.0$ olarak basitleştirilir; böylece,

$$\begin{aligned} \theta_M = & \frac{q_{pl}}{\pi \lambda_p} \left\{ \int_{l_i=0}^{L_H} \exp\left(\frac{-(X-l_i)v_k}{2a_i}\right) \left[K_0 \left(\frac{R_i v_k}{2a_i} \right) + K_0 \left(\frac{R'_i v_k}{2a_i} \right) \right] dl_i \right\} \\ & + \frac{q_{pls}}{\pi \lambda} \int_{l_i=0}^{t_{ch}/\cos(\phi-\alpha)} \exp\left(\frac{-(X-X_i)v}{2a}\right) \left[K_0 \left(\frac{v}{2a} \left[(X-X_i)^2 + (z-z_i)^2 \right]^{1/2} \right) \right. \\ & \left. + K_0 \left(\frac{v_k}{2a_i} \left[(X-X_i)^2 + (2t_{ch}-z-z_i)^2 \right]^{1/2} \right) \right] dw_i, \end{aligned} \quad (3.65)$$



Şekil 3.17 Tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonunda, kesim zamanıyla (a) kesim kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki (hareketli ortalama değerleri) değişim (meyil açısı 10° ; kesim hızı $500ms^{-1}$; kesme derinliği , 5.1 \AA ; kesim genişliği, 43 \AA). Bu ve sonraki şekillerde $t.u$ zaman birimini ifade eder [39]

Bu çalışmanın esas amacı; (001) düzleminde yönlendirilmiş ve 3 pozitif meyil açılı takım, yani 10° , 30° ve 45° , $5ms^{-1}$ kesim hızında [100] yönünde kesilmiş tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunun karşılaştırmalı çalışmasını yürütmek ve iş parçasının alt yüzey deformasyonu yanında, kesme ve itme kuvvetlerindeki meyil açısının etkisini, kuvvet oranını, takım yüzeyindeki sürtünme kuvvetini, makaslama bölgesindeki makaslama kuvveti ve özgül enerjisini de belirlemektir.

(a) Kesim Bölgesindeki Sıcaklığın ve $500 ms^{-1}$ 'de Nanometrik Kesimin, Termik Analiz,

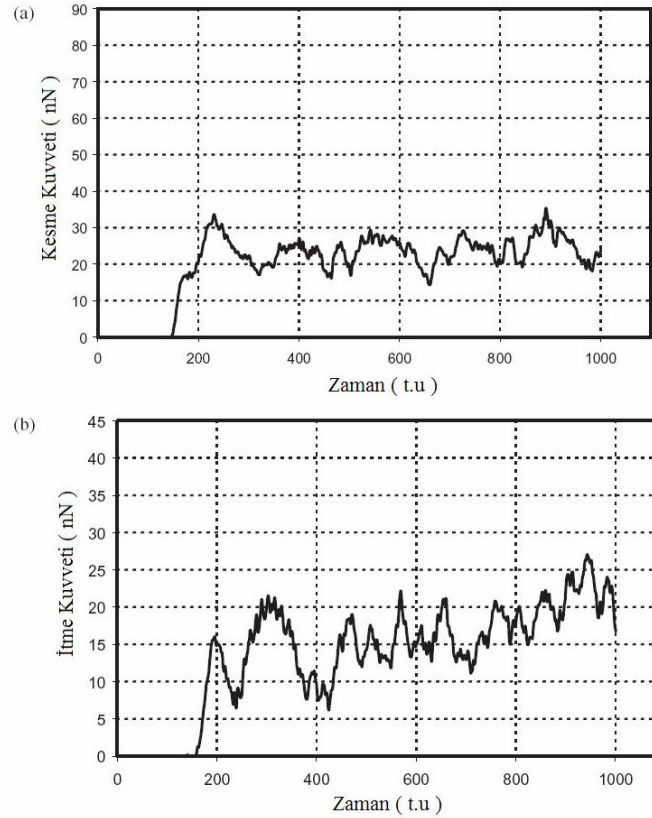
Moleküler Dinamik Simülasyonunun Karşılaştırılması:

Kesim bölgesindeki sıcaklık, (3.62) numaralı denklem kullanılarak hesaplanmış ve (3.65) numaralı denklem kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Şekil 3.20 ve 3.21; moleküler dinamik simülasyonundan kesim zamanı ve $500ms^{-1}$ 'de sırasıyla, 10° ve 30° meyil açılı takımlarla kesim için termik modelle, kesim bölgesindeki sıcaklık değişimini gösterir. Uyumun oldukça iyi olduğu görülebilir. Kesim bölgesindeki yerel sıcaklıklar bir kez bilindiğinde,

(3.57) numaralı denkleme yerleştirilebilirler ve Monte Carlo hesaplamalarında kullanılırlar. Bu yöntem, kesim hızından kaynaklanan etkilerin, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, dolaylı olarak kullanılmasına imkan sağlar. Bu işlem bu sebeple, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunun, geleneksel kesim hızlarında, yaklaşık, $5ms^{-1}$ yürütülmesine izin verir.

(b) Kesimin Moleküler Dinamik ve Monte Carlo Simülasyonları İçin Kuvvet Analizi:

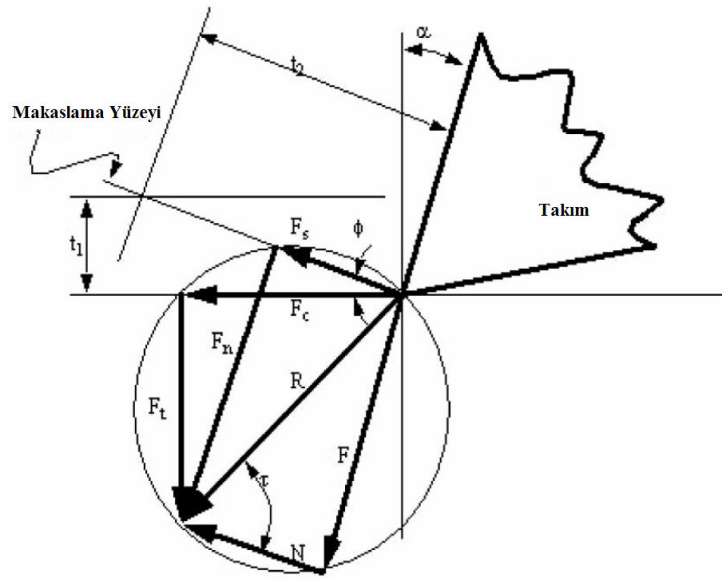
Bir kesim deneyinde, kesim kuvvetinin X , Y ve Z bileşenleri, takım kenarında ölçülür. Bu bileşenler daha sonra, Şekil 3.19’da gösterildiği gibi, kesme kuvveti, itme kuvveti ve makaslama kuvvetine ayrıştırılır. Bu bölümde, bu kuvvetler arasındaki ilişkiyi ve normalde Monte Carlo ve Moleküler Dinamik simülasyonlarında hesaplanmış ilişkiyi inceliyoruz.



Şekil 3.18 Tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin Moleküler Dinamik simülasyonunda, kesim zamanıyla (a) kesim kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki (hareketli ortalama değerleri) değişim (meyil açısı 30° ; kesim hızı $500ms^{-1}$; kesme derinliği 5.1 \AA ; kesim genişliği 43 \AA) [39]

Kesici takım tarafından harcanan toplam kuvvet F_{total} , iş parçası atomları ile iş parçası-takım atomları arasındaki etkileşimden doğan durgun kuvvetlerin, artı, ivme etkisinden dolayı her atom için eylemsizlik teriminin toplamıdır. Durgun kuvvetler, kuvvet yönündeki gerilimin negatif eğimlerin toplamı olarak verilir. Eylemsizlik kuvveti ise; her bir atomun uygun hız bileşenlerinin zaman türevidir. Bu sebeple, toplam kesim kuvveti şu şekilde verilir;

$$F_Y^{total} = -\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial V}{\partial Y_{..y}} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{N_{tool}} \frac{\partial V}{\partial Y_{ik}} + \sum_{i=1}^N \frac{dP_{Yi}}{dt} \quad (3.66)$$



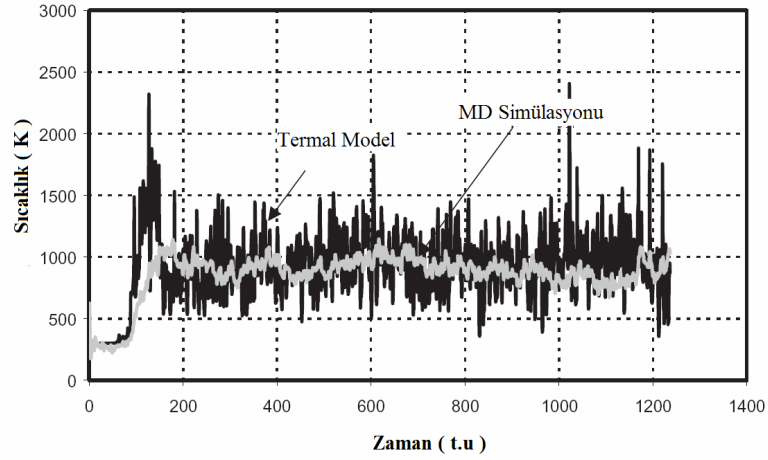
Şekil 3.19 Ortogonal (Dikey) Kesim İçin Merchant'ın (1945) Kuvvet Daire Diyagramı [39]

Kesim yönü z eksenini olarak alındığından (Şekil 3.12 ve Şekil 3.13) (3.66) no'lu denklemde ilk çift toplam N iş parçası atomları arasındaki tüm durgun kuvvetlerin toplamıdır. İkinci çift toplam kesici takımdaki, N_{tool} atomu durgun kuvvetlere dahil eder. Son toplam, iş parçasındaki atomların tüm eylemsizlik kuvvetlerinin Y bileşenlerini içerir. Takım atomları sabit olduğundan, bu terimler takım için mevcut değildir. Sonuç olarak Moleküler Dinamik simülasyonundan elde edilen durgun kuvvetler şu şekilde verilir;

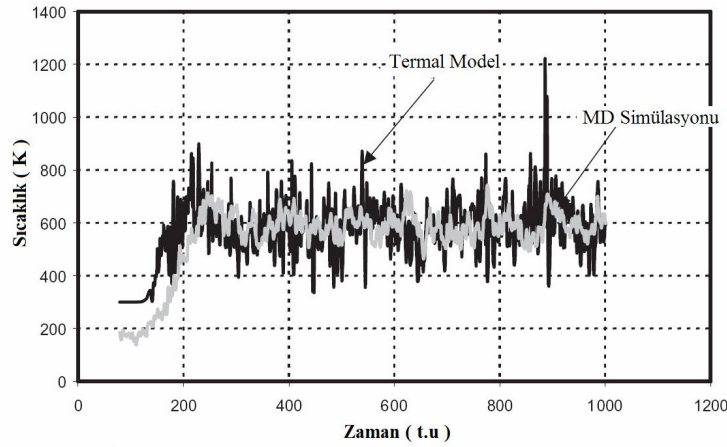
$$\left(-\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial V}{\partial Y_{..y}} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{N_{tool}} \frac{\partial V}{\partial Y_{ik}} \right)_{MD} = F_Y^{total} - \sum_{i=1}^N \frac{dP_{Yi}}{dt} \quad (3.67)$$

Monte Carlo hesaplamalarında, kesme işlemi boyunca takımın her bir konumunda sistemi tanımlayan yöntem, atomları meta-durgun denge konumuna yaklaştırır. Bu denge konumunda, eylemsizlik terimlerinin toplamı sıfır olacak. Bundan dolayı, Monte Carlo hesaplamalarından elde edilen durgun kuvvetler şu şekilde verilecek;

$$\left(- \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{\partial V}{\partial Y_{..y}} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{N_{tool}} \frac{\partial V}{\partial Y_{ik}} \right)_{MC} = F_Y^{total} \quad (3.68)$$



Şekil 3.20 Komanduri ve Hou'dan sonraki termal modelle, moleküler dinamik simülasyonunun sonuçları arasında, takım ucunun yanındaki kesim bölgesinde üretilen sıcaklığın karşılaştırılması (Kesim hızı $500ms^{-1}$, meyil açısı 10°) [39]



Şekil 3.21 Komanduri ve Hou'dan sonraki termal modelle, moleküler dinamik simülasyonunun sonuçları arasında, takım ucunun yanındaki kesim bölgesinde üretilen sıcaklığın karşılaştırılması (Kesim hızı $500ms^{-1}$, meyil açısı 30°) [39]

Eylemsizlik terimlerinin çoğu F_Y^{total} ile aynı işarete sahip olacağından, aşağıdaki denklige sahip olmayı bekleriz.

$$F_Y^{total} - \sum_{i=1}^N \frac{dP_{Yi}}{dt} < F_Y^{total} \quad (3.69)$$

Bu sebeple, Monte Carlo çalışmalarında elde edilen kuvvetler, benzer koşullar için, moleküler dinamik simülasyonu için elde edilenleri aşacaktır. Kesim hızı düştükçe, eylemsizlik kuvvetlerinin toplamı da düşecektir. Sonuç olarak düşük kesim hızlarında moleküler dinamik simülasyonunda hesaplanan kuvvetlerin benzer Monte Carlo simülasyonlarından elde edilenlere yakınsadığını görmeyi bekleriz.

(c) 500 ms⁻¹'de Nanometrik Kesimin Moleküler Dinamik ve Monte Carlo Simülasyonlarının Karşılaştırılması:

Moleküler Dinamik Simülasyon:

Tek kristalli alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonu, 10° meyilli bir araçla, 500ms⁻¹ kesim hızında, [001] yönünde kesimle (100) düzlemde yürütülmüştür. Tablo 3.1 simülasyondaki Morse gerilim parametreleriyle birlikte, iş parçası ve takım boyutlarını da verir.

Şekil 3.22 (a)–(d) 500ms⁻¹'de nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonunun çeşitli basamaklarını gösterir. Kesimin başlangıç basamağında, makaslama bölgesinde plastik deformasyon görülebilir. Takım devam ettikçe, alt yüzey deformasyonu, dislokasyon oluşumu ve iş parçasında yayılma da görülür (Şekil 3.22 (d)).

Şekil 3.17 (a) ve (b) durgun kesimdeki değişimi ve nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonunda, 500ms⁻¹'de 10° meyilli takım için kesim zamanıyla itme kuvvetlerini gösterir. Kesim bölgesindeki sıcaklık (3.62) numaralı denklem kullanılarak hesaplanır. Şekil 3.23 kesim zamanıyla, kesim bölgesindeki sıcaklıktaki değişimi gösterir (Şekil 3.20'dekiyle aynı nokta). Bu

durumda, ortalama sıcaklığın 10° meyilli araçla $500ms^{-1}$ hızında, yaklaşık $900K$ olacağı tahmin edilir.

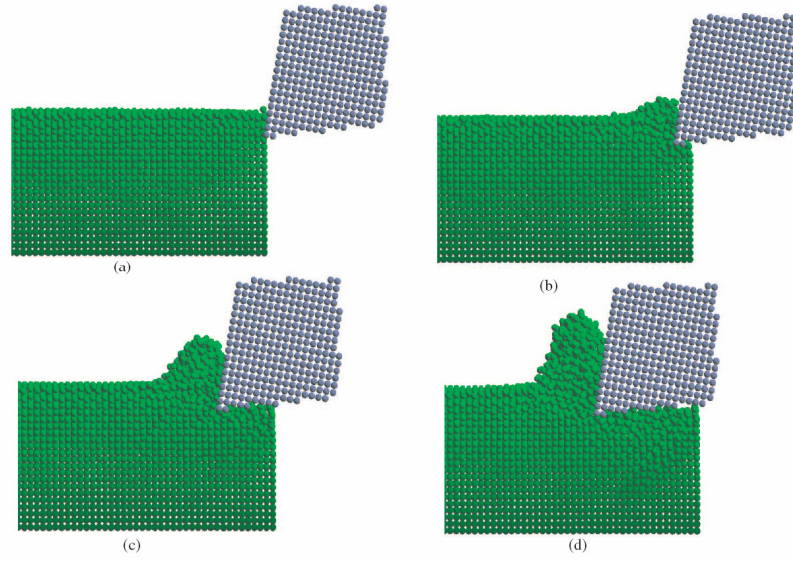
Tablo 3.1 $500ms^{-1}$ kesim hızında, tek kristalli alüminyumun nanometrik kesiminin Moleküler Dinamik ve Monte Carlo Simülasyonlarında kullanılan, iş parçası ve takım boyutları, kesim parametreleri, Morse gerilim parametreleri [39]

İş Parçası	Tek Kristalli Alüminyum
Kristal Yapısı	Yüzey Merkezli Kübik (FCC)
Alüminyum İçin Morse Gerilim Parametreleri	
α	1.16460 \AA^{-1}
r_e	3.253 \AA^0
D	0.2703 eV
Yapılandırma	İki Boyutlu veya Ortogonal Kesim
İş Parçası Boyutları	a , iş parçasının kafes sabitini göstermek üzere, sırasıyla X , Y ve Z doğrultularında $11a$, $50a$ ve $11a$ uzunluğunda
Takım Malzemesi	Son derece sert (tungsten)
Takım Boyutları	a , takımın kafes sabitini göstermek üzere, sırasıyla X , Y ve Z doğrultularında $22a$, $10a$ ve $10a$ uzunluğunda.
Kesme Derinliği	$4.05 - 5.1 \text{ \AA}^0$

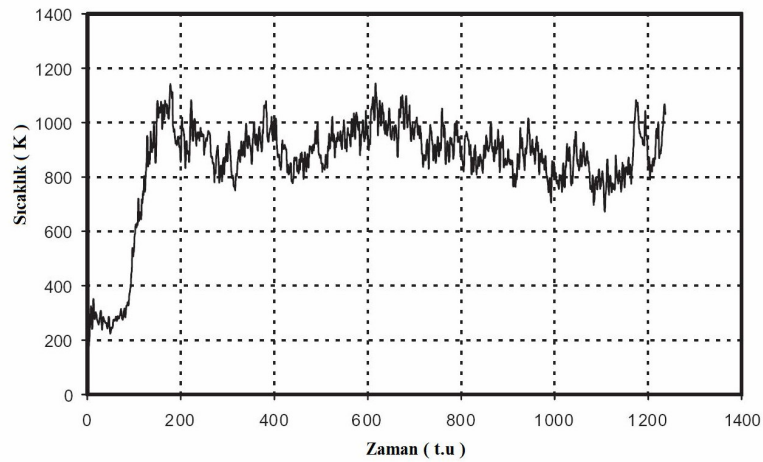
Monte Carlo Simülasyonu:

Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonu, 10° meyilli takımla, aynı kesim hızında $500ms^{-1}$, tek kristalli alüminyum iş parçası üzerinde yürütüldü. Şekil 3.24(a)-(d), nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonunun sonuçlarını gösterir. Şekil 3.22 ve 3.24 karşılaştırıldığında, alt yüzey deformasyonu olduğu kadar takım üzerindeki deformasyonun doğasının da, Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarında oldukça benzer olduğu

görülebilmektedir. Şekil 3.25 (a) ve (b) $500ms^{-1}$ kesim hızında 10° meyilli takımla Monte Carlo simülasyonundaki kesim zamanıyla, sırasıyla, durgun kesim ve itme kuvvetlerindeki değişimi gösterir. Her takım ilerleyişinden sonra, kesim bölgesindeki sıcaklık, Komanduri ve Hou'nun termik modeli kullanılarak hesaplanmıştır. Şekil 3.26 Monte Carlo simülasyonundaki kesim zamanıyla, kesim bölgesindeki sıcaklık değişimini gösterir. Kesim işlemi boyunca, yaklaşık $1000K$ 'lik ortalama sıcaklık elde edildi. Bu Şekil 3.23'de gösterilen moleküler dinamik simülasyonunun sonuçlarına oldukça uyumludur.

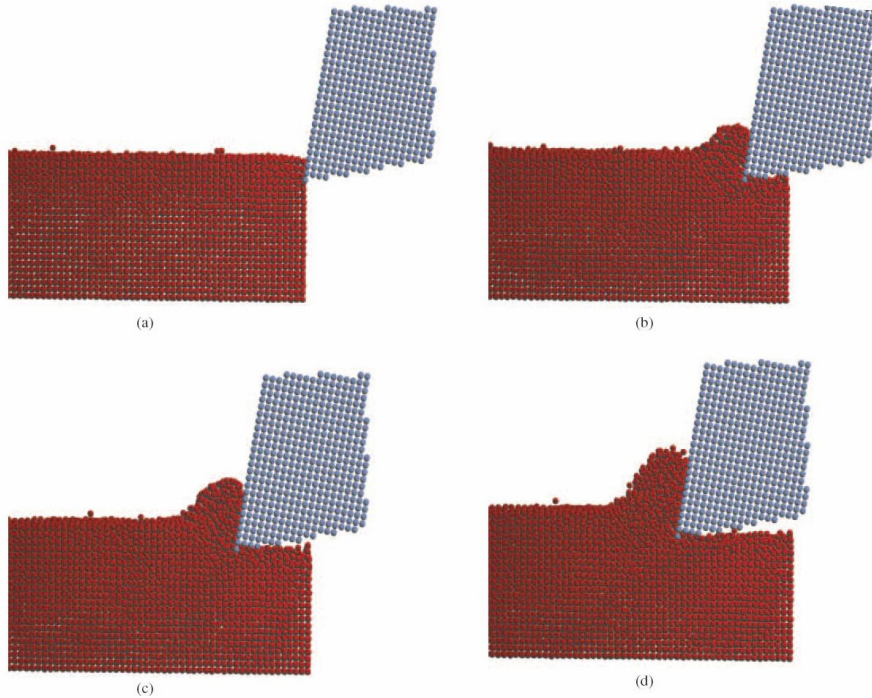


Şekil 3.22 Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında moleküler dinamik simülasyon (meyil açısı 10° , kesim hızı $500ms^{-1}$) [39]



Şekil 3.23 Alüminyumun nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonunda, kesim bölgesindeki sıcaklık değişimi (meyil açısı 10° , kesim hızı $500ms^{-1}$) [39]

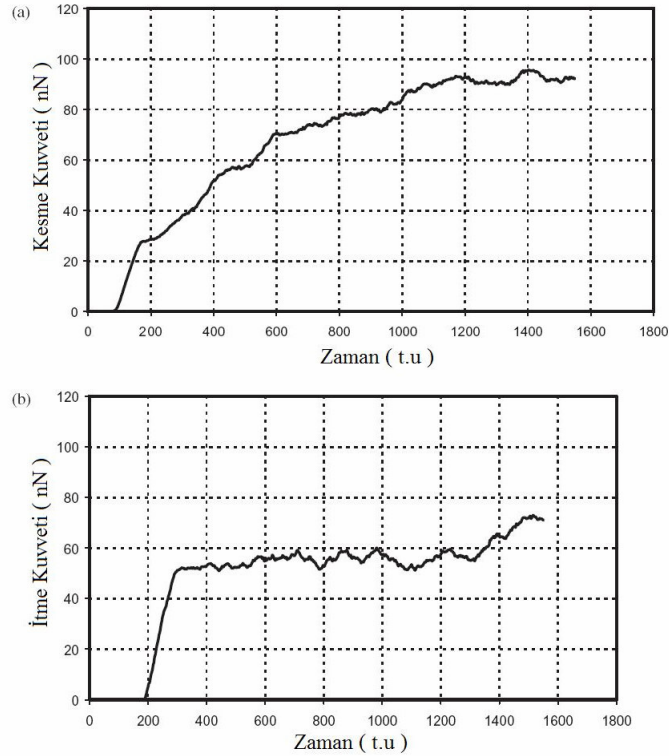
Tablo 3.2, 10° meyilli takımla aynı kesim hızında $500ms^{-1}$ alüminyum iş parçasının nanometrik kesiminin Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarının karşılaştırılması verilir. Şekil 3.17 (a) ve (b)'nin, Şekil 3.25 (a) ve (b) ile karşılaştırılması, beklenildiği şekilde, durgun kesme ve itme kuvvetlerinin, Monte Carlo simülasyonu için, moleküler dinamik hesaplamalarında elde edilenden daha yüksek olacağını gösterir. Monte Carlo durgun itme kuvveti, moleküler dinamik sonuçlarından yaklaşık %35 daha yüksektir. Monte Carlo hesaplamalarından elde edilen durgun kesme kuvveti, simülasyon boyunca çeşitli zamanlarda, moleküler dinamik sonuçlarını %120'ye kadar değişen miktarlarda geçer. Bu farklar burada, Monte Carlo simülasyonlarında bulunmayan (Denklem 3.66-3.69), moleküler dinamik hesaplamalarındaki net bir eylemsizlik kuvveti teriminin mevcudiyetine ve Monte Carlo hesaplamalarında kullanılan büyük kesim derinliğine atfedilir. Bu farklılıkların bir parça büyük olması, aslında, oldukça büyük net eylemsizlik terimi üreten, yüksek kesim hızlarından $500ms^{-1}$ kaynaklanmaktadır. Eşit kesme derinliğiyle, yaklaşık $2ms^{-1}$ deneysel kesim hızlarında farkların daha az olması beklenir. Monte Carlo hesaplamalarındaki daha geniş durgun kuvvetler, moleküler dinamik simülasyonu kullanılarak elde edilenden daha büyük özgül enerjilere de yol açacaktır.



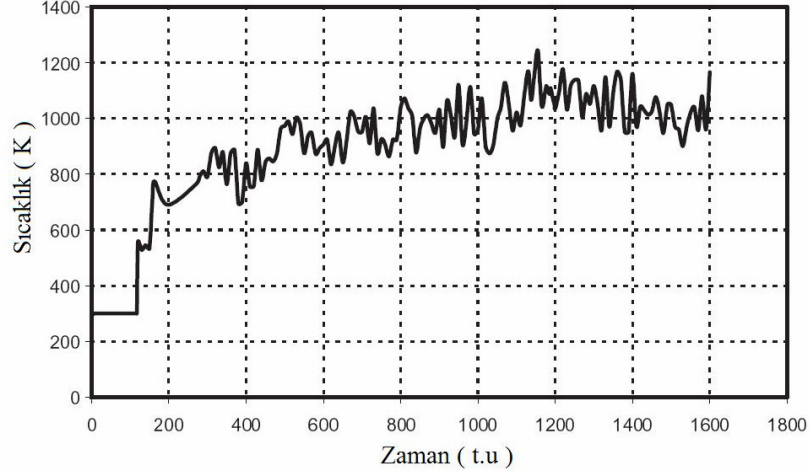
Şekil 3.24 Alüminyumun nanometrik kesiminin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil Açısı 10° , Kesim Hızı $500ms^{-1}$) [39]

Tablo 3.2 $500ms^{-1}$ 'de, 10° meyl açısıyla Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarının karşılaştırılması [39]

KESME İŞLEMİ KOŞULLARI ve ÇIKIŞ PARAMETRELERİ	MD	MC
Birim Genişlik Başına Düşen Kesme Kuvveti ($nN \text{ \AA}^{-1}$)	1.255	2.53
Birim Genişlik Başına Düşen İtme Kuvveti ($nN \text{ \AA}^{-1}$)	0.958	1.17
Kesme Genişliği (\AA)	40.5	43.1
Kesme Derinliği (\AA)	4.1	5.1
Kuvvet Oranı	0.764	0.462
Özgül Enerji ($10^5 Nmm^{-2}$)	0.306	0.496
Hesaplama Süresi (h)	8-10	14-16



Şekil 3.25 Alüminyumun Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, (a) kesim kuvvetindeki değişim, (b) itme kuvvetindeki değişim (Meyil açısı 10° , Kesim hızı $500ms^{-1}$) [39]



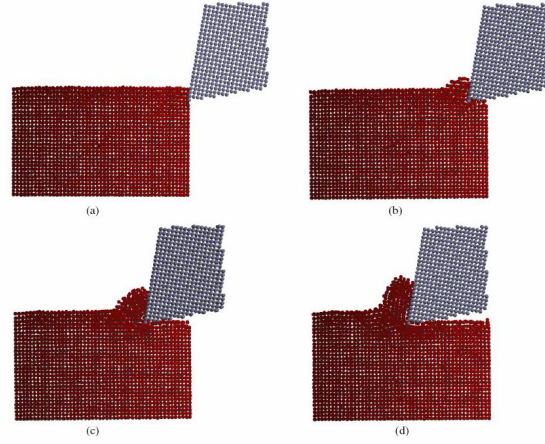
Şekil 3.26 Kesim zamanıyla nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, Kesim bölgesindeki sıcaklıktaki değişim (Meyil açısı 10° , Kesim hızı $500ms^{-1}$)

(d) $5ms^{-1}$ Kesim Hızında Nanometrik Kesimin Monte Carlo Simülasyonu:

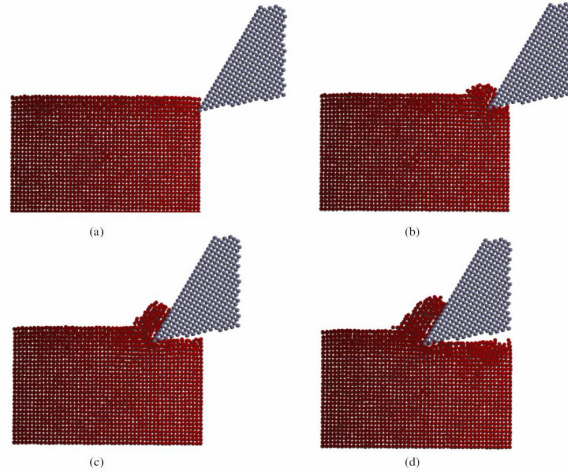
Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonu, pozitif meyil açılı takımlarla, yani, 10° , 30° ve 45° , $[100]$ kesim yönünde, (001) düzlemine yönlendirilmiş, tek kristalli alüminyum iş parçasında yürütülmüştür. Tablo 3.3, $5ms^{-1}$ 'de, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda kullanılan hesapsal parametreleri verir. Şekil 3.27 (a)-(d), 3.28 (a)-(d) ve 3.29 (a)-(d), sırasıyla 10° , 30° ve 45° meyilli takımlarla, Monte Carlo simülasyonunun çeşitli basamaklarını gösterir. Takım, iş parçasında ilerledikçe, ana makaslama bölgesinin oluşumunu ve talaş kaldırılmış yüzeyde alt yüzey deformasyonunu gözlemlenir. Takım yenice talaş kaldırılan yüzeyden ilerledikçe, talaş kaldırılmış yüzeydeki atomların, esnek iyileşmesini de gözlemlenir (Şekil 3.27 (d)). Yüksek esnek iyileşme, Monte Carlo yöntemindeki ana ilkeye, yani, sistemin minimum gerilime ulaşma çabasına, atfedilir. Aynı sebep, geleneksel kesimde ve/veya moleküler dinamik simülasyonunda talaştaki yüksek derecede deforme olmuş yüzey yerine, nanometrik kesim boyunca talaş da gözlemlenen, artan kristal yapı için de geçerlidir.

Tablo 3.3 $5ms^{-1}$ Kesim hızında tek kristalli Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda kullanılan geleneksel parametreler [39]

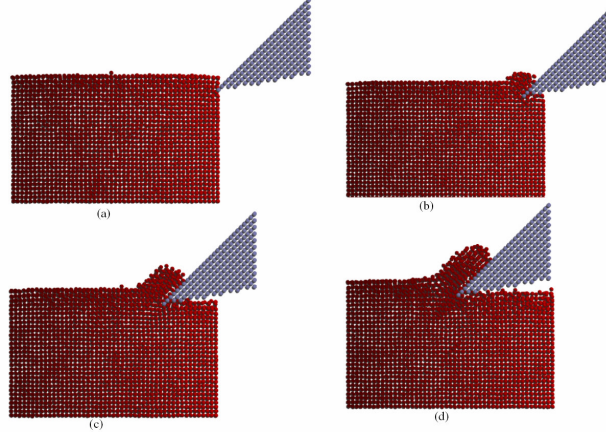
KONFIGÜRASYON	İKİ BOYUTLU veya ORTOGONAL (DİK) KESİM
İş Parçası Boyutları	a iş parçasının kafes sabitini göstermek üzere $5a \times 25a \times 15a$
Takım Boyutları	a takımın kafes sabitini göstermek üzere $20a \times 11a \times 11a$
Kesme Derinliği	$5.1 \frac{0}{A}$



Şekil 3.27 Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 10° , Kesim hızı $5ms^{-1}$) [39]



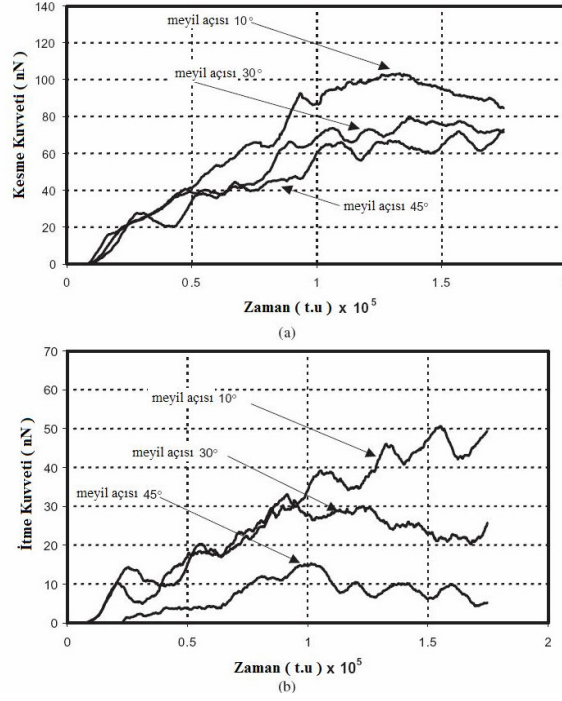
Şekil 3.28 Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 30° , Kesim hızı $5ms^{-1}$) [39]



Şekil 3.29 Nanometrik kesimin çeşitli basamaklarında Monte Carlo simülasyonu (Meyil açısı 45° , Kesim hızı $5ms^{-1}$) [39]

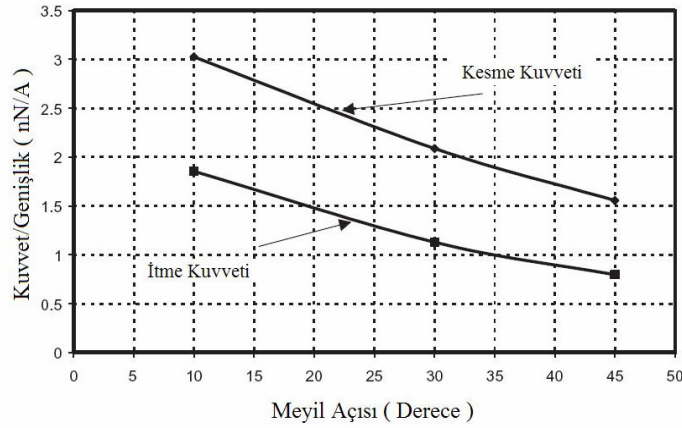
Şekil 3.30 (a) ve (b) $5ms^{-1}$ kesim hızında, Monte Carlo simülasyonunda, üç pozitif meyil açısı için, yani 10° , 30° ve 45° , kesim zamanıyla sırasıyla kesme ve itme kuvvetlerindeki değişimi gösterir. Meyil açısı arttıkça, kesme ve itme kuvvetlerinin azaldığı görülebilir. Şekil 3.31, $5ms^{-1}$ kesim hızında meyil açısıyla Monte Carlo simülasyonunda, her birim genişlikte ortalama kesme ve itme kuvvetlerindeki değişimi gösterir. İki kuvvetin de artan meyil açısıyla azaldığı görülebilir. Şekil 3.32, Monte Carlo simülasyonunda $5ms^{-1}$ kesim hızında meyil açısıyla kuvvet oranındaki (itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranı) değişimi gösterir. Meyil açısı 10° 'den 45° 'ye yükselirken, Şekil 3.32 ve Tablo 3.4'de gösterildiği gibi, kuvvet oranı azalır.

Şekil 3.33, Monte Carlo simülasyonunda, $5ms^{-1}$ kesim hızında meyil açısıyla, sırasıyla, takım yüzeyindeki her birim genişlikte, sürtünme kuvveti ve makaslama yüzeyinde her birim genişlikte, makaslama kuvvetinin değişimini gösterir. Meyil açısının artışıyla, iki kuvvetin de azaldığı görülebilir (detaylar için: Tablo 3.5). Şekil 3.24, $5ms^{-1}$ kesim hızında meyil açısıyla makaslama açısındaki değişimi gösterir. Meyil açısındaki artışla, makaslama açısının arttığı görülebilir. Bu, farklı meyil açılı takımlarla, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonundan görülebildiği gibi; meyil açısındaki artışla, talaş kalınlığının azalmasından kaynaklanır (Şekil 3.27-3.29). Şekil 3.35, Monte Carlo simülasyonunda $5ms^{-1}$ hızında, meyil açısıyla, özgül enerjideki (iş parçasının birim hacminin yer değişimi için gerekli enerji) değişimi gösterir. Meyil açısı 10° 'den 45° 'ye yükseldikçe, özgül enerjinin de azaldığı görülebilir (detaylar için: Tablo 3.4).



Şekil 3.30 $5ms^{-1}$ kesim hızında, farklı meyil açıları için, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, (a) kesme kuvvetindeki değişim (b) itme kuvvetindeki değişim [39]

Şekil 3.36, kesim zamanıyla, kesim bölgesindeki sıcaklık değişimini gösterir. $5ms^{-1}$ 'de kesim bölgesindeki sıcaklığın, yaklaşık $400K$ olduğu görülür. Bu, $500ms^{-1}$ 'de kesim bölgesindeki yaklaşık $1000K$ sıcaklıkla çelişir.



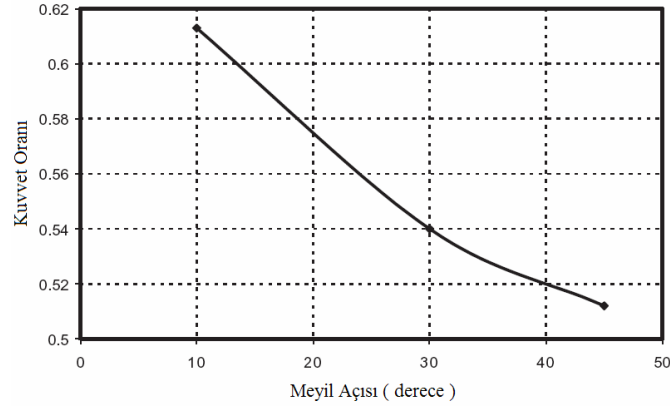
Şekil 3.31 $5ms^{-1}$ kesim hızında, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, her birim genişlikte kesme kuvvetindeki ve her birim genişlikte itme kuvvetindeki değişim [39]

Tablo 3.4 Farklı meyil açılarıyla, yani, 10° , 30° ve 45° (iş parçası boyutları için, Tablo 3.3), $5ms^{-1}$ 'de Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunun sonuçları [39]

Meyil Açısı (derece)	Birim Genişlik İçin Kesme Kuvveti (Nmm^{-1})	Birim Genişlik İçin İtme Kuvveti (Nmm^{-1})	Kuvvet Oranı	Özgül Enerji ($10^5 Nmm^{-2}$)
10	3.0253	1.854	0.613	0.593
30	2.0885	1.128	0.540	0.384
45	1.5556	0.796	0.512	0.305

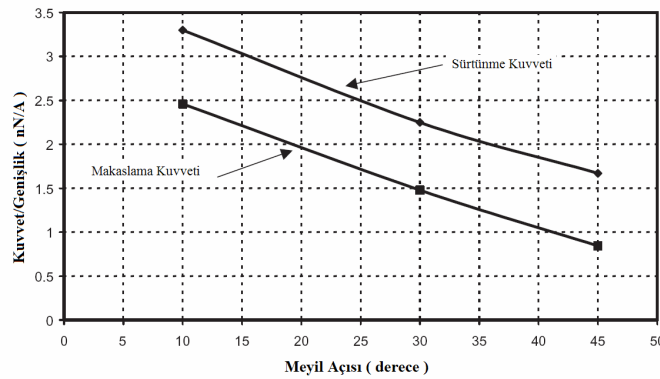
Sonuç olarak,

- 1) Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonu ilk kez uygun $5ms^{-1}$ kesim hızında yürütüldü. Monte Carlo yöntemi; Markov rasgele ölçüm ile atomların yeni şekillerini belirlemede sıcaklık eğimiyle kullanmak için uyarlanan Metropolis Kabul-Ret ölçütünü birleştirir.
- 2) Nanometrik kesimin Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarında kesim bölgesindeki sıcaklık, makroskopik ölçekte Komanduri ve Hou tarafından geliştirilen kesim işleminin termik modeli kullanılarak tahmin edilir. Termik modelin sonuçlarıyla, harmonik salıngaç enerji paylaşırımı kullanılarak elde edilen moleküler dinamik simülasyonun sonuçları arasında oldukça iyi uyuma bulundu. Bu yerel sıcaklık, Boltzmann Kabul-Ret kriterinde kullanılmış. Bundan dolayı, kesim hızı Monte Carlo simülasyonuna, kesme hızı ilişkili olduğundan kesim bölgesindeki sıcaklık yoluyla dolaylı olarak dahil edilmiştir.
- 3) Nanometrik kesimin, benzer kesim koşullarında oldukça iyi uyumla sonuçlanan, Monte Carlo ve moleküler dinamik simülasyonlarının karşılaştırılması, $500ms^{-1}$ 'lik kesme hızında yürütülmüştür. Beklenildiği gibi, Monte Carlo hesaplamalarından elde edilen durgun kuvvetler; moleküler dinamik simülasyonundaki eylemsizlik kuvvetlerinin varlığından ve Monte Carlo çalışmaları için uzunca kesme derinliğinden dolayı moleküler dinamik simülasyondan elde edilen sonuçları aşar.



Şekil 3.32 $5ms^{-1}$ kesim hızında, nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla kuvvet oranındaki (itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranı)değişim [39]

- 4) Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonu; tek kristalli alüminyum iş parçasında (001) düzleminde, [100] yönünde kesikle, üç pozitif meyil açılı takımı yani 10° , 30° ve 45° , $5ms^{-1}$ kesme hızında; kesme ve itme kuvvetleri, kuvvetler oranı, takım yüzeyindeki sürtünme kuvveti, makaslama bölgesindeki makaslama kuvveti ve özgül enerji üzerindeki, meyil açısının etkisini araştırmak için yürütülür. Kesme ve itme kuvvetleri, kuvvetler oranı, takım yüzeyindeki her birim genişlikteki sürtünme kuvveti, makaslama bölgesinde her birim genişlikte makaslama kuvveti ve özgül enerji, hepsi; gerçekte bulunduğu gibi; meyil açısının artmasıyla azalır. Sadece makaslama açısının, beklendiği şekilde, talaş kalınlığının azalmasından kaynaklı olarak, meyil açısındaki artışla arttığı bulundu. Meyil açısıyla meydana gelen bu değişimler, uygulamalı kesim deneyleriyle tutarlıdır.

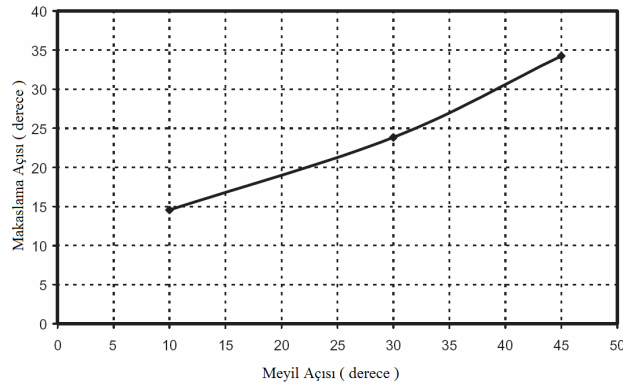


Şekil 3.33 $5ms^{-1}$ kesme hızıyla nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, her birim genişlikte sürtünme kuvvetindeki ve her birim genişlikte makaslama kuvvetindeki değişim [39]

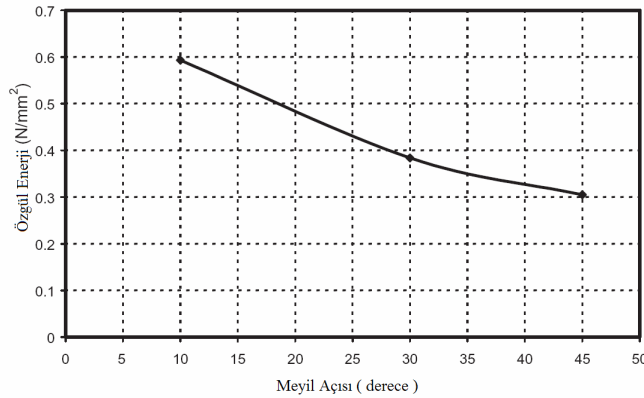
Tablo 3.5 Farklı meyil açılarıyla, (iş parçası boyutları için, Tablo 3.3), $5ms^{-1}$ 'de Alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunun sonuçları [39]

Meyil Açısı (derece)	Birim Genişlik İçin Kayma Kuvveti (Nmm^{-1})	Kayma Açısı (derece)	Birim Genişlik İçin Sürtünme Kuvveti (Nmm^{-1})
10	2.46	14.54	3.30
30	1.48	23.84	2.25
45	0.84	34.24	1.67

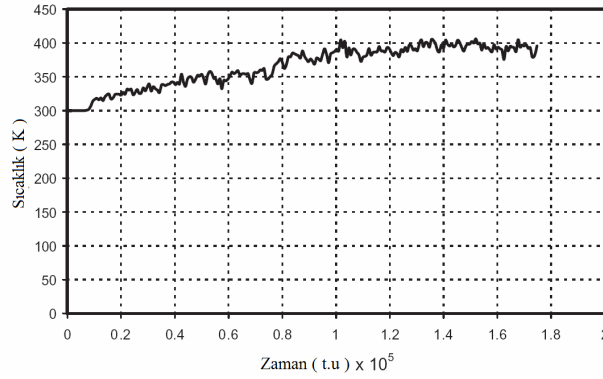
- 5) $5ms^{-1}$ kesme hızında 10° meyilli takımla, kesim bölgesindeki sıcaklığın $400K$ olacağı bulundu. Bu, $500ms^{-1}$ 'de kesim bölgesindeki yaklaşık $1000K$ sıcaklıkla çelişir [39].



Şekil 3.34 $5ms^{-1}$ kesim hızında, alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, makaslama açısındaki değişim [39]



Şekil 3.35 $5ms^{-1}$ kesim hızında, alüminyumun nanometrik kesiminin Monte Carlo simülasyonunda, meyil açısıyla, özgül enerjideki değişim [39]



Şekil 3.36 Nanometrik kesimin Monte Carlo simülasyonunda, kesim zamanıyla, kesim bölgesindeki sıcaklığın değişimi [39]

3.5 Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu

Moleküler dinamik simülasyon metodunun başlangıç noktası, fiziksel sistemin mikroskobik yapısının çok iyi şekilde tanımlanmasıdır. Sistem birkaç veya çok parçacıklı olabilir. Sistemin tanımlanması Hamiltonian, Lagrangien veya Newton hareket denklemleriyle yapılabilir.

Moleküler dinamik simülasyon metoduyla yapılan bir simülasyonda, hareket denklemleri bir bilgisayar yardımıyla sayısal olarak çözülür. Bunun için denklemler, bilgisayarda sayısal değerlendirmeye uygun şemalara dönüştürülür. Genel olarak, diferansiyel operatörlere sahip sürekli değişkenlere dayanan bir tanımlamadan, sonlu fark operatörleri ve kesikli değişkenlere sahip bir tanımlamaya geçilir. Bu aşamada doğan hatanın büyüklüğü seçilen yaklaşıma bağlıdır. Teorik olarak hata, bilgisayarın hız ve hafızasına bağlı olarak çok küçük seviyelere çekilebilir [56].

Metal malzemelerin nano ölçekte şekillendirilmelerindeki mekanizmalar, makro ölçekte gösterdikleri sürekli yapılardan ihmal edilemez derecede sapmalar gösterirler. Nano ölçekte talaş kaldırma analizlerinde, malzemelerin plastik akış ve kırılmalarının atomik boyutta oluşması nedeniyle sürekli ortamlar mekaniği ilkeleri kullanılamamaktadır. Moleküler dinamik teknikleri, yüksek hassasiyette, elmas kesici takımlarla donatılmış yüksek maliyette tezgahlar kullanmadan, nano ölçekte talaş kaldırmanın modellenmesini, simüle edilmesini sağlar. Çalışma bölgesinin bilgisayar kapasitesine bağlı olarak sınırlı olduğu modelleme çalışmalarında, takım-iş parçası

etkileşimleri gözlenebilmekte, yüksek çözünürlükte analiz yapılabilen, uç yarıçapı, talaş açısı gibi takım geometrisi ve kesme derinliği gibi işleme etki eden değişkenler kolaylıkla ve etkin olarak değiştirilebilmekte, malzemenin kristal yapısının işleme esnasındaki etkileri gözlenebilmektedir [5].

3.5.1 Moleküler Dinamik Modellemenin Temelleri

3.5.1.1 Faz Uzayı Yörüngeleri

Moleküler dinamik ile modellemenin birinci hedefi sonlu bir zaman için moleküler izler yaratmaktır. Yörünge kavramını, atomların sadece pozisyonlarını değil, aynı zamanda moleküler momentumlarını da içerecek şekilde genişletmek gerekir. Önceden belirli potansiyel enerji fonksiyonuna göre birbirleriyle etkileşen N adet küresel atom ele alınırsa, her atomun merkezi, r_i pozisyon vektörüyle gösterildiğinde, izole edilmiş sistemde çevresiyle kütle ya da enerji alışverişinde bulunmayan atomlar, zaman bağımlı $r_i(t)$ pozisyon vektörleriyle gösterilebilen yörüngeler yaratarak, Newton yasalarına göre hareket eder. Bir atom, yörüngesini takip ettikçe, diğer atomlarla etkileşimleri sebebiyle momentumu da değişir, bu sebeple elimizde zaman bağımlı momentum vektörleri $p_i(t)$ 'de vardır.

Bu yaklaşımla “faz uzayı” denilen, atomların pozisyonlarının ve momentumlarının verilebildiği $6N$ boyutunda bir hiperuzay düşünülebilir. Bu faz uzayı, iki kısımdan oluşur: birinci kısım, koordinat vektörlerinin pozisyon vektörleri $r_i(t)$ 'nin komponentlerini içerdiği $3N$ boyutlu “konfigürasyon uzayı”, ve ikinci kısım, koordinat eksenlerinin momentum vektörleri $p_i(t)$ 'nin komponentlerini içerdiği $3N$ boyutlu “momentum uzayı”dır.

Bu durumda, N adet atomlu tüm sistemin pozisyonları ve momentumları, bu uzayda tek bir noktayla ifade edilebilir. Pozisyonlar ve momentumlar zamanla değiştikçe, bu nokta, faz uzayında bir yörünge verecek şekilde hareket eder. Artık moleküler dinamiğin birinci hedefini yeniden yazılabilir: “faz uzayı yörüngesini hesaplamak”. Yörünge, Newton'un ikinci yasasını ya da Hamiltonian'ın hareket denklemlerini nümerik olarak çözerek elde edilir.

Faz uzayı yörüngesine basit bir örneği tek boyutlu harmonik osilatör, ODHO, verir. Eğer ODHO'yu, Şekil 3.37'deki, bir yayın ucuna bağlanmış ve kütleli bir cisim olarak modellersek, görüldüğü gibi kütle-yay sistemi çevresel etkilerden izole edilmiştir. Yay sıkıştırıldığında ya da açıldığında, yer değişimine γ katsayısıyla hesaplanan bir direnç gösterir. Ayrıca, yay r gibi bir yer değiştirmeye uğradığında, kütle r_0 denge pozisyonundan $x = r - r_0$ uzakta ve sistemin potansiyel enerjisi;

$$u(x) = \frac{1}{2} \gamma \cdot x^2 \quad (3.70)$$

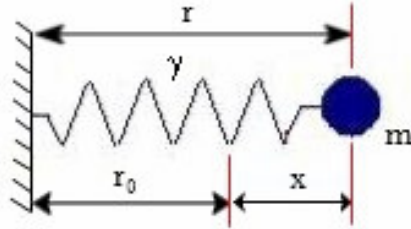
olur. İzole edilmiş bir sistemde Newton'un yasaları geçerlidir, böylelikle hareket denklemleri;

$$F(x) = \dot{p} = m \cdot \ddot{x} = \frac{du(x)}{dx} \quad (3.71)$$

Buradan da,

$$m \cdot \ddot{x} = \gamma \cdot x \quad (3.72)$$

elde edilir.



Şekil 3.37 Bir boyutlu ODHO'nun hareketi, $x = r - r_0$ [84]

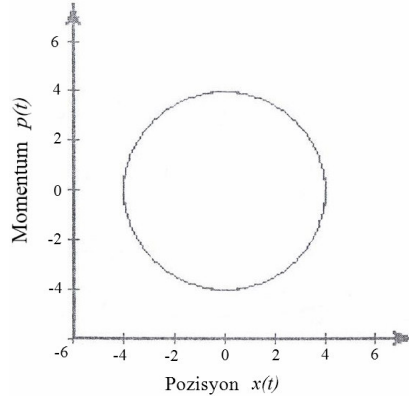
Bu sebeple, kütleye etki eden $F(x)$ kuvveti, deplasman boyunca lineerdir. Başlangıç koşullarından $\{x(0), p(0)\}$, zamana bağlı $x(t)$ ve momentum $p(t)$ Denklem (3.72) çözülerek elde edilebilir. Yine de, bu basit durumda faz uzayını bulmak için (3.72) no'lu denklemi çözmemiz gerekmez. Sistem izole edilmiş olduğu için, toplam enerji E , hareketin bir sabiti olmalıdır.

$$E_T = E_k + U \quad (3.73)$$

Burada E_k ve U , sırasıyla kinetik ve potansiyel enerjidir.

$$E_T = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} \gamma \cdot x^2 \quad (3.74)$$

Bu durum için faz uzayı iki boyutludur: bir pozisyon koordinatı x ve bir momentum koordinatı p . Bu düzlemde, Denklem (3.74)'e göre, faz noktası $(2mE_T)^{1/2}$ ve $(2E_T/\gamma)^{1/2}$ yarı eksenlerine sahip bir elipsi verir. Şekil 3.38'de $m = 1$, $\gamma = 1$ değerlerine sahip bir ODHO için faz uzayı yörüngesi görülebilir. Görülmektedir ki, $x(0)$ ve $p(0)$ başlangıç durumları, toplam enerji E_T 'nin sabit değerini vermektedir, bu sebeple bir dizi başlangıç şartları için, sadece faz uzayının sınırlı bir bölgesi izole bir sisteme girebilir.



Şekil 3.38 $(2mE_T)^{1/2}$ ve $(2E_T/\gamma)^{1/2}$ yarı eksenlerine sahip faz uzayı yörüngesi [6]

Denklem (3.74)'i daha formal olarak momentumun tanımı ve ikinci yasanın iki formu, Denklem (3.71) ve (3.72) , kombinasyonu olarak geliştirebilir;

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \text{ ve } \dot{p} = \gamma \cdot x \quad (3.75)$$

Faz uzayı yörüngesini elde etmek için, (3.75) no'lu denklemdeki iki eşitliği birleştirip, zamanı göz önüne almazsak;

$$\frac{dx}{dp} = \frac{p}{m} \left(\frac{-1}{\gamma \cdot x} \right) \quad (3.76)$$

olur. Bu eşitlik, değişkenleri ayrılarak integre edildiğinde, Denklem (3.74) elde edilir. Faz uzayı için ikinci bir örnek olarak, N molekülü izole edilmiş ideal gaz sistemi verilebilir. Bu sistem

için faz uzayı $6N$ boyutludur. Sistemin izole edilmiş olması sebebiyle, toplam enerji E korunmaktadır, fakat sistem ideal gaz olduğu için, moleküller arası potansiyel enerji yoktur, toplam enerji atomların kinetik enerjilerinden ibarettir.

$$E_T = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i \cdot p_i = \text{sabit} \quad (3.77)$$

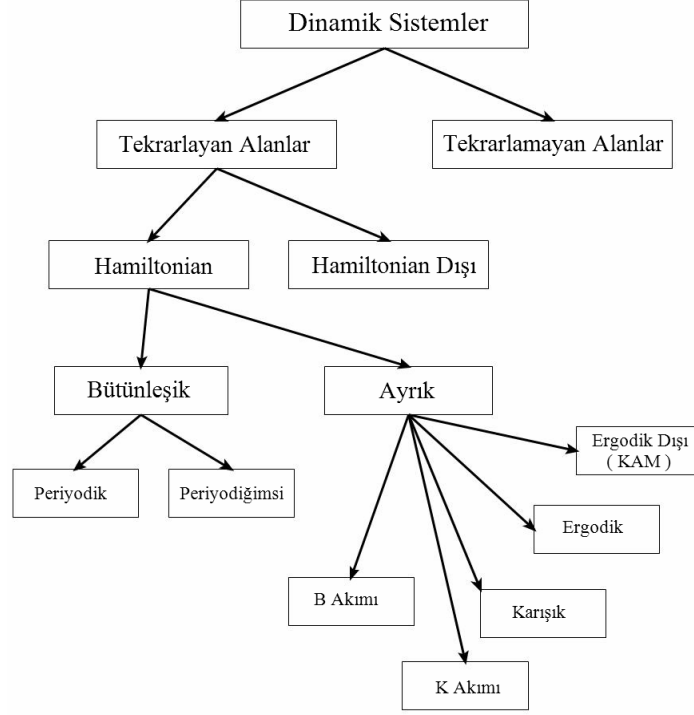
Bu sebeple konfigürasyon uzayında faz noktası herhangi bir yerde olabilir, fakat momentum uzayında $3N$ boyutlu, $(2mE)^{1/2}$ yarıçaplı bir hiperkürenin yüzeyiyle sınırlıdır. Her iki örnekte de sisteme etkiyen dış etkenler, faz uzayını faz noktası olarak sınırlarlar.

3.5.1.2 Dinamik Sistemlerin Sınıflandırılması

Faz uzayı yörüngelerinin unsurları, dinamik sistemlerde nesnelere hareketlerinin sınıflandırılmasında kullanılabilir. Şekil 3.39'da görülebileceği üzere, bu sınıflandırma hiyerarşik bir formdadır. Hiyerarşinin ilk seviyesinde, “tekrarlanan yörüngelere” sahip sistemler, “tekrarlanmayan yörüngelere” sahip sistemlerden ayrılır. Daha genel olarak, tekrarlayan sistemler Poincaré'nin tekrarlama teoremine uyarlar; sonlu bir hacimdeki bir faz uzayı için, faz noktası keyfi yakınlıkta ve sonsuz sıklıkta, yörüngede oluşabilen hemen hemen tüm konfigürasyonlardan geçecektir. Yine de, birkaç nesneden fazla elemana sahip sistemlerde, Poincaré tekrarlama için gereken zaman çok büyüktür.

Tam bir Hamiltonian'ın hareketi kontrol edip etmemesine göre, tekrarlayan yörüngeler Hamiltonian ya da Hamiltonian dışı olabilir. Hamiltonian dışı sistemlere örnek olarak değişik formlarından biriyle sürtünmeyi içeren dağınık sistemler verilebilir. Hamiltonian dışı sistemler, denge dışı moleküler dinamik yöntemleriyle incelenebilir. Böyle durumlarda, parçacık alanları hareket denklemlerinden elde edilir, fakat bu denklemler Hamiltonian fonksiyonları içermezler.

Hamiltonian sistemlerde, yörünge faz uzayında sabit H 'ın hiper yüzeyi olarak sınırlıdır. Hamiltonian sistemler bütünleşik ve ayrık olmak üzere ikiye ayrılabilir. Bütünleşik sistemlere örnek olarak ODHO verilebilir, bunlarda hareket sabitlerinin sayısı, serbestlik derecelerinin sayısına eşittir. Çoğu durumda, korunan nicelikler küçüktür, hareket denklemleri non-lineer terimler içerir, bu sebeple sistemler, çok az nesne içerse bile, genellikle ayrıktır.



Şekil 3.39 Dinamik sistemlerin sınıflandırılması ve faz uzayında hareket hiyerarşisi [6]

(a) Bütünleşik Sistemler:

Bütünleşik sistemler, periyodik hareket eden ve periyodiğimsi hareket eden sistemler olmak üzere ikiye ayrılırlar. Periyodik hareketin anlamı, sonlu bir zaman süresince faz yörüngesi kendini tekrar edecek demektir. Faz noktasının hareketinin tamamen diferansiyel denklemlerle belirlenmesi sebebiyle, bir kere faz noktası kendi alanını oluşturdu mu, bu alan sonsuza dek tekrarlanacaktır. Tek serbestlik derecesine sahip Hamiltonian sistemler bütünleşik ve periyodiktir.

Şekil 3.40 (a)'da görüldüğü üzere, periyodiğimsi hareket, bir top ve birbirlerine 90° 'lik açıyla topa bağlanmış iki yay ile temsil edilebilir. Yay sabitleri γ_x ve γ_y 'dir, fakat bir yayın hareketi diğerinin hareketini etkilemez, yaylar bağlanmamıştır. Böyle bir sistem iki serbestlik derecesine sahiptir (x ve y) ve faz uzayı dört boyutludur (x , y , p_x ve p_y). İki türdeki hareket, iki boyutlu harmonik osilatör ile oluşturulabilir. Şekil 3.40 (b) ve (c) için $m = 1$, $x(0) = y(0) = 2$ ve $p_x(0) = p_y(0) = 0$, $\gamma_x/\gamma_y = 4/9$, yörüngeler periyodiktir, böylelikle kütle belirli bir yolu

tekrar eder. Şekil 3.40 (d) ve (e)'de $\gamma_x/\gamma_y = 4/10$ olursa, hareket periyodığımsidir ve kütle bir alanı tarar. Yayların bağlı olmamaları sebebiyle, her birinin enerjisi zaman içerisinde sabittir;

$$E_x = \frac{1}{2m} \cdot p_x^2 + \frac{1}{2} \gamma_x^2 = c_1 \quad (3.78)$$

$$E_y = \frac{1}{2m} \cdot p_y^2 + \frac{1}{2} \gamma_y^2 = c_2 \quad (3.79)$$

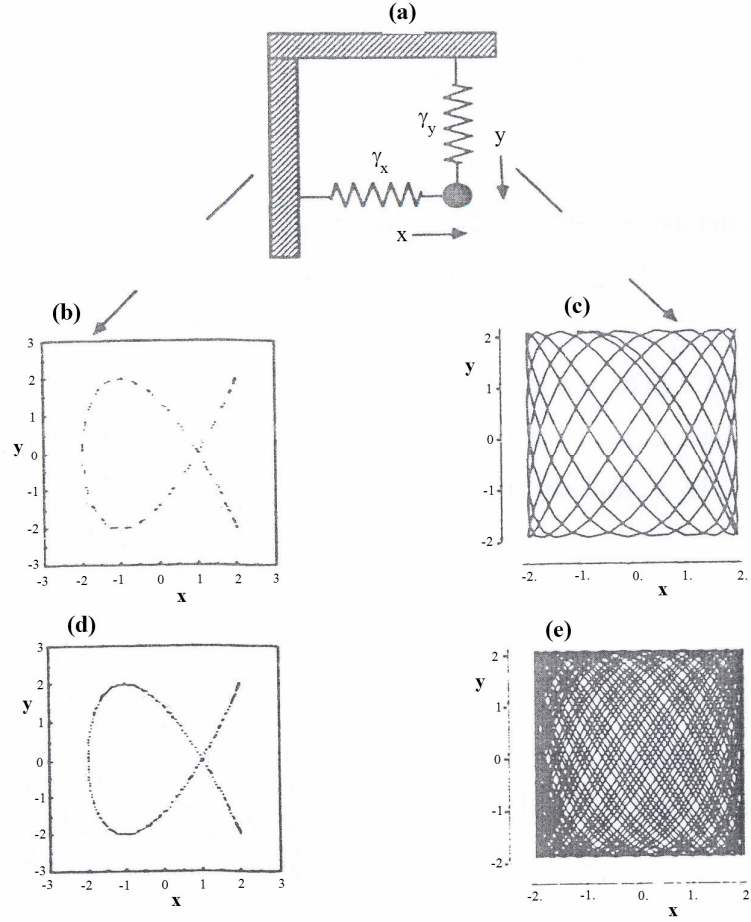
Bu iki denklem, dört boyutlu faz uzayında bir torusun iki boyutlu yüzeyini belirlerler. Sistemin izole olması sebebiyle, Hamiltonian toplam enerjidir;

$$E_T = E_x + E_y = \text{sabit} \quad (3.80)$$

Bu da üç boyutlu bir yüzey belirler.

Hareketin sabitlerinin sayısı (E_x ve E_y), serbestlik derecelerinin sayısına eşit olması sebebiyle, sistem bütünleşiktir. Ayrıca, eğer yay sabitleri frekans oranını $\omega_x/\omega_y = \sqrt{\gamma_x/\gamma_y}$ rasyonel bir sayı olursa, hareket periyodiktir. Bu durumda, Şekil 3.40 (b) ve (c)'de görüldüğü gibi, sürekli olarak reel $x - y$ düzleminde belirli bir yolda ileri geri hareket eder. Bu faz yörüngesinde (3.78) ve (3.79) no'lu denklemlerde belirtildiği şekilde yörünge bir torusun yüzeyi üzerindedir. Fakat frekans oranı $\sqrt{\gamma_x/\gamma_y}$ irrasyonelse, hareket periyodığımsidir. Bu durumda faz uzayı yörüngesi torusun iki boyutlu yüzeyi etrafında dolanır, alan bu yüzeyi yoğun olarak kaplar fakat kendisiyle hiçbir zaman kesişmez. $x - y$ düzleminde, top bir çizgiye bağlı değildir, zaman ilerledikçe Şekil 3.40 (d) ve (e)'de görüldüğü gibi, bir alanı kaplar

Her ne kadar, periyodığımsi sistemin yörüngesi bir torusun yüzeyini kaplasa da, torus tüm sabit enerji yüzeyini içermez. Örneğimizde, faz uzayı dört boyutlu, sabit enerji yüzeyi üç boyutlu ve torus yüzeyi iki boyutludur. Verilen başlangıç şartları için, pozisyonlar (x, y) ve momentumlar (p_x, p_y) sabit enerji yüzeyine uyarlar fakat torusun yüzeyine uymazlar. Bu yüzden, periyodığımsi sistemlerin yörüngeleri istatistiksel mekanikle bağdaşmaz, çünkü istatistiksel mekanik, izole bir sistem için, sabit enerji yüzeyinde herhangi örnek nokta için eşit önsel olasılık varsayar.



Şekil 3.40 İki serbestlik derecesine sahip hareketin yay sabitleri oranına bağlı olarak faz uzayı yörüngeleri. (a) iki boyutlu harmonik osilatör, (b) yay sabitleri oranı rasyonel ise periyodik faz uzayının 100 adım sonraki görüntüsü, (c) yay sabitleri oranı rasyonel ise periyodik faz uzayının 500 adım sonraki görüntüsü, (d) yay sabitleri oranı irrasyonel ise periyodikimsi faz uzayının 200 adım sonraki görüntüsü, (e) yay sabitleri irrasyonel ise periyodikimsi faz uzayının 1000 adım sonraki görüntüsü [6]

(b) Ayrık Sistemler:

Ayrık sistemler beş alt sisteme ayrılır: non-ergodik, ergodik, karışık, K akımı ve B akımı. Bu beş alt sistemin aralarındaki fark kararlılık fikrini temel alır; yani yörüngeyi Şekil 3.41’de görüldüğü gibi, küçük bir sapmaya verdiği tepkiye göre sınıflandırılır. Non-ergodik hareket, (KAM olarak da bilinir), “çok hafif” ayrık sistemler tarafından gösterilir. Bu sistemler şu Hamiltonian forma uyarlar;

$$H = H_0 + H_p \quad (3.81)$$

Burada H_0 , bütünleşik bir Hamiltonian ve H_p , küçük bir sapmadır. İki boyutlu harmonik osilatör örneğinde (Şekil 3.40) x ve y yönleri arasında non-lineer bir bağlam ile sisteme küçük bir sapma eklediğimizi varsayalım. Bunun gibi sistemlerde, ayırık sapma çok küçük olduğu sürece, küçük bir grup özel yörüngeler haricinde, faz uzayı yörüngesi bir torusla sınırlıdır. Bu toruslar bütünleşik ($H_p = 0$) şekillerinden hafifçe titreşmiş olabilirler, fakat yine de hareket genellikle periyodik ya da periyodığımsidir. KAM hareketinin bir sonucu da, çoklu harmonik osilatörlü bir sistemde, küçük anharmonik sapmaların girişi sistemi ergodik yapmaz.

Ergodisiteye uygun görülmüş birçok anlam mevcuttur. Boltzmann'a ithaf edilen anlam şöyledir; “yeterince uzun bir zaman sonra faz noktası sabit Hamiltonian yüzey üzerindeki tüm konfigürasyonlardan geçer.”

Bununla ilişkili bir kavram olarak da periyodığımsi hareket; “yeterince uzun bir zaman sonra faz noktası sabit Hamiltonian yüzeyi üzerindeki konfigürasyonlara keyfi yakınlıkta geçer” şeklinde ifade edilebilir.

Başlangıç koşullarına hassasiyet, bir yörüngenin kararlılığının belirlenmesi için kullanılabilir. Burada, zaman eksenine paralel olan kesintisiz çizgiler, üç esas (sapmamış) alanı gösterirler. Her birine sıfır anında $d(0)$ yer değişimi (sapma) uygulanmıştır; kararsızlığın seviyesi sapmış yörüngenin esas alandan farklılaşma hızına göre belirlenir. Bu sebeple, kararlı bir yörünge boyunca yer değişim sabittir (en üstte), periyodığımsi bir yörünge boyunca yer değişim yavaşça artar (ortada), fakat kararsız bir yörüngede yer değişim eksponansiyel (üstel) olarak artar. Periyodığımsi harekette değişimin artışı, burada görüldüğü gibi, lineer olmak zorunda değildir, fakat artışın formu ne olursa olsun, kararsız hareketin eksponansiyel artışıyla karşılaştırıldığında, hız yavaştır. Şekil 3.41'de, kararlı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları görülmektedir.

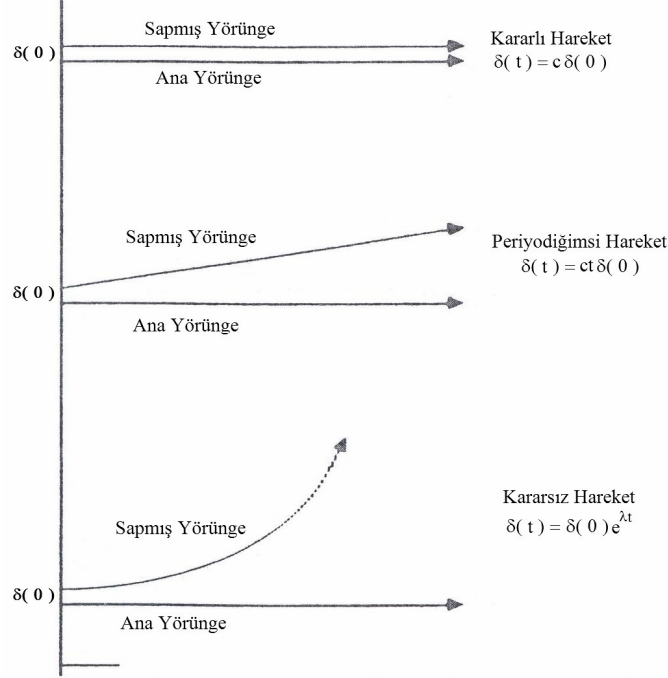
Bu orijinal tanımlamalara göre, üç boyuttaki dinamik sistemler ne ergodiktir ne de periyodığımsidir. Non-ergodisitenin ispatı set teorisinden ve ölçüm teorisinden matematik etmenler içerir. Kısaca değinmek gerekirse, “olası her noktadan (ya da yaklaşık olası her

noktadan) geçen sabit Hamiltonian yüzeydeki yörünge için, alan er geç kendiyile kesişecektir. Kesişme noktasında hareket ister istemez periyodik olacaktır.”

Bunun ışığında, modern istatistik matematikçiler, Monte Carlo simülasyonunda hesaplandığı gibi, ergodisiteyi “yörüngedeki bir fonksiyonun zaman ortalaması toplam sistem ortalamasına eşittir” olarak ele alırlar. Yine de, bu ergodisite tanımı bize faz uzayı yörüngesi hakkında bir şey söylemez, hatta yörüngelerin kararlılığı hakkında hiçbir şey söylemez. Ergodisitik bir yörünge kararlı olabilir; sapmış ergodik alan sapmamış esas alanına yakın ve alanla ilişkide olabilir. Bu sebeple ergodisite, keyfi denge dışı durumdan başlayıp geri dönüşümsüz olarak denge durumlarına evrimleşmeyebilir.

Dengesiz durumlardan denge dışı durumlara evrimleşecek bir sistem için, faz uzayı yörüngesi küçük sapmalara karşı kararsız olmalıdır. Sapmış yörünge, sapmamış esas yörüngesinden uzaklaşmalıdır. Uzaklaşmanın hızı, kararsızlığın derecesini belirler; kararsız hareketlerin en düşük seviyesi “karışık” harekettir. “karışık” hareket de uzaklaşmanın hızı yüksek ya da düşük olabilir. Bir sonraki seviyede “K akımı” (Kolmogorov’dan sonra); küçük bir sapmaya cevap olarak, K akımı yörüngesi sapmamış esas alandan eksponansiyel olarak uzaklaşır. Kararsız yörüngelerin en yüksek seviyesi “B akımı” (Bernoulli’den sonra) yörüngesidir. B akımında sapmış yörüngede gözlenen durum, aynı anda esas yörüngede gözlenen durumdan tamamen ilişkisizdir. Bir B akımı alanı, temelini oluşturan hareket denklemlerinin tanımlanmış olmasına rağmen, rasgele oluşur.

Denge dışı durumdan denge durumuna evrimleşecek bir sistem için, iki koşul sağlanmalıdır. Birincisi, tüm sabit Hamiltonian yüzeye erişim sağlanmalıdır. Fakat bu yeterli değildir; çünkü tüm yüzeye erişim, alanın o yüzeyi kaplayacağı anlamına gelmez. Bu sebeple, ikinci şart da, hareket en azından “karışık” olmalıdır ki, alan sabit Hamiltonian alanın tamamını örnekleyebilsin. Bu şartların ikisini birden sağlayamayan sistemler “karışık dışı” olarak adlandırılırlar. Görülebilir ki, periyodigimsi hareket “karışık dışı”dır, çünkü sapmış alan esas alandan yavaşça farklılaşsa da periyodigimsi hareket sabit H yüzeyin uzay altına sınırlandırılmıştır.



Şekil 3.41 Kararlı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları [6]

Alanlar periyodik ya da periyodikimsi olsalar bile, hesaplanan yörünge simülasyondaki sonlu zaman esnasında, H yüzeyini verdiği için emin olamayız; alan yüzeyin bir bölgesinde sıkışabilir. Bu tür durumlar “yarı kararlı (metastable)” olarak adlandırılır. Potansiyel fonksiyonu;

$$U(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \gamma_1 \cdot x^2 & x < x_1 \\ \frac{3}{4} \left(\frac{1}{2} \gamma_1 x_1^2 \right) + \frac{1}{2} \gamma_2 (x - x_2)^2 & x \geq x_1 \end{cases} \quad (3.82)$$

formuna uyan bir boyutlu osilatör göz önüne alınırsa; bu fonksiyonun formu Şekil 3.42’de görülmektedir. Bu potansiyeldeki olası güçlük, x_1 bariyeriyle birincil minimum noktasından ayrılan ikincil minimum noktasıdır. Bu sistemin enerji korunum denklemi;

$$E_T = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} \gamma_1 \cdot x^2 & x < x_1 \\ \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + \frac{3}{4} \left(\frac{1}{2} \gamma_1 \cdot x_1^2 \right) + \frac{1}{2} \gamma_2 (x^2 - x_1^2) & x \geq x_1 \end{cases} \quad (3.83)$$

olacaktır. $m = 1$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 5$, $x_1 = 2$ ve $x_2 = 5$ (tümü keyfi birimlerde) olduğu varsayılırsa, Şekil 3.42 (a)'daki yörünge elde edilecektir. Şekil 3.42 (b)'deki herhangi bir başlangıç pozisyonu ve başlangıç momentumu, alanın ikinci minimum için bölgesini belirler, sonuçta Şekil 3.42 (c)'deki gibi faz uzayı yörüngelerini oluşturur. Aksine, diğer başlangıç koşulları, Şekil 3.42 (d)'deki gibi faz uzayı izlerini oluşturacak şekilde birincil minimum için olan bölgeyi verecektir. Dikkat edilmelidir ki, Şekil 3.42 (c) ve (d)'deki yörüngeler aynı toplam enerjiye sahiptirler. Her ikisi de aynı sabit enerji yüzeyinin parçalarıdır. Yine de, Şekil 3.42 (c)'deki yörünge, Şekil 3.42 (d)'deki yörüngede hesaplanmış özelliklerden farklı ortalama özellikler verirler. Bu basit örnek göstermektedir ki, bazı sistemler için, yörüngenin dengesiz hareket derecesinden bir başkasına geçebileceği kinetik enerjiler olabilir.

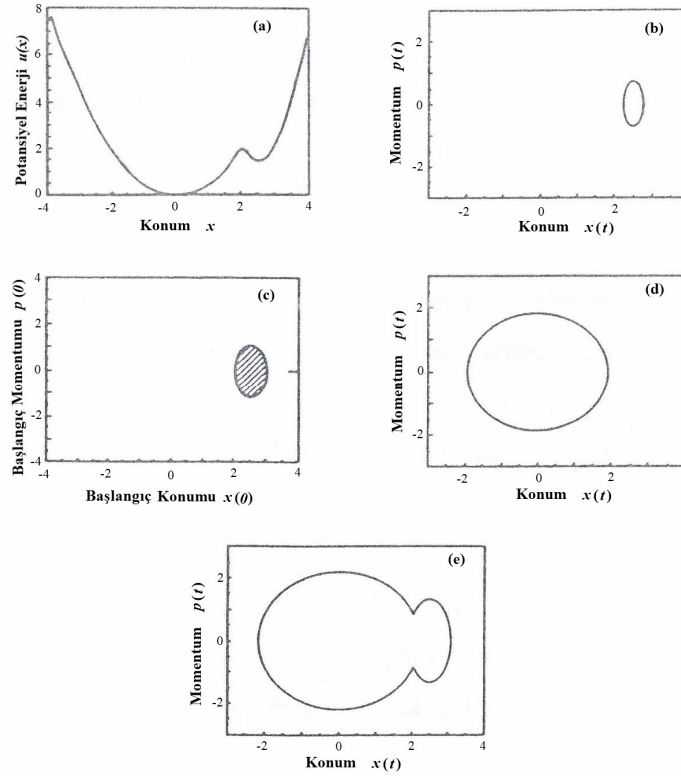
Şekil 3.39'da görülen Hamiltonian dinamiğinin yedi sınıfı (periyodikten B akımına) tam olarak birbirinden ayırık değildirler, örneğin ODHO'nun hareketi hem ergodiktir hem de periyodiktir. Daha önemlisi kararsızlığın daha yüksek seviyeleri düşük seviyelerin istenen özelliklerini içerir, bu sebeple bir K akımı mutlaka ergodik ve karışık unsurlar içerir. Moleküler dinamik (MD) simülasyonlarında, hareket denklemleri ayrıktır, hesaplanan alanlar yinelenir, Hamiltonian en az karışık, tercihen K akımıdır.

3.5.1.3 Periyodik Sınır Şartları (PBC)

Makroskobik boyutlardaki sistemlerde, yan çepherlerle etkileşerek çevresel sapmalara uğrayabilecek atomların sayısı görece azdır. $N = 10^{21}$ adet atom içeren sıvı halde üç boyutlu bir sistem göz önüne aldığımızda, yan çepherlerin yakınlarındaki atom sayısı $N^{2/3} = 10^{14}$ ve yan çepherlerle etkileşmeyen atomların sayısı $N^{1/3} = 10^7$ olacaktır. Fakat $N = 500$ atomlu bir sistem düşündüğümüzde, yaklaşık 378 atom yan çepherlerle etkileşim halinde olacaktır, dolayısıyla içeride çok az sayıda atom bırakacaktır. Bu sebeple simülasyon içteki atomların tipik durumlarını

yakalamada başarısız olacak ve hesaplamalar bu durumdan etkilenecektir. Çalışmanın amacının yan çepherlerin etkilerinin araştırılması olmadığı sürece, yan çepherleri ortadan kaldırmak en doğrusudur. Bunun sağlanması için periyodik sınır şartları uygulanmalıdır.

Periyodik sınır şartlarını (PBC) simülasyonda kullanabilmek için, V hacminde sınırlı N adet atoma sahip olunması gerekir. V hacmindeki atomların yığının bir parçası olduğu göz önünde bulundurulursa; V hacmi “esas hücre” olarak adlandırılır, ki bu hücre ve çevresindeki benzerleri (replikaları) yığının özelliklerini gösterirler. Replikalar, “imaj hücreleri”dir. İmaj hücreleri, esas hücrenin şeklinde ve boyutlarındadırlar, her imaj hücresi N adet atom içerir ve her biri esas hücredeki atomların birer imajıdır. Böylelikle, esas hücre sanki periyodik olarak tekrar ederek konu malzemenin makroskobik bir örneğini oluşturuyormuş gibi davranır. Bu periyodiklik, imaj hücrelerindeki imajların pozisyonlarına ve momentumlarına etki eder.



Şekil 3.42 Faz uzayı içine sıkışmış faz noktası örneği. (a) $x = 2,5$ 'de ikincil minimumuna ulaşan bir boyutlu potansiyel (b) ikincil minimumda sıkışmış olan başlangıç konumlarının ve momentumlarının kapladığı alan, (c) $p(0) = 0$, $x(0) = 2,8$ ve $E_T = 1,725$ değerleriyle elde edilen faz uzayı yörüngesi, (d) $p(0) = 0$, $x(0) = -1,875$ ve $E_T = 1,725$ değerleriyle elde edilen birincil minimuma sıkışmış yörünge, (e) $p(0) = 0$, $x(0) = 3,1$ değerleriyle elde edilen ve tüm olası faz uzayını örnekleyen yörünge (tüm birimler keyfidir) [6]

3.5.1.4 Korunum İlkeleri

İzole edilmiş N-cisim sistemleri için, ne kütle ne de enerji çevreyle değiş tokuş edilebilirler. Korunan değerler kütle, enerji, lineer ve açısal momentumdur. Fakat izole sistemler moleküler dinamik ile simüle edildiğinde, periyodik sınır şartlarının (PBC) kullanımı simetrisini bozabilir ve bu değerlerin korunumunu engelleyebilir. Burada periyodik sınırların korunum ilkelerine etkileri ele alınacaktır.

(a) Kütle Korunumu:

Tanımına göre, izole sistemler, sabit sayıda atom içerirler ve görülmüştür ki, PBC esas hücredeki atom sayısını değiştirmemektedir. Bir atom esas hücreyi terk ettiğinde, zıt yüzdenden bir imaj atomu girer.

(b) Toplam Enerji Korunumu:

Katı yapılarda, örneğin katı kürelerdeki yapılarda çarpışma anı haricinde potansiyel enerji yoktur. Toplam enerji tamamen kinetiktir. PBC atomik momentumu değiştirmedeği için, sınırlar katı yapı simülasyonlarında enerjinin korunumunu bozmaz. Yumuşak yapılarda, PBC ile simüle edilen bir sistemde, esas hücreden çıkan atomların yerine yenisi geldiği ve hızı ve potansiyel enerjisi korunduğu için toplam enerjide korunur.

(c) Lineer Momentum:

İlke olarak PBC kullanımıyla lineer momentum korunmaktadır. Fakat bu durumda faz noktası tüm sabit enerji yüzeyini örnekleyememektedir. Bunun yanında, sabit-E ve sabit-P yüzeyleri arasındaki kesişim yüzeyinde sınırlanmaktadır. Genel olarak, bu durum sistemin üç serbestlik derecesi p_x , p_y , p_z 'yi etkilemektedir. Bu durum $N < 100$ olan sistemlerde bir düzeltme yapılmasını gerektirir, fakat $N > 100$ olan sistemlerde bu düzeltme ihmal edilebilir.

(d) Açısal Momentum:

Uzaysal rotasyon altındaki değişmezlik, açısal momentumun korunumunu sağlar. Sisteme izole olması sebebiyle dışarıdan bir tork etkisi olmayacağından;

$$B = \sum_i^N r_i \times p_i = \text{sabit} \quad (3.84)$$

olur. Burada “ \times ” vektörel çarpımı ifade eder; fakat esas hücredeki N atom için, periyodik sınırlar, B ’nin korunumunu bozarlar. t ve $t + \Delta t$ zamanları arasında esas hücreyi terk eden m atomunu düşünelim;

$$B(t) = \sum_i^N \{ [r_i(t) \times p_i(t)] + r_m(t) \times p_m(t) \} \quad (3.85)$$

Fakat $t + \Delta t$ ’de m atomu, $r_m + \alpha.L$ pozisyonuna sahip imajıyla esas hücrede yer değiştirirse, bu durumda toplam açısal momentum;

$$B(t) = \sum_i^N [[r_i(t) \times p_i(t)] + (r_m + \alpha.L) \times p_m] \quad (3.86)$$

olacaktır. Böylelikle B değeri t ve $t + \Delta t$ zamanları arasında adım değişimine uğrar. Sonlu bir zaman sonra imajlarla yer değiştirmiş atom sayısı tüm uzaysal yönlerde hemen hemen eşit olacaktır. Bu sebeple, açısal momentumun bileşenleri sabit değerleri etrafında dalgalanacaktır.

3.5.2 Sonlu Fark Yöntemleri

Moleküler dinamik algoritmalar iki sınıfa ayrılır; moleküller arası kuvvetlerin moleküller arası mesafenin sürekli fonksiyonu olduğu yumuşak yapılar ve kuvvetlerin süreksiz olduğu sert yapılar. Sert yapılar için kuvvetlerdeki süreksizlik moleküller arası potansiyellere de yansır. r yarıçaplı sert küreler aşağıdaki potansiyel enerji fonksiyonuyla etkileşirler;

$$u(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \quad (3.87)$$

Bu sebeple, sert küreler birbirlerine sadece çarpıştıklarında kuvvet uygularlar. Çarpışmalar arasında kuvvet sabit hızda ve düz bir çizgi üzerinde hareket ederler. Böylece, yörüngeleri hesaplamaktansa, simülasyon algoritmasının çarpışma zamanlarının hesaplanması daha uygundur. Hesaplama tamamen cebirseldir, çünkü çarpışmalar tamamen elastiktir: çarpışma esnasında küreyi parçalayabilecek ya da iç halini değiştirebilecek bir enerji akışı olmaz. Yani,

çarpışmalar ne lineer momentumun korunumunu ne de kinetik enerjinin korunumunu bozarlar ve bu iki ilke bize çarpışma zamanlarını hesaplamamıza imkan sağlar.

Sert küre simülasyonlarında çözülmesi gereken sadece cebirsel denklemlerdir, çünkü çarpışmalar arasında küreler, sabit hızda düz bir yörünge takip ederler. Hız zamanla değişmez ve süreklilik yoktur. Fakat yumuşak kürelerde, parçacıkların diğer parçacıklarla etkileşmesinden ötürü yörüngeler düzgündür ve de hızla sabit değildir. Bu yüzden, yumuşak küre simülasyonlarında diferansiyel denklemlerin çözümü için nümerik yöntemlere gereksinim duyulur. Başlangıç değeri problemlerinin klasik yöntemleri sonlu farklar yöntemleridir. Bu yöntemlerde dx ve dt gibi diferansiyellerin yerine Δx ve Δt gibi sonlu farklar kullanılır. Böylelikle sonlu bir aralık için hız sabit kabul edilebilir.

3.5.2.1 Bir Model Çalışması: Euler'in Metodu

En basit sonlu fark yöntemlerinden biri Euler'inkidir.

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \dot{u}(t).\Delta t \quad (3.88)$$

Bu formu ODHO'ya uygularsak, osilatörün pozisyonu x ve hızı v ;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x}(t).\Delta t \quad (3.89)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \dot{v}(t).\Delta t \quad (3.90)$$

olur. Bu durumda, Denklem (3.75)'e göre ODHO;

$$\dot{x}(t) = v(t) \quad (3.91)$$

$$\dot{v}(t) = \ddot{x}(t) = -\frac{\gamma}{m}.x(t) = -\omega^2.x(t) \quad (3.92)$$

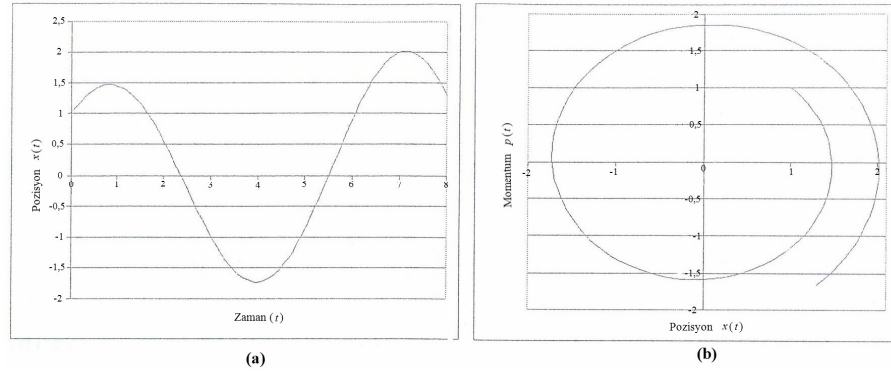
eşitliklerine sahiptir. Burada ω , salınım frekansıdır. Bu sebeple (3.89) ve (3.90) no'lu denklemlerdeki ifadeleri kullanarak, ODHO için Euler'in yöntemi şu hali alır;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t).\Delta t \quad (3.93)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) - \omega^2 x(t) \Delta t \quad (3.94)$$

Kütle m , yay sabiti γ ve başlangıç şartları $x(t_0)$ ve $v(t_0)$ 'ın belirli değerleri için (3.93) ve (3.94) no'lu denklemlerin iterasyonu $\{x(t), v(t)\}$ yörüngesi için bir yaklaşım verir.

$m = 1$, $\gamma = 1$, $x(0) = 1$, $v(0) = 1$ ve $\Delta t = 0,1$ (tüm veriler birimsizdir) değerleri için ODHO'yu $t = 8$ anına kadar denklem (3.93) ve (3.94) sonlu fark yöntemiyle çalıştırsak Şekil 3.43'deki gibi bir durum elde edilmiş olunur. Şekil 3.43'ten de görüldüğü üzere Euler yöntemiyle nümerik olarak hesaplanan faz uzayı yörüngesi ile analitik olarak hesaplanan faz uzayı yörüngesi arasında fark vardır. Euler yöntemiyle nümerik olarak hesaplanan faz uzayı yörüngesi belirli bir frekansta genişleyen spiral vermektedir. Basit anlamda bu durum, nümerik olarak hesaplanan yörüngelerin bir takım hatalar içerdiğini göstermektedir.



Şekil 3.43 ODHO için Euler yönteminin kullanılması. (a) Parçacığın zaman içerisindeki yer değişimi, (b) Faz uzayı yörüngesi [6]

3.5.2.2 Hatalar

Bir sonlu fark yönteminde, kesme hatası ve yuvarlama hatası olmak üzere iki tip hata bulunur. Kesme hatası, sonlu fark yönteminin gerçek diferansiyel denklemin nümerik çözümünden kaynaklanır. Bir sonlu fark yöntemi, Taylor serisiyle yazıldığı zaman, kesme hatası, seriden ihmal edilen sıfırdan farklı birimlerin büyüklüğüyle belirlenir. Hareket denklemi için Taylor serisi;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3 x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + \dots \quad (3.95)$$

halini alır. Denklem (3.110)'u bu seriyle karşılaştırdığımız zaman Euler yöntemindeki kesme hatası (KH);

$$KH = \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3 x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + \dots \quad (3.96)$$

olur. KH serinin derecesini belirler; KH $(\Delta t)^{n+1}$ derecedendir, böylelikle kullanılan seri n .'inci derecedendir. Bu durumda Euler serisi birinci derecedendir. Genelde $\Delta t < 1$ alınır. Bu durumda daha yüksek seviyede yöntemler belirli bir zaman dilimi için, daha düşük yuvarlama hatasına sahiptir. KH algoritmanın içinde resmen vardır, değeri yapılan hesaplamaların hassasiyetinden bağımsızdır.

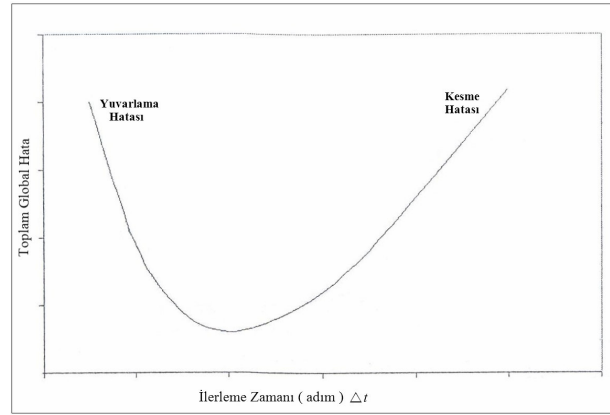
Bunun aksine yuvarlama hatası, sonlu fark algoritmasının uygulanmasından ortaya çıkan tüm hataları kapsar. Örneğin, kök alma, logaritmik üs alma gibi hesaplamada ortaya çıkan yaklaşım teknikleri yuvarlama hatasını ortaya çıkarır.

Kesme hatası ve yuvarlama hatası, sonlu fark algoritmasının kendi içlerinde lokal ve global hatalar olmak üzere ikiye ayrılır. Lokal hata, algoritmanın bir adımında (Δt) ortaya çıkarken, global hata tüm hesaplama sonunda lokal hatalar sonucu oluşan hataların sonucudur. Global hatalar, lokal hatalardan daha önemlidir. Şekil 3.44'de yuvarlama ve kesme hatalarının Δt değeriyle toplam global hataya etkisi görülebilir.

Global kesme hatası da, global yuvarlama hatası da Şekil 3.44'de görüldüğü gibi Δt ilerleme adımına bağlıdır. Fakat Δt 'nin global kesme hatası ve global yuvarlama hatası üzerine etkisi ters orantılıdır. Δt arttıkça global kesme hatası artarken, global yuvarlama hatası azalır. Ayrıca, global yuvarlama hatası hesaplama sayısına da bağlıdır. Hesaplama sayısını arttırmak daha fazla sayıda yuvarlama yapmak anlamına gelecektir, bu da global yuvarlama hatasını artırır. Bu durumda Δt 'yi azaltmak, Şekil 3.44'den de görüleceği üzere, daha hassas sonuçlar elde edilmesini sağlamaz. Genellikle de, toplam global hata'nın en küçük değerini veren çok küçük Δt değeri pek de kullanışlı değildir. Simülasyon için çok fazla hesaplama zamanı gerekecektir. Kullanışlı bir Δt değeri, deneme simülasyonları yapılarak, ampirik olarak elde edilir.

3.5.2.3 Algoritmik Kararlılık

Sonlu fark yöntemlerinin kullanımında görülen hataların büyüklüğünün yanı sıra, bu hataların sonlu fark yöntemi tarafından yapılması da dikkat edilecek bir husustur. Bu husus algoritmik kararlılığı ortaya koyar. Eğer bir algoritma hataları bir adımdan diğerine büyüterek iletiyorsa, bu algoritma kararsızdır ve kaçınılmaz olarak hesaplama bozulacaktır. Bunun aksine algoritma, hataları bir adımdan diğerine büyütmeden iletiyorsa, bu algoritma kararlıdır. Moleküler dinamik uygulamaları şartlara bağlı olarak kararlıdır; küçük Δt adımları için kararlıdır, fakat kritik bir değer sonra kararsızlaşır.



Şekil 3.44 Kesme ve yuvarlama hatalarının sonlu fark algoritmasına etkisi [6]

Algoritmik kararlılık, hem algoritmanın doğasına hem de çözülecek diferansiyel denkleme bağlıdır. Lineer adi diferansiyel denklemler için kararlılık analizi analitik olarak yapılabilir. Euler yöntemi, ODHO'ya uygulanırsa $x(t)$ ve $v(t)$ 'yi ODHO için gerçek çözüm olarak ele alındığında $x^*(t)$ ve $v^*(t)$ hem yuvarlama hem de kesme hatasını kapsayan hatalı çözümler ise;

$$e_x(t) = x^*(t) - x(t) \quad (3.97)$$

$$e_v(t) = v^*(t) - v(t) \quad (3.98)$$

e_x , pozisyon için toplam lokal hata ve e_v , hız için toplam lokal hata olur. Euler yönteminde hatalı değerleri kullandığımızda ODHO için,

$$e_x(t + \Delta t) = e_x(t) - e_v(t) \cdot \Delta t \quad (3.99)$$

$$e_v(t + \Delta t) = e_v(t) - \omega^2 e_x(t) \Delta t \quad (3.100)$$

olur. Bu iki denklem vektör formunda yazılabilir;

$$e(t + \Delta t) = A.e(t) \quad (3.101)$$

Burada $e = (e_x, e_v)^T$ hataların kolon vektörü ve A 'da kararlılık matrisidir.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \Delta t \\ -\omega^2 \Delta t & 1 \end{bmatrix} \quad (3.102)$$

Şimdi, eğer A birim vektörün dışında ($\lambda > 1$) gibi bir özdeğere sahipse, A hataları büyütmemektedir ve algoritma kararsızdır. Özdeğer,

$$|A - \lambda I| = 0 \quad (3.103)$$

karakteristik denklemini sağlar. Burada I birim matristir. Denklem (3.103)'deki A için denklem;

$$(1 - \lambda)^2 + \omega^2 (\Delta t)^2 = 0 \quad (3.104)$$

çözümü ise $\lambda = 1 \pm \Delta t \sqrt{-\omega^2}$ olur. Bu yüzden herhangi bir zaman basamağı için, $|\lambda| > 1$ olur ve Euler yöntemi ODHO'ya uygulandığında kararsızdır. Dikkat edilmelidir ki, algoritma kararlılığı, hesaplamaları başlatan $x(0)$ ve $v(0)$ başlangıç değerlerinden bağımsızdır.

Kararlı çözümlerin hassas çözümler olmak zorunluluğu olmadığını ayırt etmek önemlidir. ODHO için modifiye edilmiş Euler yönteminde ortaya çıkan faz uzayı yörüngelerinde tüm Δt , kararlılık limitinin ($\Delta t = 2$) altındadır. Fakat Δt küçüldükçe yörünge gerçek çözüme yaklaşmakta, yani hassaslaşmaktadır.

3.5.2.4 Moleküler Dinamik İçin Algoritmalar

Moleküler dinamik için kullanılan sonlu fark yöntemlerinin temeli Taylor serilerine dayanır. Yüksek dereceli Runge-Kutta yöntemi ve Gear'ın Kestirimci-Düzeltilici tekniğinin yanı sıra, uygulamalarda çoklukla Verlet algoritması kullanılmaktadır.

(a) Verlet Algoritması:

Moleküler dinamik algoritmalarının en basiti olan Verlet algoritması, ilk olarak Verlet tarafından 1967 yılında kullanılmış bir üçüncü derece Strömer algoritmasıdır ve simülatörler arasında Verlet algoritması olarak adlandırılmıştır. Algoritma iki Taylor serisinin birleşimi şeklindedir. Birinci seri t anından Δt sonraki pozisyonu için;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3 x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.105)$$

İkinci seri t anından Δt önceki pozisyonu için;

$$x(t - \Delta t) = x(t) - \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3 x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.106)$$

şeklinde yazılabilir. Bu iki açılımı tek bir denklemde toplarsak;

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.107)$$

halini alır. Algoritmada $O(\Delta t^4)$ kesme hatasıdır, böylelikle algoritma üçüncü derecedendir, fakat algoritmada hiç üçüncü derece türev yoktur. Hiç hız fonksiyonu içermemektedir; ivmeler ise atomlar arası kuvvetlerden ve Newton'un ikinci yasasından elde edilmektedir. Hızları hesaplayabilmek için uygulamacılar bazı formüller geliştirmişlerdir. Bunlara örnek olarak yarım adımdaki hızların bulunabildiği;

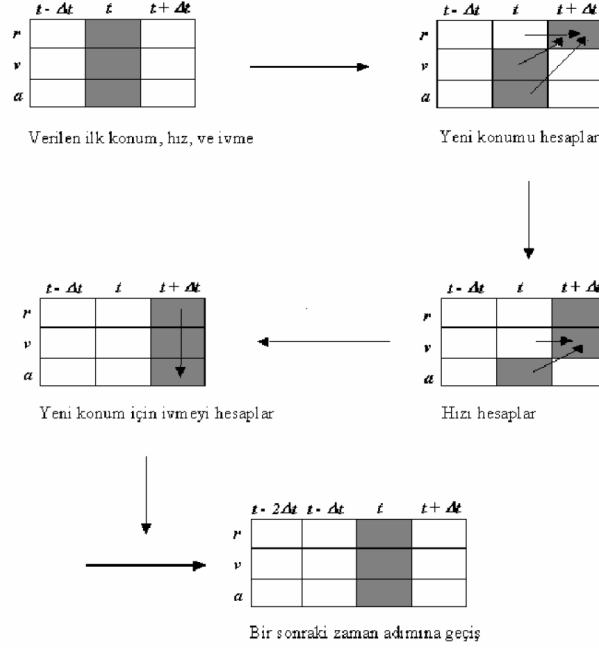
$$v\left(t + \frac{1}{2} \Delta t\right) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (3.108)$$

formülü ile Verlet'in kendisinin kullandığı birinci derece bir yaklaşım veren;

$$v(t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(-\Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.109)$$

formülüdür.

Verlet algoritması basitlik ve görece büyük zaman adımları için iyi kararlılık sağlar. Orijinal formunda moleküler hızlar, pozisyonlardan daha düşük bir öneme sahiptir, ki bu bakış açısı faz uzayı yörüngesinin hem hızlara hem de pozisyonlara eşit olarak bağımlı olmasıyla çelişmektedir. Bu sebeple güncel formülasyonlarıyla bu yöntem bu asimetrik bakış açısından arındırılmıştır.



Şekil 3.45 Hız Verlet algoritmasının şematik gösterimi [56]

(b) Genel Öngörücü-Düzeltilici Algoritmalar:

Öngörücü-düzeltilici yöntemler (PEC) üç basamaktan oluşur: öngörme, hesaplama ve düzeltme. Basamaklar $x(t)$ pozisyonları ve $v(t)$ hızları kullanılarak şu şekilde uygulanırlar;

1. Bir sonraki adımın sonunda $x(t + \Delta t)$ ve $v(t + \Delta t)$ pozisyon ve hız değerlerini öngörme
2. Öngörülen pozisyonlarla $t + \Delta t$ anındaki kuvvetleri hesaplama
3. Öngörülmiş ve eski hız ve pozisyon değerlerinin bileşimlerini kullanarak öngörülerini düzeltme

Basit bir örnek olarak, Euler'in yönteminin ODHO'ya uygulanmış kestirimci-düzeltilici temelli çözümü verilebilir. Euler'in yöntemi ile (3.93) ve (3.94) no'lu denklemler kullanılarak $x(t + \Delta t)$ ve $v(t + \Delta t)$ **öngörme**;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t) \cdot \Delta t$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) - \omega^2 x(t) \cdot \Delta t$$

$t + \Delta t$ 'deki deęerleri *hesaplama*;

$$\frac{f(t + \Delta t)}{m} = \frac{dv}{dt} = -\omega^2 x(t + \Delta t) \quad (3.110)$$

Öngörülerini *düzeltilme*; burada Euler yönteminin aynı formu kullanılır, fakat eğimler basamağın başında deęil, sonunda hesaplanır.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t + \Delta t) \Delta t \quad (3.111)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) - \omega^2 x(t + \Delta t) \Delta t \quad (3.112)$$

Bu yöntem için algoritmik kararlılık incelenirse Δt ve ω 'nın belirli halleri için $|\lambda| < 1$ olduęu görülebilir.

Öngörücü-düzeltilici yöntemler hem öngörme hem de düzeltilme basamaklarının sağladıęı seçenekler sayesinde çok büyük esneklik sağlarlar. Bu basamaklar, tek bir basamak olabileceęi gibi ki, bu durumda kendi kendilerini başlatırlar, çoklu basamaklardan da oluşabilirler ki, bu durumda hesaplamaya başlanması için özel bir işlem yapılmalıdır. Öngörücü ve düzeltilici basamakların mantıklı kombinasyonlarıyla çok iyi kararlılık elde edilmesi mümkündür, çünkü düzeltilici basamak, öngörücü basamakta ortaya çıkabilecek kararsızlıkları azaltıcı bir geri besleme mekanizması görevini görür.

Verilen herhangi bir öngörücü-düzeltilici algoritma, hesaplama ve düzeltilme basamaklarının tekrar ettirilmesiyle daha karmaşık ve daha yüksek dereceli hale getirilebilir. P ; öngörüm, E ; hesaplama, C 'de düzeltilme olarak tanımlanırsa, yukarıda anlatılan bu prosedür PEC olarak gösterilebilir. Eęer düzeltilmiş pozisyonlar ve hızlar ikinci bir öngörüm olarak kullanılırsa, bu durumda algoritma, $PEC(EC) = P(EC)^2$ halini alır. Açıkça E ve C basamakları istenildięi kadar kullanılabilir, $P(EC)^n$. Bu teknik moleküler dinamikte çok az kullanılır, çünkü E adımı

kuvvet hesaplamaları gerektirdiğinden, $P(EC)^n$ simülasyonu PEC simülasyonundan yaklaşık n kadar daha yavaş çalışacaktır.

(c) Gear PEC Algoritması:

Öngörücü-düzeltilici algoritmalar moleküler dinamikte ilk defa Rahman tarafından kullanılmışlardır. Fakat moleküler dinamikte yaygın olarak kullanılan algoritmalar Gear tarafından tasarlanmıştır. Gear'ın önerdiği öngörücü-düzeltilici algoritma şu şekildedir;

Öngörme: pozisyonlara ve t zamanına göre türevlerine bağlı beşinci dereceden Taylor serileri kullanılarak $t + \Delta t$ anındaki r_i moleküler pozisyonlarını öngörme. Böylece, her bir basamakta \dot{r}_i , \ddot{r}_i , $r_i^{(iii)}$, $r_i^{(iv)}$, $r_i^{(v)}$ türevleri gerekecektir, bunlar da t anındaki Taylor açılımı yardımıyla $t + \Delta t$ anında öngörülür:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + r_i^{(i)}(t)(\Delta t) + r_i^{(ii)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(iii)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^4}{4!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^5}{5!} \quad (3.113)$$

$$r_i^{(i)}(t + \Delta t) = r_i^{(i)}(t) + r_i^{(ii)}(t)(\Delta t) + r_i^{(iii)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^4}{4!} \quad (3.114)$$

$$r_i^{(ii)}(t + \Delta t) = r_i^{(ii)}(t) + r_i^{(iii)}(t)(\Delta t) + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} \quad (3.115)$$

$$r_i^{(iii)}(t + \Delta t) = r_i^{(iii)}(t) + r_i^{(iv)}(t)(\Delta t) + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} \quad (3.116)$$

$$r_i^{(iv)}(t + \Delta t) = r_i^{(iv)}(t) + r_i^{(v)}(t)(\Delta t) \quad (3.117)$$

$$r_i^{(v)}(t + \Delta t) = r_i^{(v)}(t) \quad (3.118)$$

Hesaplama: öngörölmüş pozisyonları kullanarak $t + \Delta t$ anında her bir atom üzerine etkileyen atomlar arası kuvvet F_i 'yi hesaplama. i ve j atomları arasında etkileyen $u(r_{ij})$ sürekli potansiyel enerji fonksiyonu için, her bir atoma etkileyen kuvvet;

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \hat{r}_{ij} \quad (3.119)$$

burada, \hat{r}_{ij} , r_{ij} yönündeki birim vektördür. Kuvvetlerin hesaplanması zaman alıcı bir işlemdir. Çünkü denklem (3.119) sistem içindeki her i molekülü için kullanılmalıdır. Yine de, zaman kazanmak için bazı yollar mevcuttur. Bunlardan biri olan Newton'un üçüncü yasası;

$$F_i(r_{ij}) = -F_j(r_{ij}) \quad (3.120)$$

kullanılırsa, hesaplama zamanı yarı yarıya azalacaktır.

Düzeltilme: öngörülen ivme ve hesaplanan kuvvet F_i arasındaki fark, $\Delta \ddot{r}_i$ kullanarak öngörülen pozisyonları ve türevlerini düzeltme. Denklem (3.119)'da elde edilen $t + \Delta t$ anındaki kuvvetler ile Newton'un ikinci yasası ile $\ddot{r}_i(t + \Delta t)$ ivmeleri belirlenebilir. Böylece, öngörülen ivmelerle hesaplanan ivmeler arasındaki fark bulunabilir;

$$\Delta \ddot{r}_i = \left[\ddot{r}_i(t + \Delta t) - \ddot{r}_i^P(t + \Delta t) \right] \quad (3.121)$$

Gear'ın önerdiği algoritmada ikinci derece diferansiyel denklemler için, bu fark tüm öngörölmüş pozisyonları ve türevlerini bulmak için kullanılabilir. Böylece;

$$r_i = r_i^P + \alpha_0 \cdot \Delta R_2 \quad (3.122)$$

$$r_i^{(i)} \cdot \Delta t = r_i^{(i)P} \cdot \Delta t + \alpha_1 \cdot \Delta R_2 \quad (3.123)$$

$$\frac{r_i^{(ii)} \cdot \Delta t}{2!} = \frac{r_i^{(ii)P} \cdot (\Delta t)^2}{2!} + \alpha_2 \cdot \Delta R_2 \quad (3.124)$$

$$\frac{r_i^{(iii)} \cdot \Delta t}{3!} = \frac{r_i^{(iii)P} \cdot (\Delta t)^3}{3!} + \alpha_3 \cdot \Delta R_2 \quad (3.125)$$

$$\frac{r_i^{(iv)} \cdot \Delta t}{4!} = \frac{r_i^{(iv)P} \cdot (\Delta t)^4}{4!} + \alpha_4 \cdot \Delta R_2 \quad (3.126)$$

$$\frac{r_i^{(v)} \cdot \Delta t}{5!} = \frac{r_i^{(v)P} \cdot (\Delta t)^5}{5!} + \alpha_5 \cdot \Delta R_2 \quad (3.127)$$

burada,

$$\Delta R_2 = \frac{\Delta r_i^{(ii)} (\Delta t)^2}{2!} \quad (3.128)$$

α_i parametreleri, algoritmanın nümerik kararlılığını sağlar. α_i , çözülen diferansiyel denklemlerin derecesine ve öngörülen Taylor serisinin derecesine bağlıdır. Gear, bunların değerlerini lineer diferansiyel denklemlere uygulayarak ve kararlılık matrislerini inceleyerek belirlemiştir.

3.5.2.5 Enerji Korunumu

Moleküler dinamik algoritmaları genellikle enerjinin korunumunu sağlama becerilerine göre değerlendirilirler. Yapılan incelemelerde, görülmektedir ki, büyük zaman adımlarında Verlet ve Gear algoritmaları aynı enerji korunumu derecesine sahiptirler; yine de, Verlet algoritması için kararlılık limiti, Gear algoritmasının kararlılık limitinden daha büyük nt 'de ortaya çıkar. $\Delta t < 0,01$ zaman basamakları için, Gear algoritması daha iyi enerji korunumu sağlar. Yani, Gear algoritması Verlet algoritmasından toplam enerji hesaplamasında bir derece daha yüksektir.

3.5.2.6 Hesaplanan Yörüngelerin Güvenilirliği

Yapılan denemelerde, görülmektedir ki, her iki algoritma da teorik değerlerden %1 kadar bir sapma göstermekte, belirsizlik seviyeleri de %1'i aşmamaktadır. Gerek kesme hataları, gerekse de yuvarlama hataları sebebiyle ortaya çıkan global hatalar her iki algoritmada birbirine çok yakın çıkmaktadır.

Kısa süreler için, hesaplanan yörüngeler doğru çıkmaktadır, doğruluğun derecesi, algoritmanın lokal kesme hatasına bağlıdır. Fakat uzun süreler için, hesaplanan yörüngeler üzerindeki noktalar arasındaki dinamik bağlantı, biriken yuvarlama hataları sebebiyle bozulur. Yine de, bu bozulma, tolerans sınırları içindedir.

3.5.3 Atomlararası Potansiyel Modelleri

Maddede yapının düzenini ve katılığını ya da akışkanlığını belirleyen temel unsur atomlararası kuvvetler sebebiyle oluşan potansiyellerdir. Atomlararası potansiyellerin etkisiyle oluşan bağlanmaları değişik sınıflara ayırabiliriz: van der Waals bağları, kovalent bağlar, iyonik bağlar ve metalik bağlar.

Van der Waals bağlanmalarının en basit türü asal gazlarda görülür. Yalıtılmış asal gaz atomlarının küresel simetrik olan dolu-kabuk elektron şekillenmeleri çok kararlı olup, malzemeyi oluşturmak için atomlar bir araya geldikleri zaman, çok az etkilenirler. İki asal gaz atomunun etkileşme enerjisi, sadece aralarındaki mesafeye bağlıdır ve Şekil 3.46'daki potansiyel eğrisi ile temsil edilir. Atomlararasıdaki kuvvet bu eğrinin eğiminin negatif işaretlisidir.

Asal gazlardaki duruma benzer bir durum sodyum klorür gibi iyonik katılarda ortaya çıkar. Örnek olarak, Na atomundan Cl atomuna bir elektronun geçişi, sırasıyla neon ve argon asal gazlarının kararlı elektronik şekillenimlerine sahip olan Na^+ ve Cl^- iyonlarını meydana getirir. Atomlararası mesafeler büyük olduğunda, iyonlararası potansiyeller etkin bir şekilde uzun mesafe elektrostatik etkileşmesiyle belirlenir. Atomlararasıdaki mesafe az olduğunda, asal gazlarda olduğu gibi, potansiyeldeki etkin terim elektron kabuklarının çakışmasına eşlik eden itici etkileşmedir.

Elmas, silisyum ve germanyum gibi kovalent bağlı kristallerde, bağlanma enerjisi atomlar arasında değerlik elektronlarının paylaşılmasıyla ilgilidir. Malzemeyi oluşturmak için atomların bir araya yaklaşması, değerlik elektronlarının durumlarını büyük ölçüde değişikliği uğratar ve enerji, bir atomun birden fazla oluşturduğu yerde, bu bağların bağlı yönlenmesine kuvvetli bir şekilde bağlıdır. Böylece kovalent bağların yönlendirilmiş oldukları söylenir. Kovalent bağların yönlendirilmiş doğası, kovalent olarak bağlı katının enerjisinin yalıtılmış atom çiftleri için göz önüne alınan atomlararası potansiyelin basit bir toplamı olarak yazılamayacağı anlamına gelmektedir.

Metal atomları, üç boyutlu ve kovalent olarak bir yapı meydana getirmek için gerekli olan dört tane değerlik elektronundan daha azına sahiptirler. Metalik bağlanmaya bakışın bir yolu, bazı bağların eksik olduğu bir kovalent bağlanma olarak dikkate alınmasıdır. Metalik bir yapı, büyük

ölçüde pozitif iyonların kendi başlarına paketlenmesiyle belirlenir. Elektronlardan oluşan akışkan sadece negatif yüklü olan bir yapıştırıcıdır.

Van der Waals bağlanmaları ve yakın mesafe iyonik bağlanmalar için iki cisim potansiyelleri, kovalent bağlanmalar için Tersoff potansiyelleri ve metalik bağlanmaları için ise gömülü atom yöntemleri moleküler dinamik modellemelerinde yaygın olarak kullanılmaktadır.

Bir simülasyonu uygulayabilmek için atomlararası potansiyeller $U(r^N)$ için fonksiyonel bir form seçilmesi gerekir. Genellikle potansiyel çift etkileşimi olarak alınır, yani N adet atom arasındaki etkileşim enerjisi izole iki-cisim etkileşimlerinin toplamı şeklindedir. Küreler için çift etkileşimi formu;

$$U(r^N) = \sum_{i < j} \sum u(r_{ij}) \quad (3.129)$$

r^N ; küresel pozisyon vektörleridir. $r^N = \{r_1, r_2, \dots, r_N\}$, u ; iki-cisim potansiyeli ve r_{ij} 'de i ve j atomları arasındaki skaler mesafedir.

3.5.3.1 İki-cisim Potansiyelleri

1924 yılında Lennard-Jones iki-cisim potansiyelleri için kullanışlı bir model ortaya koymuştur;

$$u(r) = k\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right] \quad (3.130)$$

burada,

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (3.131)$$

Lennard-Jones potansiyeli kısa mesafede itme kuvvetini, uzun mesafede çekme yayılımını sağlar. Kısa mesafeli itme kuvvetleri, malzemenin kendi içine çökmesini engellerken, uzun mesafeli çekmeler, kap içinde olmaması durumunda, malzemenin dağılmasını engeller. Bu kuvvetler ($n > m$ olmak üzere) n ve m büyüklüklerine bağlıdır. Genellikle $m = 6$ ve $n = 2m$ alınır ki bu durum belli bir mantık çerçevesinde son derece uygundur. Bu durumda Lennard-Jones;

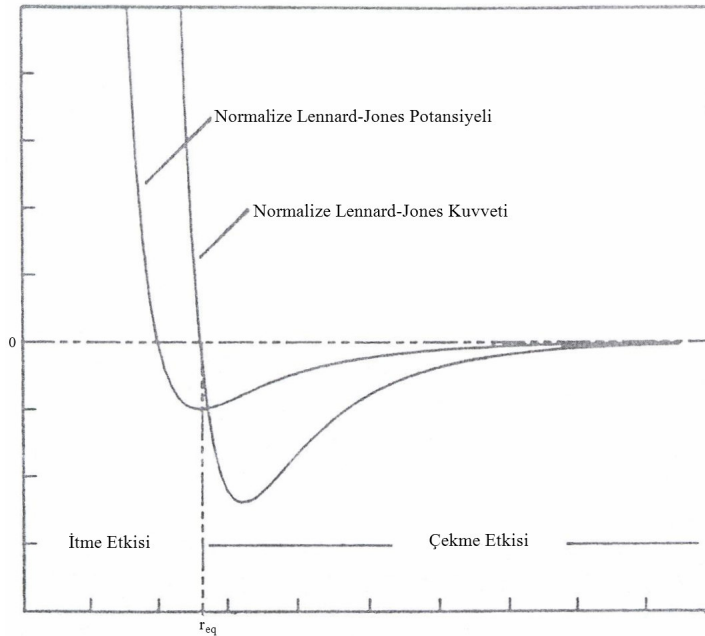
$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.132)$$

Denklemin (3.132)'de geriye kalan parametreler, σ ; $u(r)$ 'de denge konumu ve ε ; $u(r)$ 'nin minimumdaki enerjidir. Şekil 3.46'da argon atomu için Lennard-Jones grafiği görülebilir. Atomlararası kuvvetlerin korunması gerektiğinden, potansiyele sebebiyet veren kuvvet;

$$F(r) = -\frac{du(r)}{dr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (3.133)$$

Görülebileceği üzere, itme kuvvetleri pozitifken, çekme kuvvetleri negatiftir.

Lennard-Jones potansiyellerinin dışında, iki-cisim potansiyellerini nümerik olarak hesaplamak için Morse potansiyelleri, ayrıca kimyasal olarak inaktif atomların iki-cisim potansiyellerini hesaplamak için Born-Mayer potansiyelleri, germanyum ya da silisyum gibi kovalent bağların modellenmesinde de Tersoff potansiyelleri yaygın olarak kullanılmaktadır.



Şekil 3.46 Normalize Lennard-Jones potansiyeli ve kuvvetinin uzaklığa göre değişimi [6]

3.5.3.2 Gömülü Atomlar Modelleri (GAM)

İki-cisim potansiyelleri metalleri tam olarak açıklayamaz. Metal malzemelerin moleküler modellerini yapmak üzere kullanılan GAM, ilk olarak Daw ve Baskes tarafından metalik sistemlerdeki yüzeyler, alaşımlar, impürüteler ve kırılmalar konularının incelenmesi için kullanılmışlardır. Bu model, her atomu, tüm atomları içeren konak kafes içerisinde gömülü olarak varsayar. Bir impürütenin bu gömülme enerjisi, konağın impürite eklenmeden önceki elektron yoğunluğu ile belirlenir.

GAM'nin başlangıç noktası, bir metal içindeki elektron yoğunluğunun bağımsız elektronlardan kaynaklanan etkilerin atomların pozisyonları ile yaklaşık olarak elde edilmesine dayanır. Her atomun çevresindeki elektron yoğunluğu, atomu ve çevresindeki atomların elektron yoğunluklarının toplamıdır. Elektron yoğunluğunun bu etkisi, pozisyonun yavaşça değişen bir fonksiyondur. Arka alan elektron yoğunluğunu sabit tutarak bir sadeleştirme yapılırsa, atomun enerjisi, atomun elektron yoğunluğu ile sabit arka alan yoğunluğuyla birleşen enerjidir. Bu, gömülme enerjisini arka alan elektron yoğunluğu ve atomun cinsinin fonksiyonu olarak ifade eder.

Toplam enerji;

$$E_{top} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(>i)} \Phi_{ij}(R_{ij}) \quad (3.134)$$

olarak verilir. Burada ilk terim N -cisim ve ikinci terim iki-cisim etkilerine bağlıdır. F_i ; gömülme enerjisi, $\rho_{h,i}$; r_i pozisyonundaki ama i atomu olmadan konağın yoğunluğu, Φ_{ij} iki-cisim potansiyeli ve r_{ij} ise i ve j atomları arasındaki mesafedir. $\rho_{h,i}$ konak yoğunluğu bileşenlerinin ρ^a atomik yoğunluklarının toplamıdır;

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^a(R_{ij}) \quad (3.135)$$

F_i ve Φ_{ij} fonksiyonları, kafes sabiti, elastik sabit ve boşluk oluşumu enerjisi gibi deneysel olarak elde edilebilen nicelikler kullanılarak elde edilebilir. GAM, uygulanan modele göre çeşitli

değişikliklerle en doğru sonucu veren modeller elde edilebilmektedir. Bu modellemelere Belak v.d yaptığı ve denge dışı durumların incelendiği GAM modeli, Finnis-Sinclair potansiyelleri ve Sutton-Chen potansiyelleri örnek verilebilir.

3.5.4 Moleküler Dinamik Adımları

Seçilen potansiyel modeli için, simülasyon faz uzayı yörüngesinin bir kısmını oluşturur ve yörünge oluşturma başlangıç, dengeleme ve üretim olmak üzere üç sürece ayrılır.

3.5.4.1 Başlangıç Süreci

Başlangıç süreci, kendi arasında ön koşulların belirlenmesi ve atomların belirlenmesi olarak ikiye ayrılır. Ön koşullar, kullanılacak birim sistemleri, sonlu fark yöntemi ve işlem sırasında sabit kalacak parametrelerin değerlerinin belirlenmesidir. Atomların belirlenmesi ise başlangıç pozisyonlarının, hızlarının ve daha yüksek dereceden pozisyon türevlerinin belirlenmesidir.

(a) Önkoşullar:

Birim Sistemi: Simülasyon programları öyle yazılır ki nicelikler birimsiz olur. Uzunluk ve enerji birimleri olarak, sırasıyla σ ve ε , kütle birimi olarak da bir atomunun m alınır.

Birimsiz (ya da indirgenmiş) nicelik formları, bir yıldız sembolü ile belirlenir. Örnek olarak Lennard-Jones potansiyeli için şu form yazılabilir;

$$u^*(r^*) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r^*} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r^*} \right)^{12} \right] \quad (3.136)$$

burada $u^* = u/\varepsilon$ ve $r^* = r/\sigma$ olur. Diğer türetilmiş niceliklerin indirgenmiş formları Tablo 3.6'da verilmiştir.

Durum Şartları: İzole bir sistemde yapılan dengedeki moleküler dinamik modellemeleri için, bağımsız termodinamik özellikler atom sayısı N , sistem hacmi V ve toplam enerji E_T 'dir. Daha sonra, tek fazlı bir sistem için, atom sayısı yoğunluğu $\rho^* = N \cdot \sigma^3 / V$ ve atom başına enerji $E^* = E/N \cdot \varepsilon$ değerlerini belirlemek termodinamik durumu verir.

Tablo 3.6 Moleküler dinamik simülasyonlarında kullanılan birim sistemi [6]

Temel Nicelikler	
Kütle	$m = \text{atomun kütlesi}$
Uzunluk	σ
Enerji	ϵ
Zaman	$\sigma \sqrt{m/\epsilon}$
Türetilmiş Değerler	
Adyabatik Sıkıştırılabilirlik	$\kappa_s^* = \kappa_s \cdot \epsilon / \sigma^3$
Kurulumsal İç Enerji	$U_c^* = U_c / N \cdot \epsilon$
Yoğunluk	$\rho^* = N \cdot \sigma^3 / V$
Kuvvet	$F^* = F \cdot \epsilon / \sigma$
Isı Kapasitesi	$C_v^* = C_v / N \cdot k_B$
Radyal Konum	$r^* = r / \sigma$
Basınç	$P^* = P \cdot \sigma^3 / \epsilon$
Sıcaklık	$T^* = k_B \cdot T / \epsilon$
Isıl Basınç Katsayısı	$\gamma_v^* = \gamma_v \cdot \sigma^3 / \epsilon$
Toplam Enerji	$E^* = E / N \cdot \epsilon$
Hız	$v^* = v \sqrt{m/\epsilon}$

E^* için bir değer belirlemek, atomik hızların ölçeklendirilmesiyle mümkün olabilir. D ve A alt indislerini “istenen” ve “gerçekleşen” değerler için kullanırsak;

$$E_A^* = E_{kA}^* + U^* \quad (3.137)$$

ve

$$E_{kD}^* = E_D^* - U^* \quad (3.138)$$

Daha sonra hız vektörünün her bir komponentini aşağıdakilere göre ölçeklendirirsek;

$$v_{ix}^{yeni} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{E_{kD}^*}{E_{kA}^*}} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{E_D^* - U^*}{E_A^* - U^*}} \quad (3.139)$$

aynı ölçeklendirme y – ve z – komponentlerine de uygulanabilir.

$$E^* = \frac{1}{2N} \sum_i v_i^* \cdot v_i^* + U^*(r^N) \quad (3.140)$$

içine bu yeni hızları katarsak, set noktası enerjisi E_D^* elde edilir. Genellikle, yoğunluk ve enerji (ρ^* , E^*) yerine, termodinamik denge, yoğunluk ve sıcaklık (ρ^* , T^*) kullanılarak kurulur. Bu, başlangıçta verilen hızları istenen toplam enerjiden ziyade istenen kinetik enerjiyi verecek şekilde ölçeklendirilerek gerçekleştirilir.

$$T^* = \frac{1}{3N} \left\langle \sum_i v_i^* \cdot v_i^* \right\rangle \quad (3.141)$$

Bu yüzden, Denklem (3.139)'u ölçeklendirmekten ziyade başlangıç hızları $v_i(0)$ 'ı ölçeklendiririz, böylelikle başlangıçta istenen sıcaklık T_D^* elde edilir,

$$v_{ix}^{yeni} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{T_D^*}{T_A^*}} \quad (3.142)$$

Burada T_A^* , denklem (3.141)'de başlangıçta verilen hızları kullanarak hesaplanan gerçekleşen sıcaklıktır. $v_i^*(0)$ hızının y – ve z – komponentlerine de benzer prosedür uygulanabilir.

Kinetik enerjinin harekete bağlı olması sebebiyle, (3.142)'deki ölçeklendirme ile set noktası sıcaklığı elde etmek, (3.139)'daki ölçeklendirme ile set noktası enerjisi elde etmekten daha az etkindir. Modellemenin ilk süreci boyunca, sistem başlangıç durumundan dengeye geldikçe, enerji kinetik ve potansiyel modları arasında değiş tokuş edilecektir; sonuç olarak, sıcaklık set noktasından değişecektir. Bunu önlemek için (3.139), tüm dengeleme süreci boyunca devam ettirilir. Birkaç yüz zaman adımı sonra, durum şartları istenilenlere yakın olacaktır.

Sınır Koşulları, Algoritma ve Zaman Adımı: Sıvılar için, istenmeyen yüzey etkileri PBC kullanılarak engellenebilir. PBC uygulanması için, atomları içinde bulunduran hacmin uzayı dolduruyor olması gerekir Üç boyutta uzayı dolduran en basit şekil küptür: küp PBC transformasyonları için en basit çözümdür. Bu sebeple çoğunluk yığın simülasyonu kübik kaplarda L^* uzunluğunda kenar boyuna sahip küplerle yapılır,

$$L^* = \frac{L}{\sigma} = \left(\frac{N}{\rho^*} \right)^{1/3} \quad (3.143)$$

Potansiyel modeliyle birlikte, durum şartları ve kabın geometrisi belirlendikten sonra, hareket denklemlerini çözecek bir algoritma gereklidir. Bu Verlet, Gear ya da bir başka yöntem ile yapılabilir. Algoritma belirlendikten sonra zaman adımı (Δt) belirlenmelidir. Δt 'nin optimum büyüklüğü belirlenmelidir. Δt , mümkün olan en fazla faz uzayını örnekleyebilecek kadar büyük, moleküler çarpışmalar arasındaki ortalama zamanı sağlayacak kadar küçük olmalıdır, aksi takdirde algoritma kararsız olacaktır.

(b) Atomlar İçin Başlangıç Koşulları:

Sonlu fark algoritmasına başlamak için, atom pozisyonları r_i ve zaman türevleri, $t=0$ anında belirlenmelidir. r_i pozisyonları uzay-kafes ile hesaplanır ve başlangıç pozisyonları $r_i(0)$ kafes yapılarına göre belirlenir ya da bir önceki simülasyondan alınır. Bunlar rasgele belirlenmemelidirler, çünkü rasgele atamalar, komşu atomların yapay büyüklükte üst üste binmesine sebep olur; bu da sonlu fark algoritmasında nümerik hatalara sebep olacak itme kuvvetleri yaratır.

Başlangıç hızları $v_i(0)$ rasgele belirlenebilir ya da bir önceki simülasyondan alınabilir. Rasgele belirlenen hızlar için, ξ_x, ξ_y, ξ_z $[-1,+1]$ aralığında düzgün dağılmış üç rasgele sayı ise; $v_i(0)$ için kartezyen komponentler şöyle verilir;

$$v_{ix}^*(0) = \frac{\xi_x}{\xi}; v_{iy}^*(0) = \frac{\xi_y}{\xi}; v_{iz}^* = \frac{\xi_z}{\xi} \quad (3.144)$$

burada $\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}$ olur. Bu başlangıç hızları set noktası toplam enerjisini sağlayacak şekilde denklem (3.139)'dan ya da set noktası sıcaklığını sağlayacak şekilde denklem (3.142)'den elde edilebilir.

Sisteme dışarıdan bir kuvvet etki etmemesi durumunda, toplam lineer momentum korunmalıdır. Bundan başka, malzeme statiktir, bu sebeple ölçülmüş başlangıç hızları lineer momentum sıfır olacak şekilde ayarlanmalıdır.

Başlangıç ivmeleri $a_i(0)$, $r_i(0)$ 'dan her atom üzerine düşen kuvvetler hesaplanarak bulunur. Böylelikle, $r_i(0)$, $v_i(0)$ ve $a_i(0)$ için değerler elde edilmiş olur [6].

3.5.4.2 Dengeleme Süreci

Başlangıç şartlarının tamamlanmasıyla, işleme başlanabilir. Birkaç yüz adımdan sonra sistem keyfi atanmış koşullarından dengeye erişecektir, bu rahatlama sürecine “dengeleme” adı verilir. Dengeleme süreci en az üç, muhtemelen dört farklı işlemi içerir. Birincisi faz uzayı izinin belirlenmesi için sonlu fark algoritmasının kullanılmasıdır. İkincisi istenen özellikler için izlerin izlenmesidir. Üçüncü işlem ise opsiyoneldir, dengeleme esnasında sistem sıcaklığını istenen değere yakın tutmak için atomik hızları ölçeklendirmeye devam edilebilir. Dördüncü ve son işlem, özellik toplayıcılar sıfırlanınca dengeleyicinin sonunda yapılır, böylelikle özellikler işlemin sadece dengeleme sürecinde hesaplanırlar. Dengelemenin süresi değişir ve başlangıç koşullarının denge durumuna ne kadar uzak olduğuna bağlıdır. Dengelemenin amacı, denge özelliklerinin simülasyonun başlangıç şartlarından etkilenmesini önlemektir.

(a) Dengeye Yaklaşma:

Dengeleme sırasında, birçok özelliğin ortalama değerleri kararlı değildir; daha ziyade, ortalamalar denge değerlerine doğru ilerlerler. Yine de, sistemin izole olması durumunda, toplam enerji sistem dengede olması bile her zaman adımında aynı değere sahip olmalıdır. Toplam enerjinin korunumu birçok küçük hataya hassastır; bu yüzden hız ölçeklendirmesi yapmadan dengeleme sırasında, enerji korunumu önemli bir etkendir ve programdaki hataların direkt göstergesidir.

Dengenin gelişimi, hem konfigürasyon uzayını hem de momentum uzayını içerir, bu sebeple her ikisini de izlememizi sağlayacak niceliklere ihtiyaç vardır. Pozisyonel düzen parametresi, λ , kafesin bozunumunu izlemek ve anlık (kinetik) Boltzmann H-fonksiyonunu, atomik hızların denge dağılımının gelişimini izlemek için kullanılır. Burada,

$$\lambda = \frac{1}{3}[\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z] \quad (3.145)$$

burada,

$$\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_i^N \cos\left(\frac{4\pi \cdot x_i}{a}\right) \quad (3.146)$$

a , kafesin birim hücrenin kenar uzunluğudur. Başlangıçta, tüm atomlar kafes yapısına uyduklarında, $\lambda = 1$ olur, çünkü pozisyonel komponentler x_i , y_i ve z_i $a/2$ 'nin tamsayı katlarıdır. Kafes tamamen çözüldüğü zaman, λ sıfır değeri etrafında dalgalanacaktır, çünkü atomlar orijinal kafes konumu etrafında rasgele dağılırlar; dalgalanmalar \sqrt{N}/N büyüklüğü civarındadır. Böylece, kafes çözüldükçe, λ teklikten sıfıra doğru kayar. λ 'nın sıfıra yaklaşması için gerekli zaman paketleme kesrine ve başlangıç hızlarına bağlıdır.

Yine H-fonksiyonunun bir komponenti için;

$$H_x = \sum_{\Delta v_x} f(v_x) \ln f(v_x) \Delta v_x \quad (3.147)$$

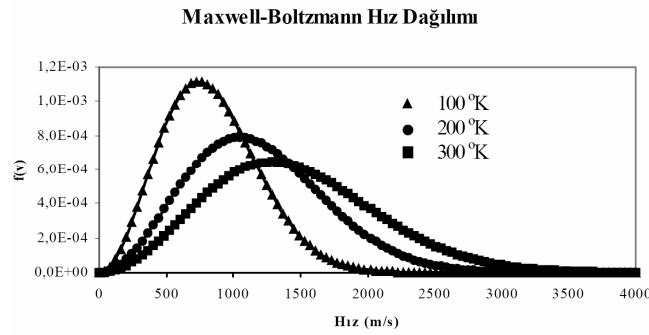
Burada $f(v_x)$ atomik hızların x-komponentinin dağılımıdır.

$$f(v_x) \Delta v_x = \frac{1}{N} \sum_i^N \delta(v_x - v_{xi}) \Delta v_x \quad (3.148)$$

λ değeri beklenen değer etrafında dalgalanmadığı ve H-fonksiyonu Maxwell hız dağılımı ile uyumlu olmadığı sürece sistem dengede olmayacaktır [6].

Maxwell-Boltzmann hız dağılım fonksiyonu atomun cinsine (m kütesine) ve T sıcaklığına bağlıdır. Aynı tür atom için fonksiyonun grafiği farklı sıcaklıklar için Şekil 3.47'de görülmektedir. Düşük sıcaklık değerleri için oldukça dik bir görünüme sahip eğri, sıcaklığın

yükselmesi ile giderek basılaşmakta, şiddet maksimumlarının değeri giderek küçülürken buna karşı gelen v_m hız değerleri (en muhtemel hız) yüksek hızlara doğru kaymaktadır. Eğri tarafından sınırlanan alan birim hacimdeki toplam atom sayısını gösterdiği ve atom sayısının sabit kaldığı kabul edilirse, ortaya çıkan sonuç mantığa uygundur. Alçak sıcaklıklarda, atomlar çeşitli hızlara sahip olmakla birlikte, hızı $v_m = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ 'e eşit veya buna yakın olanların sayısı, toplam atom sayısı içinde oldukça büyük oran gösterir. Burada k ; Boltzmann sabiti, T ; mutlak sıcaklık, m ; kütedir [56].



Şekil 3.47 Aynı tür atom için Maxwell-Boltzmann hız dağılım fonksiyonu[56]

(b) Dengenin Belirlenmesi:

İzole bir sistemde, dengenin belirlenmesi için gerekli ve yeterli koşul sistemin entropisinin maksimum olmasıdır. Ne yazık ki, entropi ölçülebilir bir özellik değildir ve mekanik niceliklerin zaman ortalamalarından hesaplanamaz.

Termodinamik denge ısı dengeyi, mekanik dengeyi ve kimyasal dengeyi kapsar. Isı dengenin anlamı, sistemi ısı transferine zorlayan bir kuvvetin bulunmayışı, mekanik denge sistemin boyutunu ve şeklini değiştirmeye zorlayan bir kuvvetin bulunmayışını ve kimyasal denge de kimyasal reaksiyonları, faz geçişlerini ve difüzyonlu kütle transferini sağlayan bir kuvvetin bulunmayışı anlamına gelir. Bu zorlayıcı kuvvetler gerek sistem sınırları sırasında, gerekse de keyfi belirlenmiş, sistemin makroskobik kısımlarının sınırları arasında da bulunmamalıdır.

Denge tanımı, moleküler dinamikte görelilik göstermektedir. Öncelikle, makroskobik bir kavram olmasından ötürü; makroskobik büyüklükteki bir sisteme sonlu bir süre etkir. Sistemi anlık olarak

örnekleme yeterli değildir. İkincisi, denge, gözlemci için gerekli olan sonlu bir süre ile ilgilidir. Buna örnek olarak, bir bıçağın karbon çeliğinden yapılma kısmı verilebilir. Bıçak birkaç saatliğine çevresiyle ısı, mekanik ya da kimyasal dengede olacağından, yapısında herhangi bir değişiklik olmayacaktır. Fakat birkaç gün sonra havadaki nem sebebiyle paslanmaya başlayacaktır. Bıçak, çevresiyle denge olup olmadığı gözlemcinin zaman ölçeğinde yatar.

Dengeleme sürecinden sonra gelen üretim sürecinde, özelliklerin hesaplanacağı denge-faz uzayı yörüngesini oluşturan ana simülasyon döngüleri yapılır. Özellikler gerek dengelemede gerekse de üretim sürecinde periyodik olarak alınır ve denge koşulları uygulanır.

3.5.4.3 Yapıların Katı-Sıvı Analizi

Simülasyonlar yapılırken, ergime eğrisine yakın faz noktalarında ya da simülasyon bir kafes yapısından başladığında, sistemin simülasyon boyunca katı mı yoksa akışkan mı olduğuna dair bazı soru işaretleri vardır. Akışkan davranışı katı-benzeri davranıştan ayırt etmek için üç nicelik incelenebilir. Bunlardan birincisi, daha önce ele alınan pozisyonel düzen parametresi λ , ikincisi ise, ortalama kare deplasmanı;

$$\Delta r^{*2}(t) = \frac{1}{N} \sum_i [r_i^*(t) - r_i^*(0)]^2 \quad (3.149)$$

Katı için $\Delta r^{*2}(t)$ neredeyse sabittir, akışkan için ise zamanla lineer olarak artar. Bir başka deyişle, bir akışkan, bir katının sahip olduğundan birkaç derece daha büyük bir self-difüzyon katsayısına sahiptir.

Üçüncüsü ise, radyal dağılım fonksiyonu $g(r)$ 'dir. Kısmi kristalize akışkanlar ve kısmi ergimiş katılar için, $g(r)$, geriye kalan kafes yapısının artıklarını gösterebilir, bu artıklar tamamen akışkan faza geçildiğinde yok olacaktır.

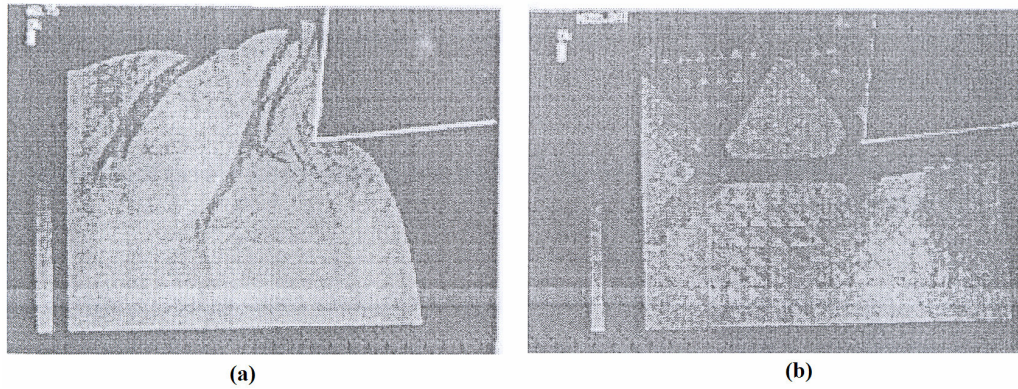
Radyal dağılım fonksiyonu şu şekilde verilir;

$$\rho g(r) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta_D[r - r_{ij}] \right\rangle \quad (3.150)$$

burada N tüm atom sayısı, $\rho = N/V$ atom sayısı yoğunluğu, r_{ij} ; i ve j atomlarının merkezleri arasındaki vektördür. δ_D genellikle Dirac delta fonksiyonu olarak adlandırılır, gerçekte ise bir fonksiyon değil bir notasyon olarak ele alınmaktadır. Radyal dağılım fonksiyonu yoğunluğa ve sıcaklığa bağlıdır. Bu sebeple, $g(r)$ simüle edilen sistemin fazının belirlenmesi için faydalı bir göstergedir.

3.5.5 Moleküler Dinamik Simülasyon Kullanılarak Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar

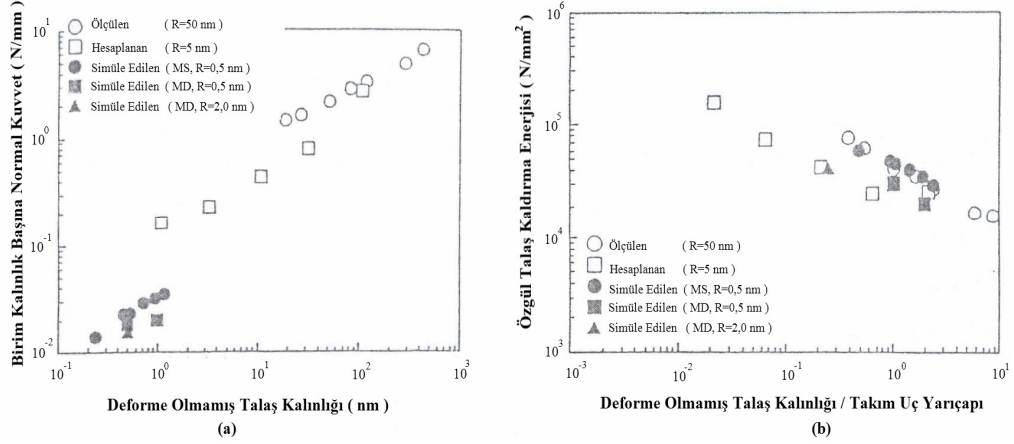
Taniguchi v.d. yaptıkları modelde, bakır malzemenin karbon atomlu kesici takımla iki boyutlu talaş kaldırılması modellenmiş, Cu-Cu ve C-C atomları arasında Morse potansiyeli, Cu-C atomları arasında ise Born-Mayer potansiyeli kullanılmıştır. Taniguchi v.d. göre talaş kaldırma sırasında ortaya çıkan ısı, iş parçasındaki dislokasyonların hareketine bağlıdır; nano ölçekte talaş kaldırma mekanizması, iş parçası malzemesinin kristal oryantasyonuna bağlıdır; tek kristal yapı malzemenin deformasyonu, yüzeydeki malzeme özelliklerinin önemli rol oynaması nedeniyle mikro ölçekte talaş kaldırmadan oldukça farklıdır; basit birçok kristal yapı malzemenin talaş kaldırma simülasyonunda görülmektedir ki; iş parçasındaki plastik deformasyon önce tane sınırlarında oluşmakta, daha sonra tanelerin içine yönelmektedir. Şekil 3.48'de Taniguchi v.d. yaptıkları modelde, farklı kristal yönlenmelerinde ortaya çıkan iş parçası deformasyonları görülebilir.



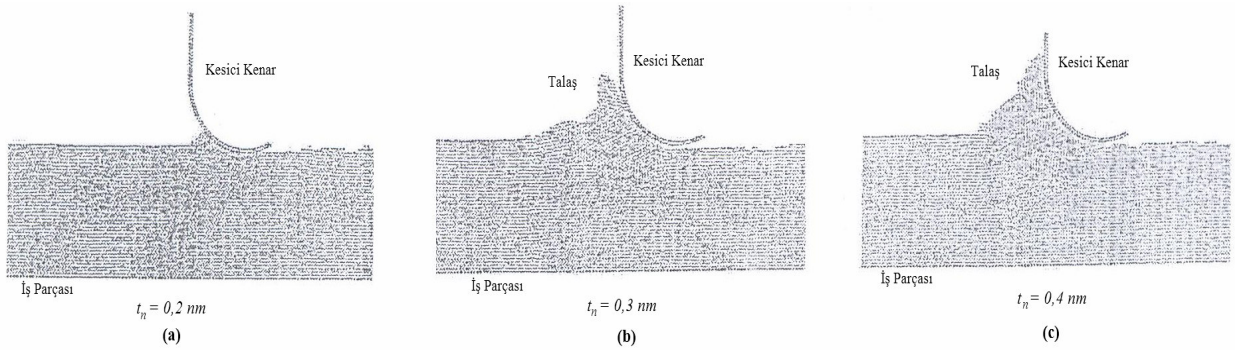
Şekil 3.48 Farklı kristal yönlenmelerinde ortaya çıkan iş parçası deformasyonları. (a) $X = [101]$, $Y = [-101]$ kristal yönlenmesinde, (b) $X = [100]$, $Y = [001]$ kristal yönlenmesinde iş parçası deformasyonları [6]

Ikawa v.d. yaptıkları modeldeki ilk çalışmalarında, boyut etkisinin kesme kuvvetlerine ve özgül enerjiye etkisi hem deneysel olarak hem de moleküler dinamik modelleme kullanılarak karşılaştırılmıştır. Atomlararası etkileşimleri modellemek için Morse potansiyeli kullanılmıştır. Ikawa v.d. göre kesici takım uç yarıçapı arttıkça kesici takımın sürme ve perdelama kuvvetlerinin artması sebebiyle kesme kuvvetleri de artmaktadır. Şekil 3.49 (a)'da birim kalınlıkta kesme kuvvetlerinin nominal deforme olmamış talaş kalınlığı (kesme derinliği) fonksiyonu olarak değişimi görülmektedir. Ikawa v.d. göre kesme derinliği, takım uç yarıçapının yaklaşık yarısından daha küçük olduğunda, özgül enerji bakırın oluşum enerjisini aşmaktadır. Bu da göstermektedir ki, çok küçük kesme derinliklerinde oldukça yüksek bir enerji, deformasyon için harcanmaktadır. Şekil 3.49 (b)'de özgül enerjinin kesme derinliği/uç yarıçapı fonksiyonuna göre değişimi görülmektedir [6]

Ikawa v.d yaptıkları modeldeki bir diğer çalışmada, moleküler dinamik yöntemi ile nanometrik ölçekte mikro talaş kaldırmanın minimum kesme derinliği, yüzey pürüzlülüğü ve yüzeyde deforme olmuş katmanın kalınlığı yönlerinden olabilirlik çalışmaları üzerine çalışmışlardır. Ikawa v.d. göre, bakır malzemenin 200 m/s kesme hızlarında 5 nm uç yarıçaplı kesici takımla talaş kaldırılması esnasında $0,2 \text{ nm}$ kesme derinliğinin altında talaş kaldırma işlemi yapılamamaktadır. Talaş kaldırmanın oluşması derinliği $0,3 \text{ nm}$ 'lik kesme derinliklerinde ve yukarısında gözlenmektedir. 10 nm uç yarıçaplı kesici takım kullanımında ise minimum talaş kaldırma derinliği $0,6 \text{ nm}$ 'ye çıkmaktadır. Alüminyum malzemenin benzer koşullarda talaş kaldırılmasında, 5 nm uç yarıçaplı bir takım kullanımında minimum talaş kaldırma derinliği $1,2 \text{ nm}$ 'ye çıkmaktadır. Alüminyum malzemenin talaş kaldırmasında minimum talaş kaldırma derinliğinin kesici takım uç yarıçapına oranı, bakırinkinden iki kat yüksek çıkmaktadır. Ikawa v.d. göre, değişik malzemelerin farklı minimum talaş kaldırma derinlikleri vermesinin sebebi, malzemenin dalma sertliği gibi plastik deformasyona karşı gösterdiği dirençtir. Şekil 3.50'de bakır malzemenin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu görülmektedir. Tablo 3.7'de, Ikawa v.d. çalışmalarında elde edilen sonuçlara göre, talaş kaldırma parametrelerinin yüzey kalitesine ve yüzey altı deformasyonuna etkisi verilmektedir.



Şekil 3.49 Ikawa v.d. göre talaş kaldırma parametrelerinin kuvvet ve özgül enerjiye etkileri. (a) kesme kuvvetlerinin deforme olmamış talaş kalınlığı (kesme derinliği) fonksiyonu olarak değişimi; (b) Özgül enerjinin kesme derinliği/uç yarıçapı fonksiyonuna göre değişimi [6]

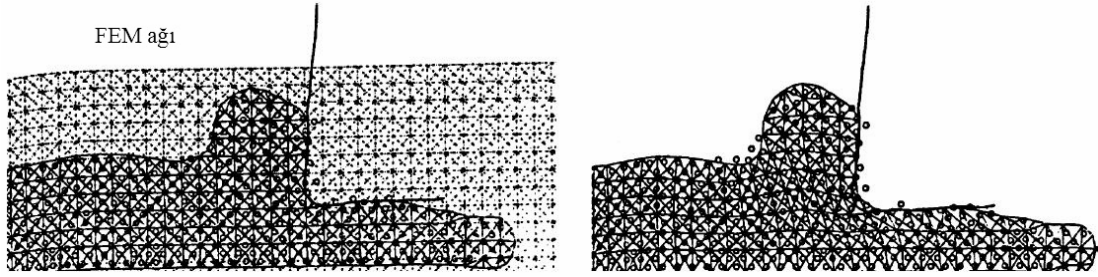


Şekil 3.50 Bakır malzemesinin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu (a) Kesme derinliği 0,2 nm; (b) Kesme derinliği 0,3 nm; (c) Kesme derinliği 0,4 nm [6]

Tablo 3.7 Talaş kaldırma parametrelerinin yüzey kalitesine ve yüzey altı deformasyonuna etkisi, talaş kaldırma hızı: 200 m/s [6]

İş Parçası	Cu	Cu	Al	Al
Kesici Takım Yarıçapı (nm)	5	10	5	10
Talaş Kaldırma Derinliği (nm)	0,5	0,6	0,5	1,2
Yüzey Pürüzlülüğü (nm)	0,5	0,7	0,8	1,4
Deforme Olmamış Katman Derinliği (nm)	4,5	4,1	6,5	9,7
Dislokasyon Derinliği (nm)	5,3	7,6	9,7	≥10

Inamura v.d çalışmalarında, atomların minimum enerji pozisyonlarını değiştirerek kuasi-statik şartlarda moleküler dinamik modellemeler yapmışlardır. Yaptıkları bir çalışmada, nano ölçekte talaş kaldırma mekaniği ve enerji kaybı incelenmiştir. Nano ölçekte talaş kaldırmada enerji kaybı, talaş kaldırma esnasında her bir atomun potansiyel enerjilerindeki değişime göre hesaplanmıştır. Görülmektedir ki, toplam enerjinin %52'si plastik deformasyon esnasında birincil ve ikincil deformasyon bölgelerinde kaybedilmekte, %42'si takım altındaki plastik deformasyonda kaybedilmekte ve %6'sı da yüzey oluşumunda harcanmaktadır. Inamura yaptığı çalışmada, 1 nm civarındaki mikro talaşlama işleminde sonlu elemanlar analizini (FEM) uygulamanın oldukça zor olduğunu bulmuştur (Şekil 3.51). Inamura v.d., her bir atomun pozisyonunu Newton denklemi dinamiği ile belirleyen moleküler dinamik simülasyonlarını uygulamayı daha başarılı bulmuşlardır. Bu tarz simülasyonlar, keskin olmayan takımların büyük bir makaslama (kayma) bölgesi oluşumuna neden olduğunu ve keskin takımlarla yüksek kesme hızlarında yapılan işlemede takıma etkiyen kuvvetlerin düşük olduğunu öngörmektedirler [24].

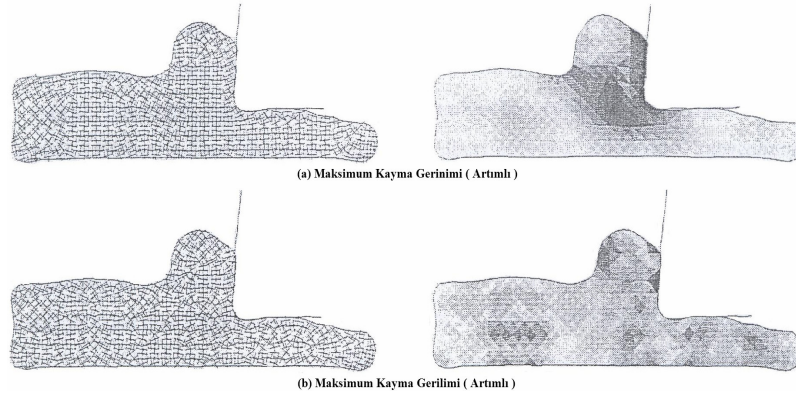


Şekil 3.51 Mikro talaşlamayı simüle etmek için FEM ağı [24]

Yine aynı tekniğe dayanarak yapılan bir başka çalışmada, kesme yönüne bağlı kristal oryantasyonu, gerilim/gerinim konularında incelemeler yapılmıştır. Görülmektedir ki, iş parçası malzemesi kesme esnasında ana kayma bölgesinde yoğun bası ve kayma gerinimlerine maruz kalmaktadır. Bununla birlikte, takımın talaş yüzeyindeki bölgesi, takım ve iş parçası arasındaki yapışma kuvvetlerine bağlı olarak çekme gerinimine maruz kalmaktadır. Kesme esnasında iş parçasında oluşan ve burkulma deformasyonu başlangıcı belirtisini gösteren gerilim dağılımı, yönü göz önüne alındığında, oldukça karmaşıktır. Ana kayma düzlemi bölgesini de kapsayan iş parçasının iç bölgesi, yoğun bir kayma gerilimi ortaya çıkartmamaktadır, ama görel olarak sabit ve yüksek bası gerilimi ortaya çıkartmaktadır. Kesme esnasında iş parçasındaki gerilim ve gerinim dağılımları arasındaki farklar gerek makro boyuttaki plastik deformasyon teorisine, gerekse de monokristallerdeki plastik deformasyon teorisine uymamaktadır. Ana kayma

düzlemindeki deformasyon mekanizması, bu bölgedeki şiddetli bası şartlarından ötürü burkulmaya bağlıdır. Şekil 3.52’de Inamura v.d. yaptıkları modellerinde nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları görülmektedir [6].

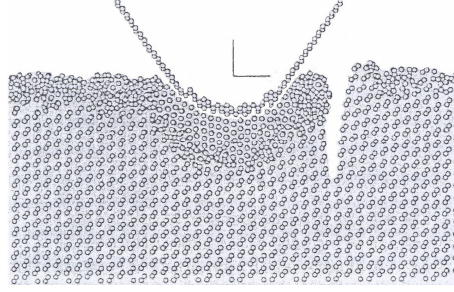
Ikawa v.d. bir başka çalışmada, polikristalin bakırın moleküler dinamik ile talaş kaldırma modelinde, kristal oryantasyonu ve tane sınırlarının etkilerinin, yüzey kalitesine etkilerini incelemiştir. Ikawa v.d. göre, monokristalin bakırın nano-kesmesinde, işlem sonu yüzey pürüzlülüğü 1 nm ’den daha az olabilmektedir. Kesici kenarın geçmesinden sonra, kesici kenarın sürmesi etkisiyle düzeni bozulan atomlar tekrar mükemmel şekilde dizilmektedirler. Görülmektedir ki, yüzeyi deformasyonlardan arınmış iş parçası, mükemmel kontrol edilebilen işleme tezgahları ile keskin ağızlı kesici takım kullanılarak elde edilebilir. Polikristalin bakırın talaş kaldırılmasında ise, çalışma yüzeyinde nanometrik deformasyonlu katman, mükemmel talaş kaldırma şartlarında bile, tane sınırlarının dislokasyon tutması sebebiyle, kaçınılmaz olarak kalacaktır. Yine de, işlem sonu iş parçası yüzey pürüzlülüğü, monokristalin bakırınki ile aynı seviyede olabileceği tahmin edilmektedir [6].



Şekil 3.52 Nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları [6]

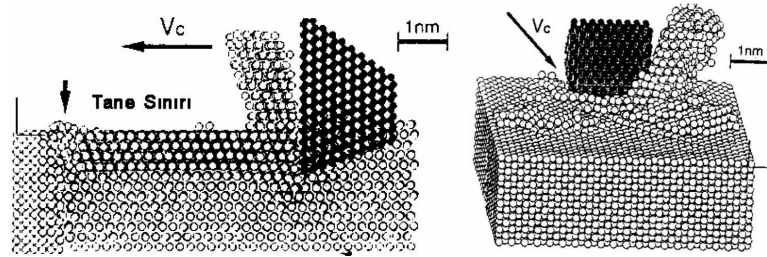
Rentsch ve Inasaki yaptıkları çalışmalarında, gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılması modellenmesi yapılmış, bunun için Tersoff’un önerdiği model kullanılmış ve gevrek malzemeler için nano ölçekte dalma simülasyonu yapılmıştır. Görülmektedir ki, dalma esnasında oluşan kırılma simülasyonu, konik kırık oluşumu olarak adlandırılan modeli desteklemektedir. Aynı çalışmada, sünek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılması sırasında oluşan yüzey ve dislokasyon oluşumu incelenmiştir, ayrıca sünek rejimde işleme esnasında oluşan yığılma ve

dislokasyon oluşumu incelenmiştir. Şekil 3.53’de Rentsch ve Inasaki’nin silisyum malzeme için nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma modeli görülmektedir.



Şekil 3.53 Silisyumun nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma modeli [6]

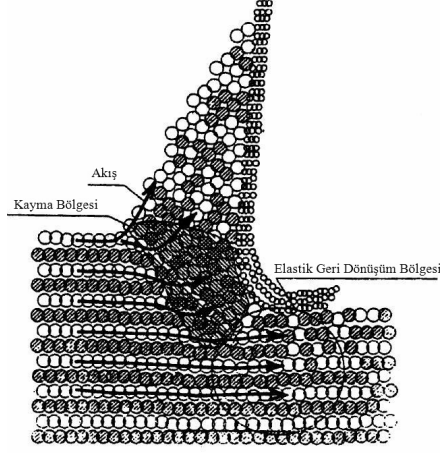
Rentsch ve Inasaki’nin bir diğer devam çalışmasında, iki boyutta monokristalin metallerde talaş kaldırma ve polikristalin metallerde talaş kaldırma konularında uygulamalar yapılmıştır. Rentsch ve Inasaki’ye göre, yüksek hızlarda işleme yapıldığında, dislokasyonların oluşumunun azalmasından ötürü, daha kaliteli yüzey elde etmek ve etkin bir kesme işlemi yapmak mümkündür. Yine Rentsch ve Inasaki’ye göre, küçük kesme derinliği ve keskin takımlar gerilim sınırlaması nedeniyle yüzey tahribatını azaltırken, büyük uç yarıçapları malzemeye derinlemesine etkileyen daha yoğun dislokasyon oluşumuna ve büyük gerilime neden olurlar. Tane sınırlarına yakın bölgelerde, düzensiz talaş oluşumu, çapak oluşumu ve daha kaba yüzey oluşumuyla birlikte daha yoğun dislokasyon oluşumu ve kayma gözlenmiştir. Şekil 3.54’de Rentschve Inasaki’nin tane sınırlarının nano ölçekte talaş kaldırma işlemine etkilerini inceledikleri moleküler dinamik simülasyonu görülmektedir [6].



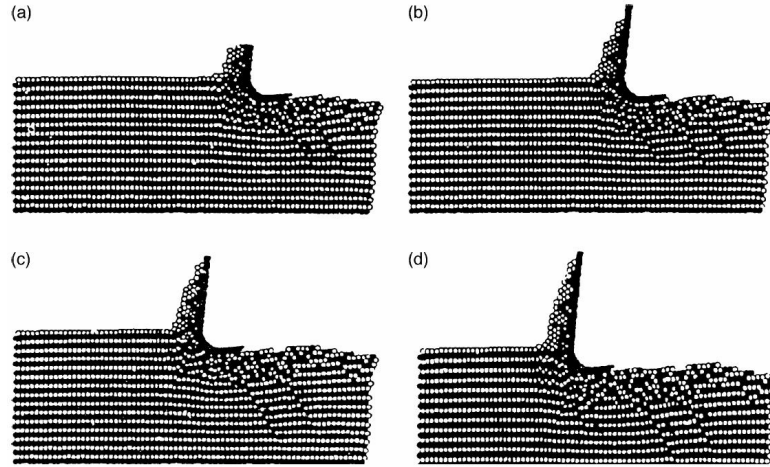
Şekil 3.54 Rentsch ve Inasaki’nin nano ölçekte talaş kaldırma işleminde tane sınırlarının etkilerini inceledikleri moleküler dinamik modeli (a) 2 boyutlu simülasyon görüntüsü, (b) 3 boyutlu simülasyon görüntüsü [5]

Kim ve Moon yaptıkları çalışmalarda, kesim bölgesini incelediklerinde (Şekil 3.55), takım körleşirse, yüksek hızlarda bu körleşmiş (keskin olmayan) takımla işlemede ortaya çıkan

kuvvetler, kör veya keskin takımla düşük hızlarda gerçekleştirilen kesme işlemi esnasında oluşan kuvvetlere nazaran önemli derecede yüksek olmaktadır. Bu yüzden, mikro ölçekte talaş kaldırmanın avantajlarından yararlanmak için Şekil 3.56'daki talaş akışının moleküler dinamik simülasyonu göstermektedir ki, kesici takım keskin ve kesme hızı yüksek olmalıdır [29].



Şekil 3.55 Kesim bölgesinin moleküler dinamik simülasyonu [29]

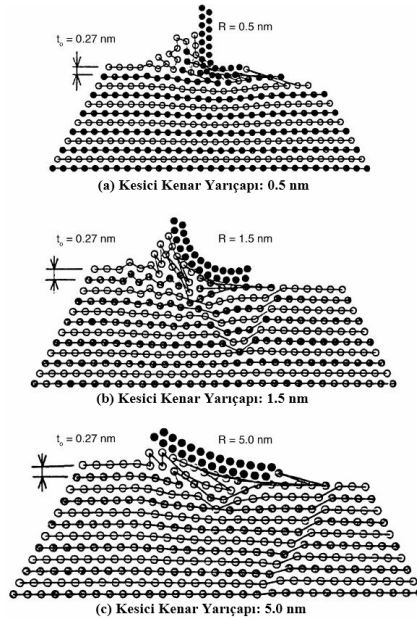


Şekil 3.56 Moleküler dinamik simülasyon ile tahmin edilen talaş oluşumu [29]

Ikawa v.d. yaptığı çalışmanın sonucu mikro ölçekte talaş kaldırmada kritik bir kesme derinliği vardır ki, bu değer altında talaş oluşumu görülmemektedir [23]. Bu konuda Yuan v.d. yaptığı çalışmada, eğer kesme derinliği, kesici kenar yarıçapının %20-40'ı değerlerinden aşağıdaysa talaş oluşumu belirtilerinin olanaksız olduğunu öne sürmüşlerdir [67]. Ikawa v.d. yaptığı bir başka çalışmada, tek ağızlı elmas takımla tornalamada yüzey pürüzlülük değerinin 1 nm olabileceğini

göstermiştir. Moleküler dinamik simülasyon yaklaşımını kullanarak kesme işlemini modellemek oldukça yararlıdır. Ikawa bu çalışmasında, komşu atomlar arasındaki etkileşimleri yöneten kanunlarla, malzeme davranışını ve akışını önceden tahmin etmemizin mümkün olabileceğini bulmuştur [22]. Ikawa'nın yapmış olduğu simülasyonlar göstermektedir ki, talaş oluşumunu tanımlayabilmek için kesme derinliği ve kesici kenar yarıçapı oldukça kritik parametrelerdir (Şekil 3.57) [25].

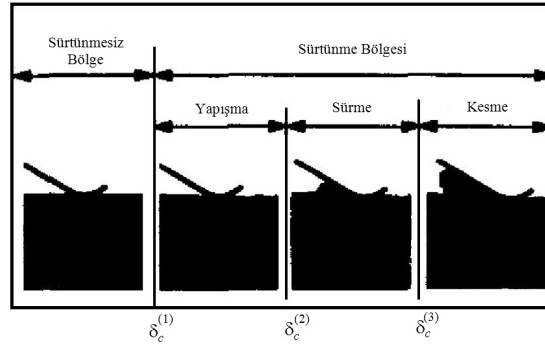
Zhang ve Tanaka, monokristalin bakırın elmas kesici takım ile işlenmesinde aşınma mekanizması, sürtünme ve yüksek kayma hızlarında temas alanının değişimlerini incelemiştir. Zhang ve Tanaka'ya göre, atomistik kayma sistemlerinde dört deformasyon rejimi oluşur. Bunlar, malzeme hatasının oluşmadığı sürtünmesiz rejim, yüzey atomlarının takım ile iş parçası arasında karşılıklı değiştirildiği yapışma rejimi, üçgensel atom kümesi olarak karakterize edilen sürme rejimi ve talaş kaldırmanın olduğu kesme rejimidir. Bu deformasyon rejimlerindeki geçişler dalma derinliği, kayma hızı, pürüz geometrisi ve yüzey yağlama şartlarına bağlıdır. Şekil 3.58'de deformasyon rejimlerinin değişimi görülmektedir.



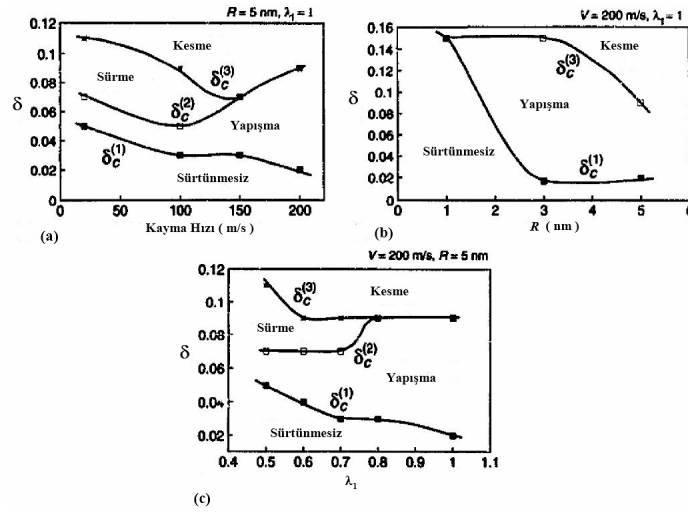
Şekil 3.57 Kesme derinliği ve kesici kenar yarıçapının talaş oluşumuna etkisi [25]

Bu şekildeki, deformasyon rejimleri arasındaki geçiş kesme derinliği/elmas takım uç yarıçapı (d/R) oranı ile tanımlanan boyutsal bir büyüklük olan çentik derinliği (δ) ile karakterize edilmektedir. Sürtünmesiz bölgede bakırın atomik kafesi yalnızca elastik deformasyona

uğramaktadır. Elmas takım kaydıktan sonra, deforme olan kafes yeniden eski haline dönmektedir. Dolayısıyla bu bölgede meydana gelen kayma, aşınma ve dislokasyona sebep olmamaktadır. δ değeri yükselip ilk kritik değerine ($\delta_c^{(1)}$) ulaştığı zaman adhezyon meydana gelir. Bakır atomlarının yüzeyindeki bazı bağlar elmas takımının kayması ile kopar. Sonra bu bakır atomları takım yüzeyine yapışarak onunla birlikte hareket eder. Bu işlem sürekli olarak devam eder. $\delta_c^{(2)}$ değerine ulaşıncaya, yapışma deformasyonu yerine sürme meydana gelmektedir. δ değeri, üçüncü kritik $\delta_c^{(3)}$ değerine ulaşıncaya, yeni bir deformasyon türü ortaya çıkar ki talaş oluşumunda kesilmeler görülmeye başlanır. Şekil 3.59'da çeşitli kayma koşullarında bu dört rejim bölgesinin geçiş değişimi görülmektedir.



Şekil 3.58 Atomistik kayma sisteminde deformasyon rejimlerinin değişimi, takım sağdan sola ilerlemektedir [68]



Şekil 3.59 Özel kayma koşulları altında rejim bölgeleri geçişi; (a) çentik derinliği ve kayma hızı arasındaki, (b) çentik derinliği ve takım uç yarıçapı arasındaki, (c) çentik derinliği ve yağlama/kirlenme arasındaki ilişki [68]

Buna göre, elmas kesici takımın uç yarıçapı sabit ama kayma hızının değişmesi durumunda, düşük kayma hızlarında bütün dört rejim bölgesinin de görüldüğü tanımlanmaktadır. Buna karşın yüksek kayma hızlarında sürme rejimi gözden kaybolmaktadır (Şekil 3.59(a)). Başka bir bakış açısı ise, verilen bir kayma hızında, eğer kesici takım uç yarıçapı 1 nm kadar çok küçük alınırsa, Şekil 3.59(b)'de görüldüğü gibi, sadece sürtünmesiz rejim bölgesi ve kesme rejim bölgesi oluşumu görülmektedir. Buna karşın yüksek uç yarıçapı değerlerinde, sürtünmesiz rejim bölgesinden kesme rejim bölgesine kadar olan tüm aşamalar ortaya çıkmaktadır. Deformasyon geçişlerini etkileyen diğer bir önemli faktör ise yüzey yağlamanın veya kirliliğinin etkisidir. Buna göre, kayma yüzeyleri kimyasal olarak temiz ($\lambda_1 = \lambda_2 = 1$) ise, bu durumda verilen kayma hızında ve takım uç yarıçapında sürme rejimi oluşmaz. Ancak yüzey yağlanmış ($\lambda_1 < 1$ ve $\lambda_2 \geq 1$) ise bu dört rejim bölgesi de gözlemlenir [68].

Komanduri v.d., geliştirdikleri yeni bir moleküler dinamik yaklaşımı, uzunluk sınırlı moleküler dinamik (Length-restricted moleküler dynamics-LRMD) ile bakır malzemenin nano ölçekte ortogonal talaş kaldırılmasını modellemişler ve konvansiyonel moleküler dinamik teknikleriyle karşılaştırma yapmışlardır. Bu teknikte, iş parçasının uzunluğu simülasyon boyunca sabit kalmaktadır, ancak iş parçasının işlenen kısmındaki simülasyon sonuçlarına etki etmeyen atomlar atılır, ama bu atomların konumları korunmaya devam eder. Bu konumlar, iş parçasına yeni atomların eklenmesine sebep olur. Yapılan araştırma sonucunda yeni bir teknik olan LRMD simülasyonu, hesaplama zamanında ve gerekli boş bellek miktarında azalmayı sağlamaktadır. Yani LRMD simülasyonu, ilk olarak atom sayısı arttıkça önem kazanan hesaplama zamanını ve boş bellek gereksinimini önemli derecede azalmasını sağlayarak işlemi kolaylaştırmaktadır. Aynı zamanda bu simülasyon yöntemi uygun hesaplama zaman diliminde düşük kesme hızlarının kullanılmasını sağlamaktadır [32].

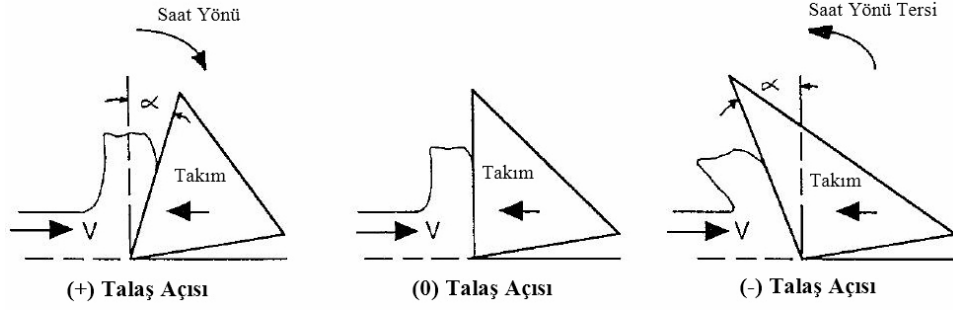
Komanduri v.d. çalışmalarında, takım geometrisinin ve kesme derinliğinin talaş kaldırmaya etkilerini incelemişlerdir. Bu çalışmada, takım kenar yarıçapı ve kesme derinliğinin kesme ve itme kuvvetlerine, kuvvet oranına, özgül enerjiye ve yüzey altı deformasyonuna etkileri incelenmiştir. Kesici takım yarıçapına nazaran kesme derinliğinin daha önemli olduğu konvansiyonel talaş kaldırma yöntemlerinden farklı olarak, nano ölçekte talaş kaldırma yöntemlerinde bu durum, küçük kesme derinlikleri ve tek kristalli elmas takım için mümkün olan

en küçük kenar yarıçapı nedeniyle önemli değildir. Yapılan çalışmalar neticesinde, dislokasyon oluşumunun özellikle yüksek kesme derinliklerinde meydana geldiği görülmüştür. Özellikle düşük kesici kenar yarıçapı değerlerinde kesme ve itme kuvvetleri, kesici kenar yarıçapı arttıkça artarken, yüksek takım yarıçapı değerlerinde bu kuvvetler daha az veya daha çok bağımsız hale gelmektedirler. Değişik uç yarıçaplı takımlarla yapılan modellemelerde, kesme derinliği (d_c) ve uç yarıçapı (r) oranı (d_c/r) sabit tutularak yapılan denemelerde görülmektedir ki, kesme derinliğinin artmasıyla, d_c/r oranından bağımsız olarak, kesme kuvvetlerinde artış ve özgül enerjide de düşüş olmaktadır [31].

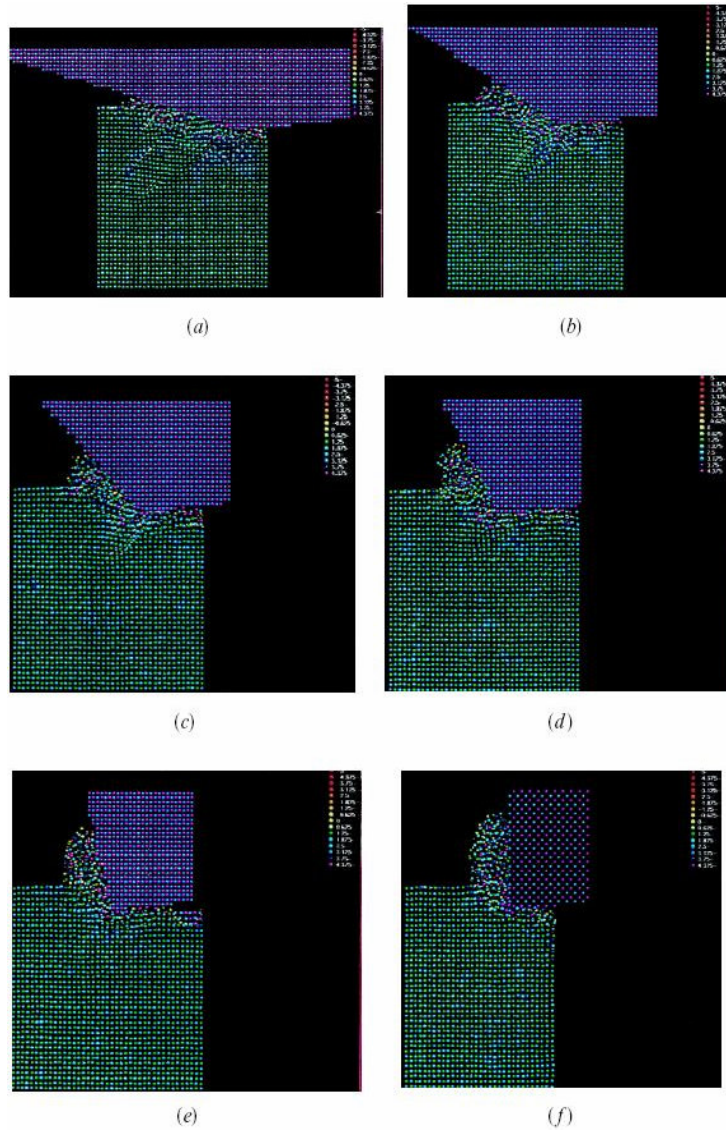
Tablo 3.8 d/R oranının 0,1–0,3 aralığındaki değerleri için farklı kesme derinliklerinde ve takım uç yarıçapı değerlerinde MD simülasyonu sonuçları [31]

No	Kesme	Takım Kenar	d/r	Kesme Kuvveti (F_c)	İtme Kuvveti (F_t)	F_t/F_c	Özgül Enerji ($N/mm^2 \times 10^5$)
	Derinliği (d), nm	Yarıçapı (r), nm		Birim Genişlik Başına, ($N/mm \times 10^2$)	Birim Genişlik Başına, ($N/mm \times 10^2$)		
1	0,362	3,62	0,1	2,86	6,056	2,117	0,79
2	0,724	7,24	0,1	3,763	7,977	2,12	0,52
3	1,448	14,48	0,1	5,564	9,254	1,663	0,384
4	2,172	21,72	0,1	6,98	9,747	1,396	0,321
5	0,362	1,81	0,2	2,773	4,67	1,684	0,766
6	0,724	3,62	0,2	3,774	7,576	2,007	0,521
7	1,448	7,24	0,2	5,509	9,079	1,621	0,38
8	2,172	10,86	0,2	6,946	9,5	1,37	0,32
9	0,362	1,207	0,3	2,654	4,155	1,566	0,733
10	0,724	2,413	0,3	3,653	6,739	1,845	0,505
11	1,448	4,827	0,3	5,407	8,839	1,635	0,373
12	2,172	7,24	0,3	6,783	8,941	1,32	0,312

Komanduri v.d. yaptıkları çalışmada, taşlamayı simüle etmek için negatif talaş açılı nano ölçekte talaş kaldırma modellemesi yapmışlardır. Bu çalışmada negatif talaş açısının; kuvvetlerdeki değişime, itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranına, özgül enerjiye ve alt yüzey deformasyonuna olan etkisi araştırılmıştır. Nano ölçekte işlemede elde edilen özgül enerji değerleri, konvansiyonel işlemede elde edilenlere nazaran daha büyük olmaktadır.



Şekil 3.60 Talaş kaldırmada kullanılan kesici takımın pozitif, 0° ve negatif talaş açılarının gösterimi [33]



Şekil 3.61 (a) -75° , (b) -60° , (c) -45° , (d) -30° ve (e) -15° negatif talaş açılı takımları kullanılarak gerçekleştirilen nanometrik işlemin MD simülasyonu [33]

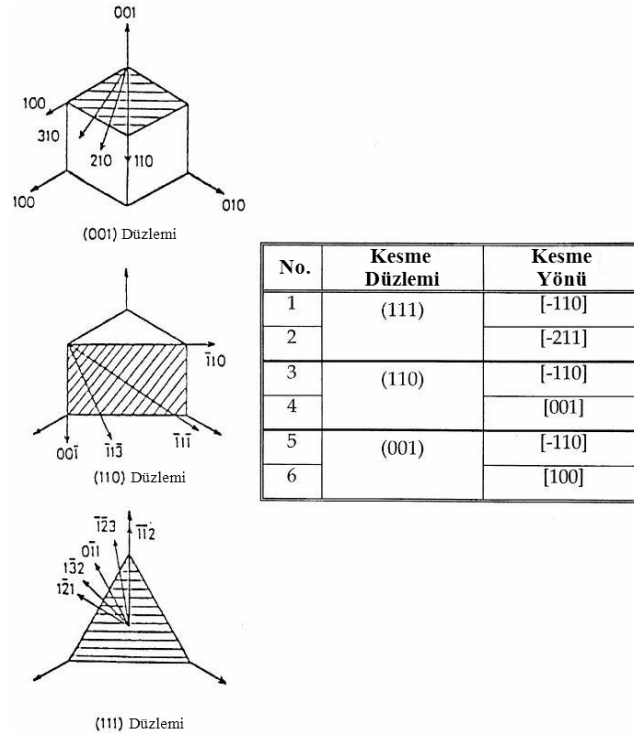
Şekil 3.61’de farklı talaş açılarındaki oldukça sert takımlarla gerçekleştirilen nanometrik talaş kaldırma işleminin moleküler dinamik simülasyonunun resimleri görülmektedir. Tablo 3.9’da ise değişik talaş açıları ile gerçekleştirilen nanometrik taşlamanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları görülmektedir. Bu çalışmadan görülmektedir ki, kesme ve itme kuvvetleri, itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranı, özgül enerji ve yüzey altı deformasyonları, negatif talaş açısı arttıkça artmıştır. Özgül enerji değeri, konvansiyonel talaş kaldırmaya nazaran nano ölçekte talaş kaldırmada daha büyük çıkmıştır [33].

Tablo 3.9 Farklı talaş açıları ile gerçekleştirilen nanometrik taşlamanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları [33]

No	Talaş Açısı (derece)	Kesme Kuvveti Birim Genişlik Başına ($10^2 N.mm^{-1}$)	İtme Kuvveti Birim Genişlik Başına ($10^2 N.mm^{-1}$)	İtme Kuvvetinin Kesme Kuvvetine Oranı	Özgül Enerji ($10^5 N.mm^{-2}$)
1	-75	7,321	17,286	2,361	1,011
2	-60	6,485	12,336	1,902	0,896
3	-45	6,132	10,6	1,729	0,847
4	-30	4,938	6,92	1,401	0,682
5	-15	4,506	4,887	1,085	0,622
6	-5	3,813	3,687	0,967	0,527
7	0	3,631	3,116	0,858	0,502
8	5	3,33	2,472	0,742	0,46
9	10	2,921	1,939	0,664	0,403
10	15	2,661	1,582	0,595	0,368
11	30	2,238	1,276	0,57	0,309
12	45	2,124	1,054	0,496	0,293

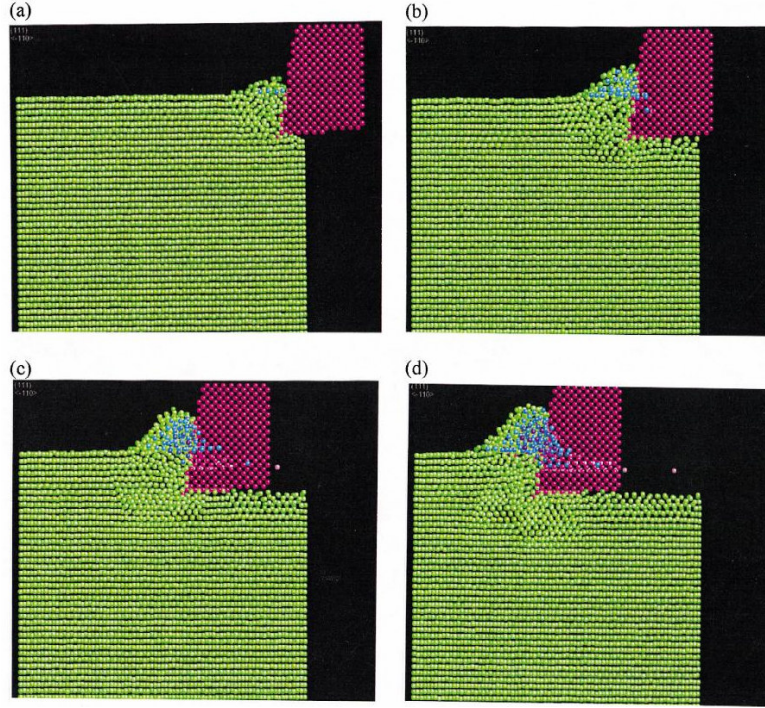
Komanduri v.d., tek kristal alüminyumda dalma ve çizmenin moleküler dinamik ile simülasyonu çalışmalarında, çok küçük dalma derinliklerinde, örneğin nano ölçekte dalmada, plastik deformasyonun, boyut etkisine bağlı olarak, iş parçasının teorik akma dayanımı tarafından belirlendiğini ortaya koymuşlardır. Her ne kadar işlem esnasındaki kuvvetler çok küçük olsalar da sürtünme katsayısı çok yüksek çıkmaktadır. Bunun sebebi olarak çok büyük negatif talaş açısı sebebiyle yüksek temas basıncı olduğu belirtilmektedir. Komanduri’ye göre çizme esnasında, atomları arasındaki bağlar atomistik seviyede kopmak ve tekrar oluşmak zorundadırlar [35].

Komanduri v.d., tek kristal alüminyum malzemenin farklı kristal oryantasyonlarının ve kesme yönlerinin nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmasına etkilerini inceledikleri çalışmalarında, elde ettikleri sonuçlara göre, yüzey altı deformasyonları, kesme kuvvetleri, talaş oluşumu, özgül enerji gibi özellikler kristal oryantasyonları ve kesme yönlerine göre değişiklik göstermektedir. Dislokasyon hareketi kesme yönüne paralel ya da dik olduğu durumda minimum olmaktadır. Talaş açısının artmasıyla kesme kuvvetlerinde bir azalma görülmüştür. Bu çalışmada { (111), (110) ve (001) } kristal yapısına sahip alüminyum malzemeler 500 m/s kesme hızında, farklı kesme derinliklerinde (0,81–1,62 nm) ve $\langle [\bar{1}10], [\bar{2}11], [100] \rangle$ kesme yönlerinde işlemeye tabi tutulmuştur. (111) kristal yapısındaki alüminyum malzeme sırasıyla $[\bar{1}10]$ ve $[\bar{2}11]$; (110) kristal yapısındaki alüminyum malzeme sırasıyla $[\bar{1}10]$ ve $[100]$ kesme yönlerinde işlenmişlerdir. Şekil 3.62’de bu çalışmada kullanılan farklı kristal yapıları ve kübik kristallerin kesme yönleri gösterilmiştir.



Şekil 3.62 Değişik kristal oryantasyonları ve kübik malzemeler için kesme yönleri [34]

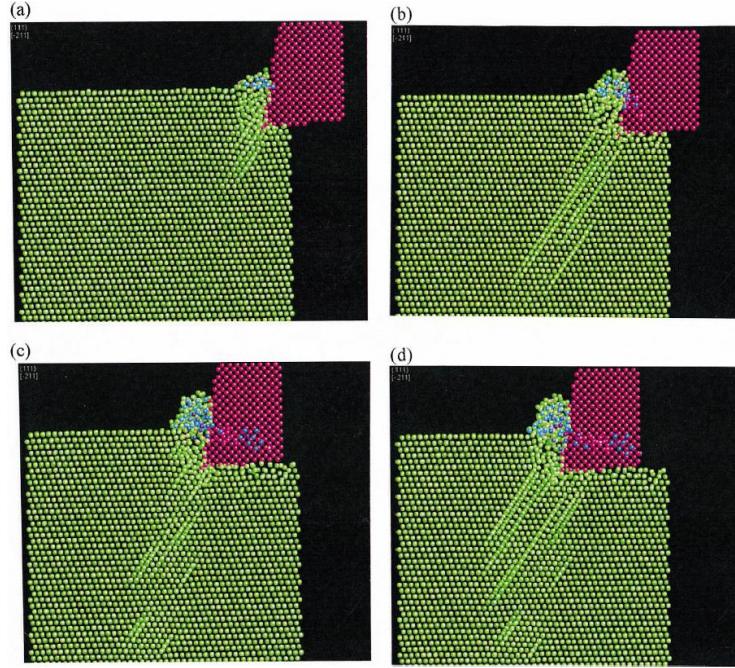
Şekil 3.63(a)-(d)'den Şekil 3.68(a)-(d)'ye kadar olan resimlerde { (111), (110) ve (001) } gibi farklı kristal yapıdaki malzemelerin $[\bar{1}10]$, $[\bar{2}11]$ ve $[100]$ gibi farklı kesme yönlerindeki 10° talaş açılı takımı ile gerçekleştirilen nanometrik kesimlerinin moleküler dinamik simülasyonları görülmektedir. Bu çalışmada da görülmüştür ki, iş parçasında, takım önünde oluşan deformasyon mekanizması, dislokasyon oluşumu ve yayılımı ve yüzey altı deformasyonlarının hepsi bu kristalografik yapıya ve kesme yönüne bağlı olarak değişim göstermektedir.



Şekil 3.63(a)-(d) (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusunda 10° talaş açılı takım ile nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.63(a)-(d)'de (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun $[\bar{1}10]$ kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Başlangıçta (Şekil 3.63(a)) malzeme, tıpkı yüksek kesme derinliklerinde gerçekleştirilen konvansiyonel kesmedeki gibi kesici takım çevresinde takım boyunca çok küçük değerlerde deforme olmaktadır. Bundan başka, iş parçası üzerinde kesilmemiş olan malzemede takım hareketinden az da olsa etkilenmektedir. Genelde Şekil 3.63(b) ve (c)'den de görüleceği üzere talaş oluşumu, kesme yönü boyunca takım ile makaslama (kayma) bölgesinde oluşan

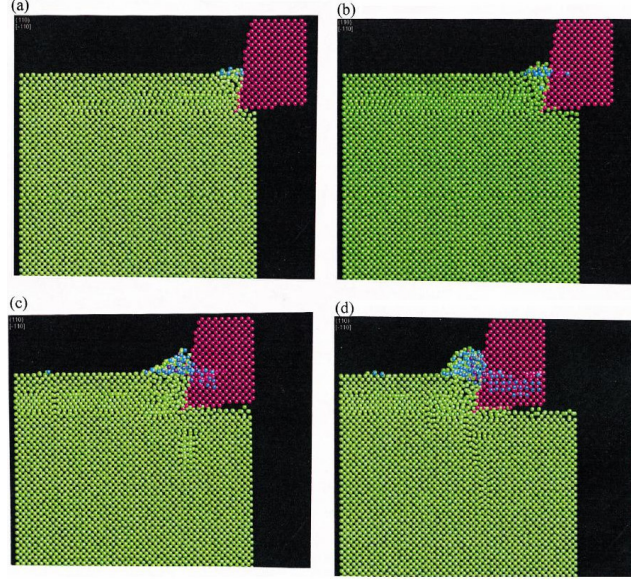
basınç etkisiyle meydana gelmektedir. Takım bu bölgeyi geçince, deforme olmuş alt yüzey bölgesinde kısmi elastik geri dönüşüm meydana gelmektedir. Şekil 3.63(d)'de görüldüğü gibi üzere, kesme işleminin son aşamasında, yüzey altı deformasyonu miktarı hemen hemen kesme derinliği miktarına eşit olmaktadır.



Şekil 3.64(a)-(d) (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{2}11]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takım ile nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.64(a)-(d)'de (111) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun $[\bar{2}11]$ kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Bu çalışmada Şekil 3.64(a)'da görüldüğü üzere malzeme içinde dislokasyon oluşumu ve yayılımı kesme yönüne $\sim 60^\circ$ lik (saat yönünün tersi) açı yapacak şekilde meydana gelmektedir. Bu durumdan, farklı kesme yönlerindeki işlemin dislokasyon oluşumuna ve yayılımına doğrudan etkisi olduğu anlaşılmıştır. Şekil 3.64(b) ve (c)'de de görüldüğü üzere malzeme içerisindeki makaslama (kayma) bölgesindeki dislokasyon yayılımı sanki $\sim 60^\circ$ lik açıyla meydana gelmektedir. Kesme işlemi süresince meydana gelen bu dislokasyonlar iş parçası içerisine doğru hareket etmektedir. Şekil 3.64(d)'de görüldüğü üzere kesme işleminin son aşamasında dislokasyonlar dışında çok az miktarda yüzey altı deformasyonları meydana gelmektedir. Bunun yanında, elastik geri dönüşüm, birçok dislokasyonun işlenmiş yüzey

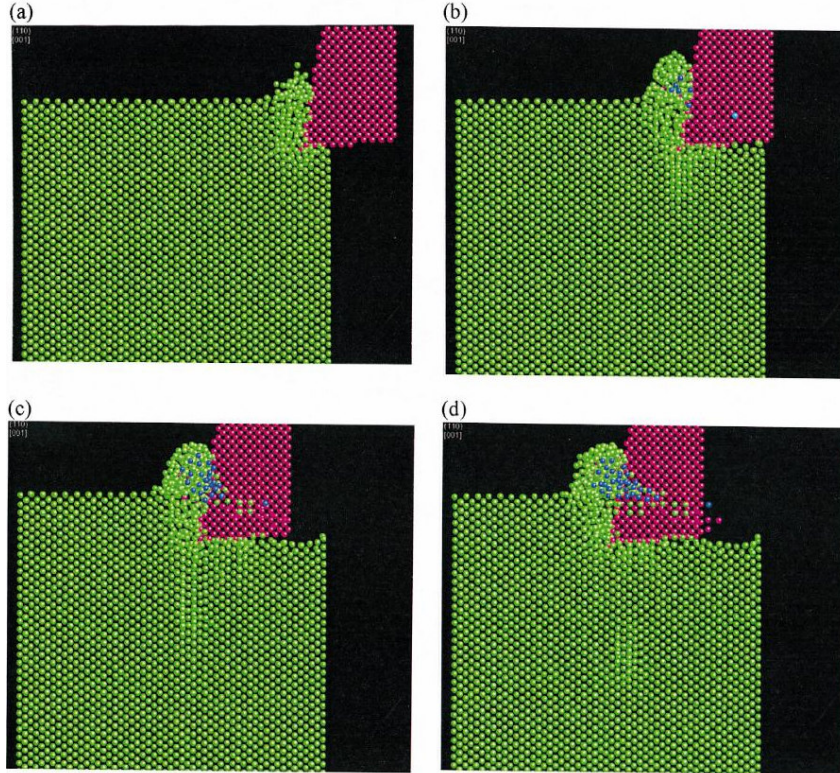
üzerinden en az yüzey altı deformasyonuna sebep olacak şekilde serbest kalmasını sağlamaktadır. Şekil 3.64(d)'de elde edilen yüzey bitirme işlemi ve yüzey tamlığı Şekil 3.63(d)'dekine kıyasla daha iyidir.



Şekil 3.65(a)-(d) (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takım ile nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.65(a)-(d)'de (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun $[\bar{1}10]$ kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Şekil 3.65(a)-(c)'de de görüldüğü üzere dislokasyonlar, hem iş parçası malzemesinin kesme derinliği bölgesinde kesim yönüne paralel, hem de takım altında kalan iş parçası malzemesi içinde kesme yönüne dik yönde oluşmaktadır. Şekil 3.65(a)'da kesme yönü boyunca birinden diğerine tıpkı iskambil kağıtlarının birbiri üzerinde kayması gibi kayan yüzeylerin simülasyonu görülmektedir. Sonuç olarak bu, kesici takımın hemen altında çok ufak bir yüzey altı deformasyonunun oluşmasına neden olur. Kesilmemiş kısımdaki derinlik boyunca meydana gelen tabakaların kayışı, kesme yönlerinin aynı olmasına rağmen Şekil 3.63(a)'daki (111) kristal yapıdaki malzemeyle elde edilen sonuçtan farklılık göstermemektedir. Şekil 3.63(b)'de, iş parçası malzemesi içinde hemen kesme derinliğinin altında yüzey altı deformasyonları oluşmaktadır. Buna karşın Şekil 3.65(b)'de kesme yönü boyunca kesme derinliği altında yüzey altı deformasyonlarının oluşmadığı gözlenmektedir. Şekil 3.65(c), kesme

yönü boyunca oluşan dislokasyonların neticesinde kesme yönüne dik yönde oluşan ve yayılan ek dislokasyonları göstermektedir. Bu dislokasyonlara, dislokasyonların kesme yönüne paralel olarak ilerlemesini (yayılmasını) engelleyen sınır atomlarının kesici takımdan daha uzak noktalarda yer alması sebep olmuş olabilir. Buna karşın Şekil 3.67(a)-(d)'de görüldüğü gibi (001) kristal oryantasyonuna sahip ve $[\bar{1}10]$ kesme yönü boyunca gerçekleştirilen işlemede dislokasyonların kesme yönüne paralel olarak yayıldığı, kesme yönüne dik dislokasyon yayılımının olmadığı görülmektedir. Buradan da, kesme yönüne dik yönde yayılan dislokasyonların oluşumunda malzemenin kristal yapısının etkisi olduğu söylenebilir. Şekil 3.65(d)'de kesme işleminin son aşamasında yerine yeni dislokasyonlar üretilmiş olmasına rağmen Şekil 3.65(c)'de görülen takım ucunun altında oluşan ve kesme yönüne dik olan dislokasyonlar görülmemektedir. Bunun sonucunda, kesme yönüne dik yöndeki dislokasyonların elastik geri dönüşüm nedeniyle sona erdiği, ancak tamamıyla değil, görüşü hakim olmuştur.

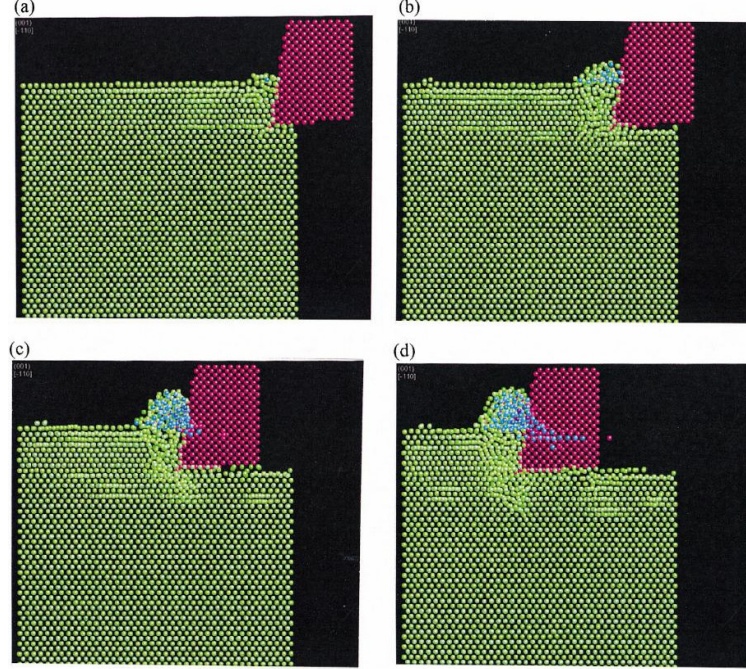


Şekil 3.66(a)-(d) (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin [001] kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.66(a)-(d)'de (110) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun [001] kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Daha önce yapılan çalışmaların hepsinden farklı olarak dislokasyonlar, kesici takım önünde kesme yönüne dik olarak oluşmakta ve iş parçasının hem altında hem de üstünde yayılmaktadır (Şekil 3.66(b)). Bu moddaki garip deformasyon ile polikristalin malzemelerin konvansiyonel talaş kaldırılmasında karşılaşılmamıştır. Kesme yönüne dik dislokasyonların üretilmesi gibi, kesici takım ucu önünde, kesme yönü boyunca büyük makaslama (kayma) açısı değerleri nedeniyle deformasyon oluşumuna eşlik etmektedir. Kesici takım önünde meydana gelen plastik deformasyon miktarlarındaki farka karşın (Şekil 3.63-3.66(a)-(d), makaslama (kayma) nedeniyle oluşan deformasyon, basınç etkisiyle oluşan deformasyona nazaran daha fazladır. Kesme işlemi süresince, Şekil 3.66(b)-(d)'de görüldüğü gibi yüzey altı deformasyon miktarı oldukça düşüktür. Ancak burada, Şekil 3.66(b) ve (c)'de meydana gelen dislokasyonlar veya yüzey altı deformasyonlar Şekil 3.66(c) ve (d)'de belli bir süre sonra gözden kaybolurlar. Bunun sonucunda burada, elastik geri dönüşümün oldukça hızlı gerçekleştiği kanısına varılmıştır. İş parçası içinde sayıca oldukça fazla dislokasyon oluşmasına karşın, bunların çoğu işlenmiş yüzeyler ile birlikte dışarı atılmaktadır. İş parçası içerisinde işlem süresinde dinlenmeye çekilen dislokasyonlar ise yeniden düzenlenmektedirler.

Şekil 3.67(a)-(d)'de (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun $[\bar{1}10]$ kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Daha önce (110) $[\bar{1}10]$ (Şekil 3.65) kombinasyonuna benzer gözlemlerin yapıldığı bu denemede, kesme yönü boyunca üreyen ve yayılan dislokasyonlar Şekil 3.67(a)'da görülmektedir. Şekil 3.67(b)'de ise iş parçası içinde birkaç nanometre hareket eden takımın kesme yönü boyunca kaymasının modeli, hatta kesme derinliği bölgesinde kesme yönü boyunca iş parçası içinde meydana gelen dislokasyon hareketleri gösterilmektedir. (111) oryantasyonu durumunda (Şekil 3.63(b)), yüzey altı deformasyonlarının düzensiz kafes formu içinde olduğu gözlenir. (110) oryantasyonu durumunda (Şekil 3.65(b)), iş parçası içindeki dislokasyonların kesme yönüne dik olduğu gözlenir. Ama , (001) oryantasyonunda, dislokasyonların iş parçası içindeki kesme derinliği bölgesi boyunca ilerlediği gözlenmiştir. Şekil 3.67(c) ve (d)'de görüldüğü üzere yüzey altı dislokasyonları kesme yönü boyunca devam etmektedir. Ancak son

aşamada kesme etkisinde olmayan bölgedeki dislokasyonlar kaybolmaz, ancak boyut olarak azalır. Bundan, elastik geri dönüşüm miktarının (001) oryantasyonunda oldukça düşük olduğu sonucuna varırız.

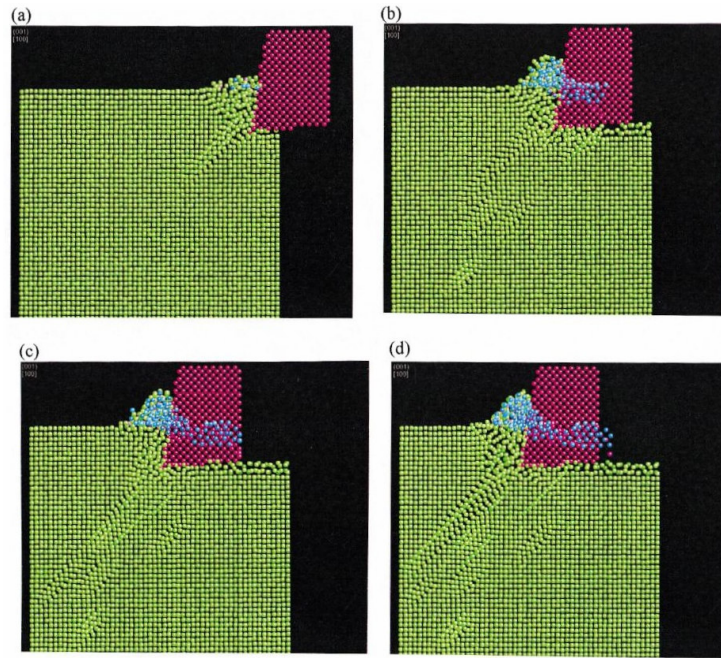


Şekil 3.67(a)-(d) (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[\bar{1}10]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.68(a)-(d)'de (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyumun $[100]$ kesme yönü boyunca nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonunun değişik aşamaları görülmektedir. Şekil 3.68(a)'da kesici takım önünde plastik deformasyon oluşumu ve iş parçası içindeki dislokasyonların kesme yönüne $\sim 45^\circ$ açı ile oluştuğu ve yayıldığı görülmektedir. Şekil 3.68(b)'de ise kesici takım ucunda oluşan ve iş parçası içinde yayılan çok yönlü dislokasyonlar görülmektedir. Şekil 3.68(c), dislokasyonların iş parçası içine doğru yayıldığı orta aşamayı göstermektedir. Şekil 3.68(d)'de ise dislokasyonların iş parçası içerisinde yayıldığı son aşama görülmektedir.

Sonuç olarak, moleküler dinamik simülasyonlarına dayanarak değişik kristalografik düzlemlerde ve kesme yönlerinde yapılan nano ölçekte talaş kaldırmada, kayma bölgesinde üç tip deformasyon görülmüştür. Birinci durumda $[(001)$ kristalografik düzlem, $[100]$ kesme yönü talaş

oluşum prosesi, konvansiyonel kesme derinliklerinde genel olarak görülen kayma düzlemi oryantasyonuna benzerdir. İkinci durumda, $[(110), [001]]$, malzeme kesme yönüne dik deforme olur, bu sebeple kayma açısı çok yüksektir. Üçüncü durumda, $[(001), [\bar{1}10]]$, dislokasyonlar kesme yönüne paralel oluşur. Bu sebeple malzeme kesme yönüne paralel deforme olur ve kayma açısı 45° 'den küçüktür. Tablo 3.10'da değişik kristalografik oryantasyonlar ve kesme yönleri için oluşan ve yayılan dislokasyon tipleri verilmiştir. Aynı şekilde Tablo 3.11'de alüminyum malzemenin farklı kristal oryantasyonlarının ve kesme yönlerinin çeşitli kesme derinliklerindeki kuvvetlere ve özgül enerjiye etkileri görülmektedir.



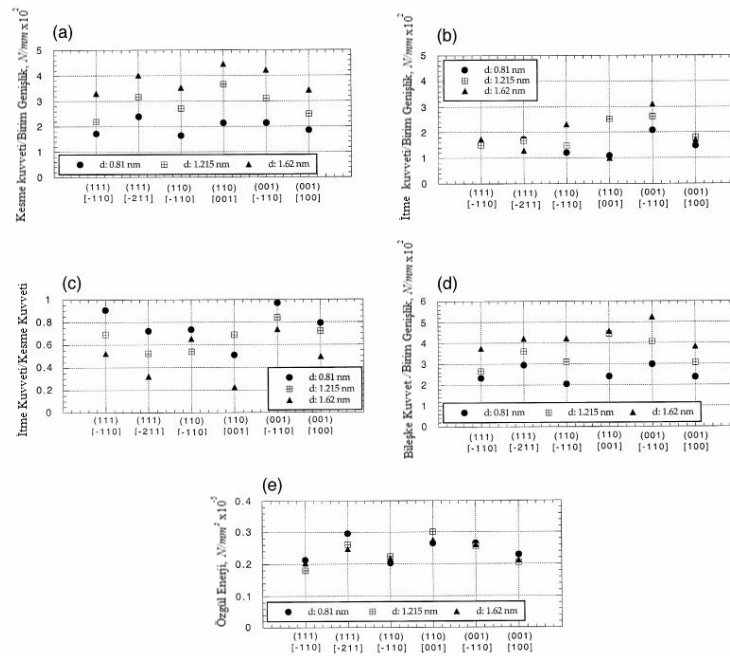
Şekil 3.68(a)-(d) (001) kristal oryantasyonuna sahip tek kristalli alüminyum malzemenin $[100]$ kesme yönü doğrultusu boyunca 10° talaş açılı takımla nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonunun aşamaları [34]

Şekil 3.69(a)-(e)'de farklı kesme derinliklerinde ($0,81-1,62 \text{ nm}$), farklı kristal oryantasyonlarına ve farklı kesme yönlerine göre kesme ve itme kuvvetlerindeki, itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimler gösterilmiştir.

Şekil 3.69(a)'da da görüldüğü üzere (111) kristal yapısına sahip malzeme üzerinde $[\bar{1}10]$ yönünde gerçekleştirilen nanometrik işlemedeki kesme kuvveti en küçük değerdedir. Şekil 3.69(d)'den bileşke kuvvet ile kesme kuvvetinin aynı tarz değişimlere sahip olduğu görülebilir.

Tablo 3.10 Farklı kristal oryantasyonları ve kesme yönleri için dislokasyon oluşum ve yayılım tipi ile kuvvet değişimindeki standart sapma değerleri [34]

No	Kesme Düzlemi	Kesme Yönü	Dislokasyon Oluşum ve Yayılımı	Kuvvet Değişimindeki Standart Sapma ($N/mm \cdot 10^2$)
1	(111)	$[\bar{1}10]$	Basma ve Kayma	1,040
2		$[\bar{2}11]$	$\sim 60^\circ$	1,093
3	(110)	$[\bar{1}10]$	Kesme yönüne paralel ve dik	1,248
4		[001]	Kesme yönüne dik	2,043
5	(001)	$[\bar{1}10]$	Kesme yönüne paralel	1,233
6		[100]	$\sim 45^\circ$	0,996



Şekil 3.69(a)-(e) Farklı kesme derinlikleri (0,81 – 1,62 nm), farklı kristal yapıları ve farklı kesme yönleri için kesme ve itme kuvvetlerindeki, kuvvetler oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimler [34]

Yapılan bir başka çalışma ise, nanometrik talaş kaldırmaya takım talaş açısının etkisidir. Bu konuda elde edilen sonuçlar Tablo 3.12’de verilmiştir. Sonuç olarak aynı kristalografik

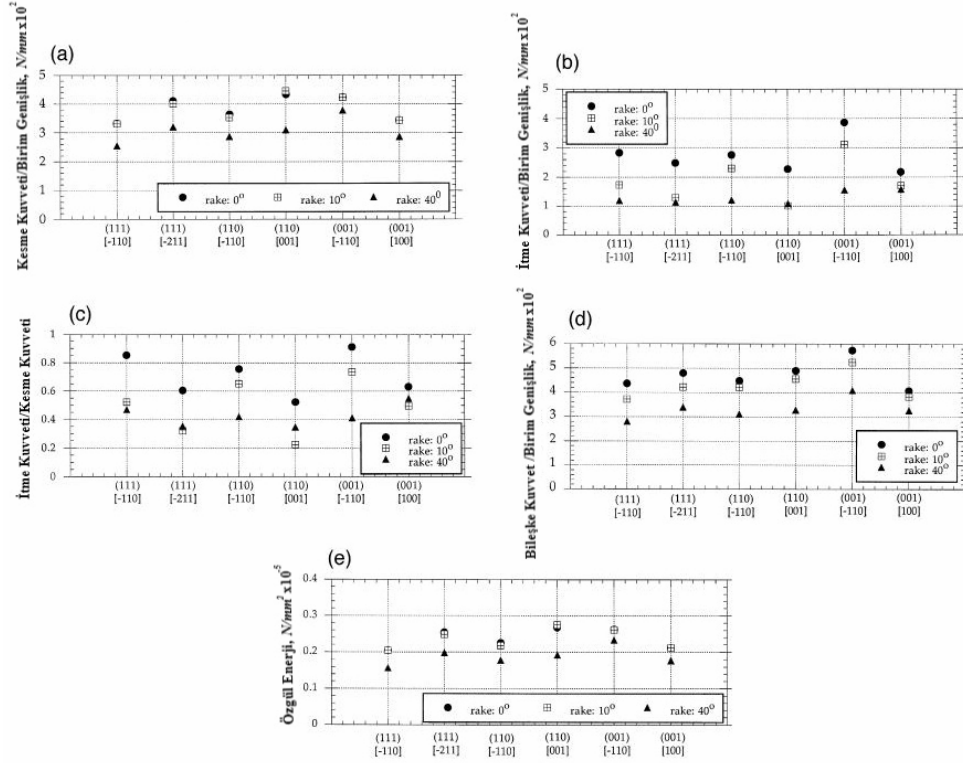
oryantasyona sahip malzemeler arasında yapılan çalışma neticesinde, takım talaş açısı arttıkça talaş uzunluğu artmakta, buna karşın yüzey altı deformasyonları azalmaktadır. Şekil 3.70(a)-(e)'de farklı takım talaş açılarında, kesme ve itme kuvvetlerindeki, kuvvetler oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimleri gösterilmektedir [34].

Tablo 3.11 Farklı oryantasyonlarda, farklı kesme yönlerinde ve farklı kesme derinliklerinde 10° talaş açılı takım kullanarak gerçekleştirilen nano ölçekte talaş kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları [34]

Kristal Oryantasyonu	Kesme Yönü	Kesme Derinliği, nm	Kesme Kuvveti/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	İtme Kuvveti/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	İtme Kuvveti/ Kesme Kuvveti	Bileşke Kuvvet/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	Özgül Enerji $N/mm^2 \times 10^5$
111	-110	0.810	1.723	1.563	0.907	2.326	0.213
		1.215	2.186	1.511	0.691	2.657	0.180
		1.620	3.306	1.732	0.524	3.732	0.204
	-211	0.810	2.395	1.728	0.722	2.953	0.296
		1.215	3.174	1.664	0.524	3.584	0.261
		1.620	4.010	1.289	0.321	4.212	0.248
110	-110	0.810	1.648	1.209	0.734	2.044	0.203
		1.215	2.725	1.468	0.539	3.095	0.224
		1.620	3.529	2.304	0.653	4.215	0.218
	001	0.810	2.143	1.091	0.510	2.405	0.265
		1.215	3.661	2.520	0.688	4.444	0.301
		1.620	4.454	1.005	0.226	4.566	0.275
001	-110	0.810	2.145	2.080	0.970	2.988	0.265
		1.215	3.116	2.617	0.840	4.069	0.256
		1.620	4.228	3.110	0.736	5.249	0.261
	100	0.810	1.857	1.471	0.792	2.369	0.229
		1.215	2.494	1.798	0.721	3.075	0.205
		1.620	3.437	1.708	0.497	3.838	0.2122

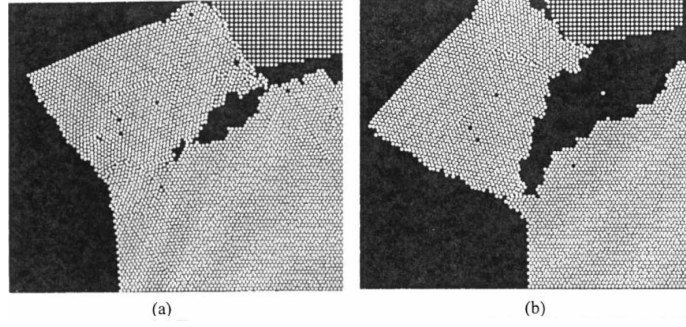
Tablo 3.12 Farklı kristal oryantasyonlarda, farklı kesme yönlerinde ve farklı talaş açılarındaki takımlar kullanılarak 1,62 nm kesme derinliğinde gerçekleştirilen nano ölçekte talaş Kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonu sonuçları [34]

Takım Talaş Açısı, derece	Kristal Oryantasyonu	Kesme Yönü	Kesme Kuvveti/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	İtme Kuvveti/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	İtme Kuvveti/ Kesme Kuvveti	Bileşke Kuvvet/ Birim Genişlik $N/mm \times 10^2$	Özgül Enerji $N/mm^2 \times 10^5$
0°	111	-110	3.324	2.840	0.854	4.372	0.205
		-211	4.110	2.490	0.606	4.805	0.254
	110	-110	3.643	2.762	0.758	4.487	0.225
		001	4.341	2.275	0.524	4.900	0.268
	001	-110	4.237	3.863	0.912	5.734	0.262
		100	3.440	2.175	0.632	4.070	0.212
10°	111	-110	3.306	1.732	0.524	3.732	0.204
		-211	4.010	1.289	0.321	4.212	0.248
	110	-110	3.529	2.304	0.653	4.215	0.218
		001	4.454	1.005	0.226	4.566	0.275
	001	-110	4.228	3.110	0.736	5.249	0.261
		100	3.437	1.708	0.497	3.838	0.2122
40°	111	-110	2.548	1.197	0.470	2.815	0.157
		-211	3.204	1.136	0.355	3.399	0.198
	110	-110	2.879	1.207	0.419	3.122	0.178
		001	3.106	1.083	0.349	3.289	0.192
	001	-110	3.78	1.557	0.412	4.088	0.233
		100	2.867	1.575	0.549	3.271	0.177

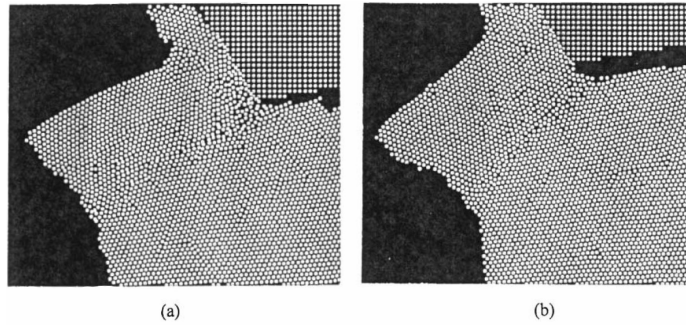


Şekil 3.70(a)-(e) 1,62 nm kesme derinliğinde, farklı talaş açıları, farklı kristal yapıları ve farklı kesme yönleri için kesme ve itme kuvvetlerindeki, kuvvetler oranındaki, bileşke kuvvetteki ve özgül enerjideki değişimler [34]

Komanduri v.d. bir başka çalışmada, nano ölçekte talaş kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonunu farklı kesim koşulları altında takım çıkış etkilerini yani, çapak oluşumunu ve malzemeden çıkış bozulmasını araştırmak amacıyla kullanmışlardır. Çapak oluşumu ve çıkış bozulması üzerinde malzeme süneklik veya gevrekliğinin, takım talaş açısının, kesme derinliğinin ve iş parçasındaki dış zorlamaların etkileri araştırılmıştır. Bilindiği üzere, iş parçasındaki çapak oluşumu düzgün talaş oluşumunu engellemekte ve çıkışa yakın yerde hem iş parçası hem de kesici takımda kuvvetlerin, baskıların ve gerilimlerin oluşmasına neden olmaktadır. Bu durum ise talaş üzerinde zararlı etkiye ve seramik, semente edilmiş karbür (seramik parçacıklarının metal matriks ile karıştırıldığı metal matriksli kompozit malzeme) gibi sert kesici takımların kırılmasına yol açmaktadır. Çıkış bozulmasında negatif ya da pozitif çapak oluşumu iş parçasının sünekliğine ya da gevrekliğine bağlıdır. Şekil 3.71 ve Şekil 3.72'de sırasıyla gevrek ve sünek malzemeler için çıkış bozulmasının moleküler dinamik simülasyonunun resimleri verilmektedir.



Şekil 3.71 Gevrek malzemelerin nanometrik işlenmesinde çıkış bozulmasının moleküler dinamik simülasyonu [36]

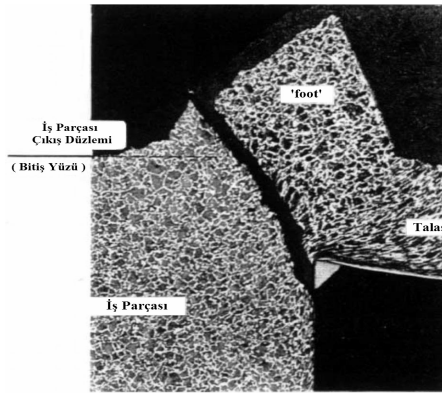


Şekil 3.72 Sünek malzemelerin nanometrik işlenmesinde çıkış bozulmasının moleküler dinamik simülasyonu [36]

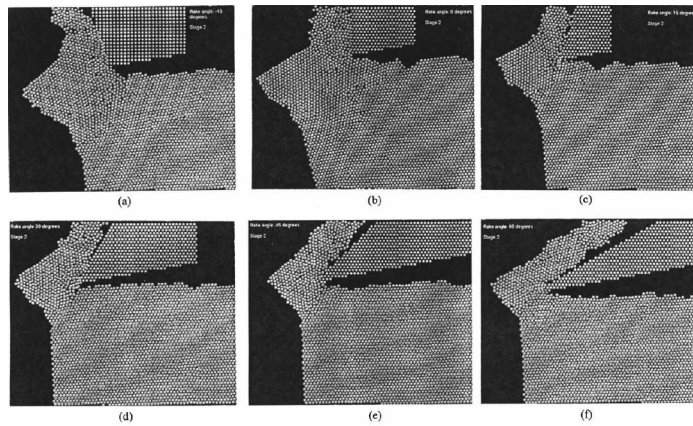
Şekil 3.71(a)'dan görüldüğü üzere, gevrek malzemelerde kesici takım çıkış noktasına yaklaştığı zaman, takım ucunun olduğu noktada çatlak başlangıcı görülür ve Şekil 3.71(b)'de görüldüğü gibi yayılır. Bu olumsuz makaslama (kayma) ve bozulma, kesme derinliği çizgisi üzerindeki birincil makaslamanın simetri ikizine yakındır. Bu nedenle talaş, kesici takım nedeniyle 'foot' etkisi yaratarak ayrılmaktadır. Sünek malzemenin kesilmesi durumunda ise iş parçası içinde kesici takım ucundan başlayan olumsuz makaslama Şekil 3.72(a)'da görülmektedir. Ama Şekil 3.72(b)'de görüldüğü üzere bu olumsuz makaslama (kayma) bölgesinin büyümesine neden olacak ani kırılma meydana gelmemektedir. Burada talaş, gevrek kırılma olmadan makaslama işlemi etkisiyle sonradan kesme derinliği çizgisinden kalkmaktadır.

Şekil 3.74(a)-(f) ve Şekil 3.75(a)-(f) sırasıyla sünek ve gevrek iş parçası malzemelerinin -15° , 0° , 15° , 30° , 45° ve 60° talaş açılarındaki takımlarla nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşamasının moleküler dinamik simülasyonunun resimleridir. Aynı zamanda Şekil 3.71 ve Şekil 3.72'de görülen simülasyonlar -30° talaş açılı takımla gerçekleştirilmiştir. Bu konuda yapılan

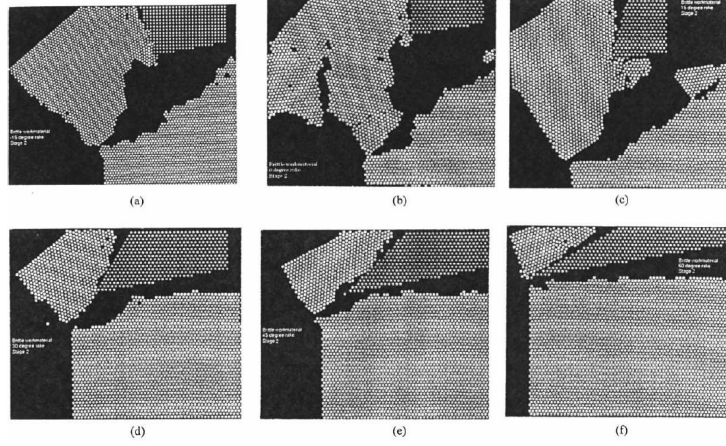
araştırma neticesinde, sünek malzemelerde, iş parçası malzemesi içinde tüm talaş açılarında olumsuz makaslama (kayma) bölgesi oluşumu gözlenmektedir. Ama yüksek negatif talaş açılı takımında makaslama (kayma) bölgesi genişliği yüksektir ve negatif talaş açısı azaldıkça azalmaktadır. Tüm takım talaş açılarında olumlu çapak oluşumu da görülebilir. Yapılan bir sonraki çalışmada, iş parçasının çıkış ucundaki hatanın olduğu nokta ‘pivoting noktası’ olarak ve bu nokta ile iş parçası üzerindeki bozulmaların başladığı nokta ‘bozulmaların başlama noktası (FSP-Failure Starting Point)’ arasındaki mesafe tartışılmıştır. Sonuç olarak negatif talaş açısı arttıkça çıkış bozulmalarının başladığı noktanın (FSP) azaldığı gözlemlenmiştir. Negatif talaş açısı arttıkça çapak kalınlığı ve yüksekliğinde artış gözlemlenmiştir.



Şekil 3.73 Çıkış bozulması, olumsuz makaslama (kayma) ve ‘foot’ oluşumunun meydana geldiği talaşın mikroskobik görüntüsü [36]

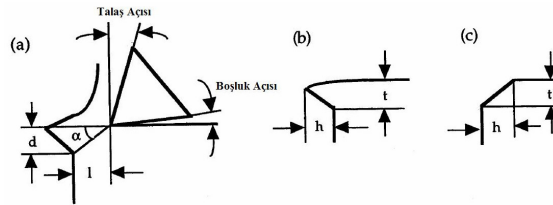


Şekil 3.74 (a) -15°, (b) 0°, (c) 15°, (d) 30°, (e) 45° ve (f) 60° talaş açılı takımlarla sünek iş parçası malzemesinin nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşaması moleküler dinamik simülasyonu [36]



Şekil 3.75 (a) -15° , (b) 0° , (c) 15° , (d) 30° , (e) 45° ve (f) 60° talaş açılı takımlarla gevrek iş parçası malzemesinin nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşaması moleküler dinamik simülasyonu [36]

Gevrek malzemelerde ise, pozitif talaş açısı arttıkça, kesici takımın sebep olduğu kırılma boyutlarında azalmalar meydana gelir. 60° talaş açılı takımla gerçekleştirilen işlemede çapak oluşumu görülmemiş ve talaşın iş parçasından kesme derinliği çizgisi doğrultusunda ayrıldığı gözlenmiştir. Ama negatif talaş açısı arttıkça, ‘foot’ oluşumu ve sonradan iş parçası üzerinden bir miktar talaş ayrılması görülmüştür. Şekil 3.76’da ise bu çıkış noktasındaki ölçülen boyutlar şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 3.76 Çıkış bozulmasında ölçülebilen boyutların şematik gösterimi [36]

Şekil 3.77’de ise talaş açıları ile (a) ‘pivot’ boyutlarındaki, (b) çapak boyutlarındaki ve (c) çapak boyutları oranı ve kuvvetler oranındaki değişimler gösterilmektedir. Şekil 3.77(a) ‘da görüldüğü üzere negatif talaş açısı arttıkça sünek malzeme için ‘pivot’ boyutları d ve l ’de artmaktadır. Ancak d ’nin artış oranı l ’ye nazaran daha fazladır. Pozitif talaş açılı takım kullanılması durumunda, plastik deformasyon bölgesi çoğunlukla takım ucu çevresinde ve birincil makaslama (kayma) bölgesinde oluşur. Pozitif talaş açısı azaldıkça, plastik deformasyon iş parçası içine doğru yayılmaktadır. Buna ek olarak yüksek negatif talaş açılı takımlarla elde edilen plastik deformasyon bölgesinin yarıçapı pozitif talaş açılı takımlarla oluşan deformasyon bölgesi

yarıçapına nazaran daha yüksektir. Sonuç olarak negatif talaş açılı takım kullanımında plastik/elastik bölge yaklaşımı ile çıkış kenarı daha erken ve daha derin oluşmaktadır. Şekil 3.77(b), sünek veya gevrek malzemeler için takım talaş açısı ile çapak boyutları (t ve h) arasındaki değişimi göstermektedir. t ve h değerleri negatif talaş açısı arttıkça artmaktadır. Gevrek malzemelerin t ve h değerleri, yumuşak malzemelerin t ve h değerlerine nazaran daha büyük çıkmıştır. Şekil 3.77(c)'de boyutlar ve kuvvetler oranı görülmektedir. Pozitif talaş açısı arttıkça bu oranlarda düşüş görülmektedir.

Tablo 3.13 Sünek malzemeler için 'Pivot' boyutları (Şekil 3.77(a)) [36]

Talaş Açısı (Derece)	Bozulmaların Başlama Noktası (FSP, nm)	'Pivot' Derinliği (d , nm)	Çıkış Noktasından 'Pivot'a Olan Mesafe (l , nm)
-30	7,54	11,21	5,52
-15	8,75	9,91	5,0
0	10,56	7,76	4,31
15	11,46	5,34	3,28
30	12,67	4,22	2,76
45	15,38	3,45	2,41
60	19,60	2,76	2,07

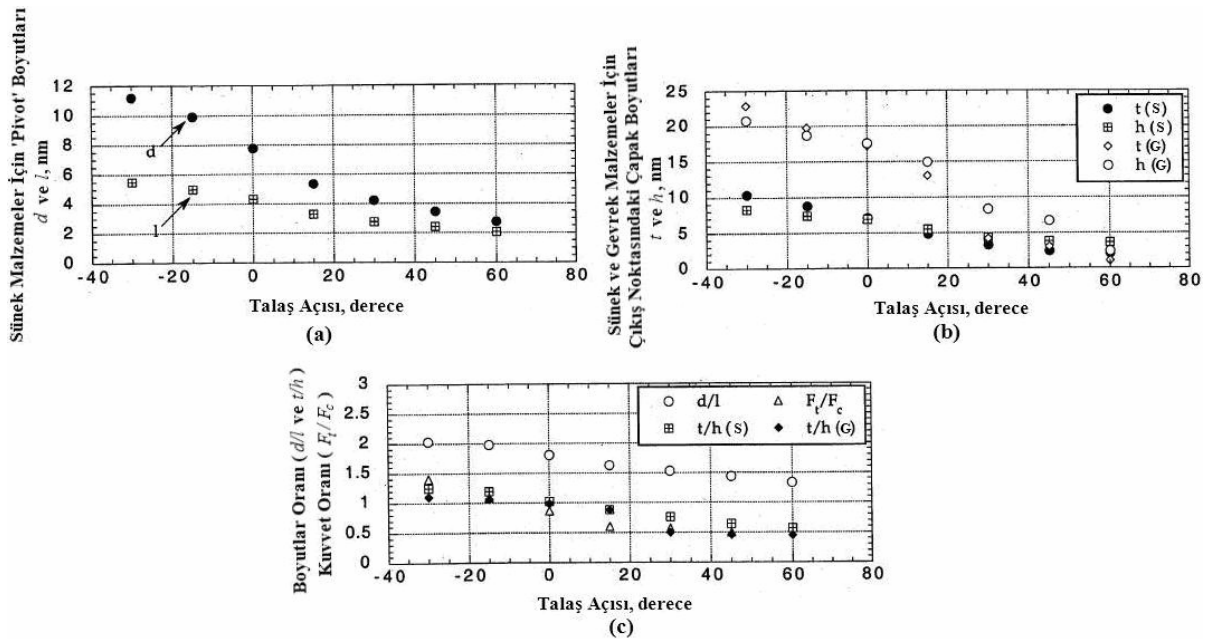
Tablo 3.14 Bozulma sonrası çapak boyutları (Şekil 3.77(b)) [36]

Talaş Açısı (Derece)	Bozulma Sonrası 'Pivot' Derinliği (t , nm)		Bozulma Sonrası 'Pivot' Yüksekliği (h , nm)	
	Sünek (S)	Gevrek (G)	Sünek (S)	Gevrek (G)
-30	10,34	22,90	8,28	20,82
-15	8,79	19,78	7,41	18,74
0	7,07	17,20	6,90	17,59
15	4,83	13,04	5,52	14,96
30	3,28	4,16	4,31	8,33
45	2,41	3,05	3,79	6,68
60	2,07	1,08	3,62	2,40

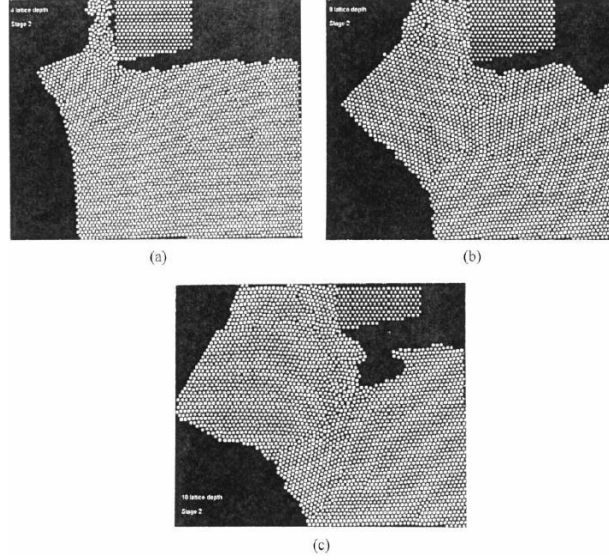
Tablo 3.15 Sünek ve gevrek malzemeler için boyutlar oranı, bileşke kuvvet oryantasyonu, kesme yönüne bağımlı negatif talaş açısı ve kuvvet oranı [36]

Talaş Açısı Derece	Sünek Malzeme İçin (S) d/l Oranı	Sünek Malzeme İçin (S) t/h Oranı	Gevrek Malzeme İçin (G) t/h Oranı	Kuvvet Oranı (F_t/F_c) ^a	Negatif Kayma Açısı (ϕ , derece)	Bileşke Kuvvet Oryantasyonu (ϕ^a , derece)
-30	2.03	1.25	1.1	1.4	40	54.46
-15	1.98	1.19	1.06	1.09	30.96	47.33
0	1.80	1.02	0.98	0.86	30.11	40.63
15	1.63	0.88	0.87	0.60	28.81	30.75
30	1.53	0.76	0.50	0.57	24.23	29.68
45	1.43	0.64	0.46	0.50	26.57	26.38
60	1.33	0.57	0.45	-	24.00	-

Şekil 3.78(a)-(c), sünek malzemelerin farklı kesme derinliklerindeki nano ölçekte talaş kaldırılmasının çıkış aşamalarını göstermektedir. Bunun sonucunda kesme derinliği arttıkça çapak boyutları (t ve h) ve 'pivot' boyutları da (d ve l) artmaktadır. 2,9 nm'ye kadar olan derinliklerde çatlak oluşumu görülmemiştir. Başka bir deyişle, kesme derinliği 1,45–2,9 nm arasında iken çapak oluşumu olumlu yönde olmuştur.



Şekil 3.77 Talaş açısı ile (a) 'Pivot' Boyutlarında, (b) çapak boyutlarında ve (c) çapak boyutları oranı ve kuvvet oranındaki değişimler [36]



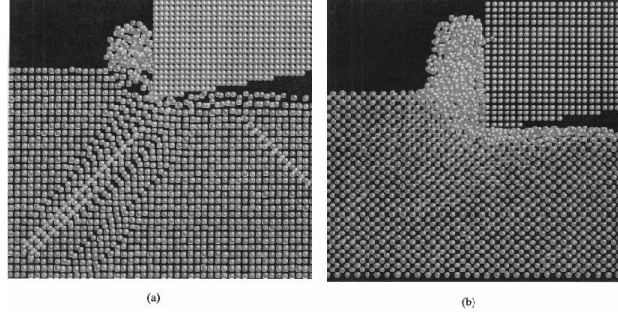
Şekil 3.78 Sünek malzemelerin nanometrik kesiminde kesme derinliğinin çıkış bozulması üzerine etkisi (a) dört kafes boşluğu, (b) sekiz kafes boşluğu, (c) on kafes boşluğu [36]

Sonuç olarak çıkış bozulmasında negatif ya da pozitif çapak oluşumu iş parçası sünekliğine ya da gevrekliğine bağlıdır. Sünek malzemelerin birçoğunda olumsuz makaslama (kayma) oluşumuna rağmen, iş parçası içinde çatlak yayılımı olmadan olumlu çapak oluşumları görülmüştür. Buna karşın, gevrek malzemelerin çoğunda çatlak ile birlikte olumsuz çapak oluşumu meydana gelmiştir. Sonuç olarak gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılmasında, kesici takım kırılmasının olma ihtimali yüksektir [36].

Komanduri v.d. çalışmalarında, silisyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırılmasını, Tersoff potansiyeli kullanarak geliştirdikleri modelde incelemişlerdir. Bu çalışmada Şekil 3.79(a) ve (b)'de farklı süneklik özelliğine sahip alüminyum ve silisyum malzemelerinin (takım talaş açısı 0° ; alüminyum için kesme derinliği $0,81 \text{ nm}$ ve silisyum için kesme derinliği $1,1 \text{ nm}$; kesme genişliği $3,26 \text{ nm}$) nano ölçekte talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonu görülmektedir.

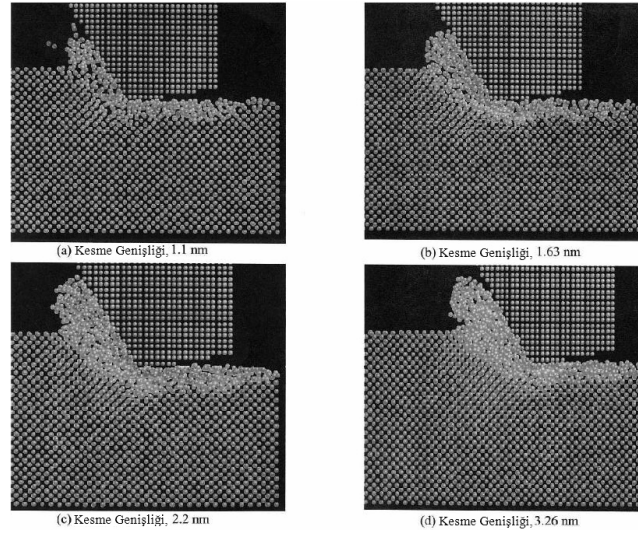
Alüminyum gibi sünek malzemelerin işlenmesindeki talaş oluşumu kristalografik düzlemlerdeki ve yönleredeki takım önünde oluşan birincil bölgedeki plastik deformasyon yoluyla oluşmasına rağmen, silisyum malzemenin talaş oluşumu belirli bir kristalografik oluşum olmadan ekstrüzyon-benzeri bir işlemle oluşmaktadır. Bunun sebebi olarak, hidrostatik basınç altında ve

bunu izleyen malzemenin yoğunlaşması sebebiyle α -silisyumdan β -silisyuma geçmesi verilmektedir.



Şekil 3.79 (a) Alüminyum, (b) Silisyum malzemesinin nano ölçekte işlenmesinin moleküler dinamik simülasyonu. Takım talaş açısı 0° ; alüminyum için kesme derinliği $0,81 \text{ nm}$ ve silisyum için kesme derinliği $1,1 \text{ nm}$; kesme genişliği $3,26 \text{ nm}$ [37]

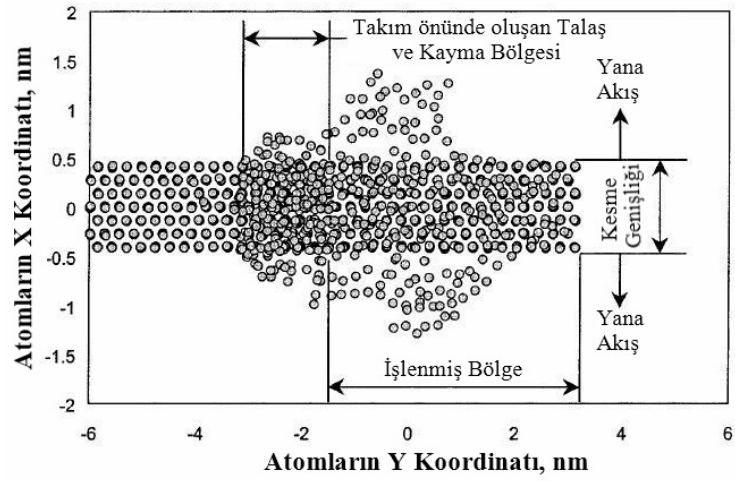
Şekil 3.80(a)-(d)'de silisyum malzemesinin farklı kesme genişliklerinde gerçekleştirilen moleküler dinamik simülasyonları görülmektedir. Buna göre, kesme derinliğine bağlı olarak yüzey altı deformasyonu, hem talaş açısı artışında hem de kesme genişliğinin kesme derinliğine oranı (w_c/d_c) azaldığında azalmaktadır. Böylece, kesme derinliğine bağlı yüzey altı deformasyonunu azaltmak için, küçük negatif talaş açısı ve düşük w_c/d_c oranları tavsiye edilmektedir. Şekillerden de görüldüğü üzere kesme genişliği arttıkça, talaş hacmi de artmaktadır.



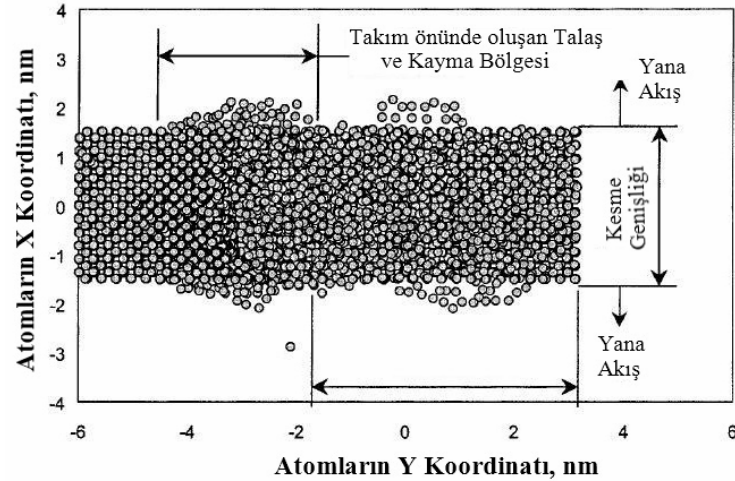
Şekil 3.80 Farklı kesme genişliklerinde gerçekleştirilen nanometrik kesimin moleküler dinamik simülasyonu (a) Kesme Genişliği: $1,1 \text{ nm}$, (b) Kesme Genişliği: $1,63 \text{ nm}$, (c) Kesme Genişliği: $2,2 \text{ nm}$ ve (d) Kesme Genişliği: $3,26 \text{ nm}$. Takım talaş açısı -30° ve kesme derinliği $1,1 \text{ nm}$ [37]

Komanduri v.d. göre silisyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırılması şu dört mekanizmadan oluşmaktadır;

- I. Kesici takım önündeki malzeme sıkışması,
- II. Ekstrüzyon benzeri bir süreç ile talaş oluşumu,
- III. Yana akış (SF),
- IV. Kesici takımın altındaki işlenmiş yüzeyde oluşan yüzey altı deformasyonu Şekil 3.81'de görülmektedir.



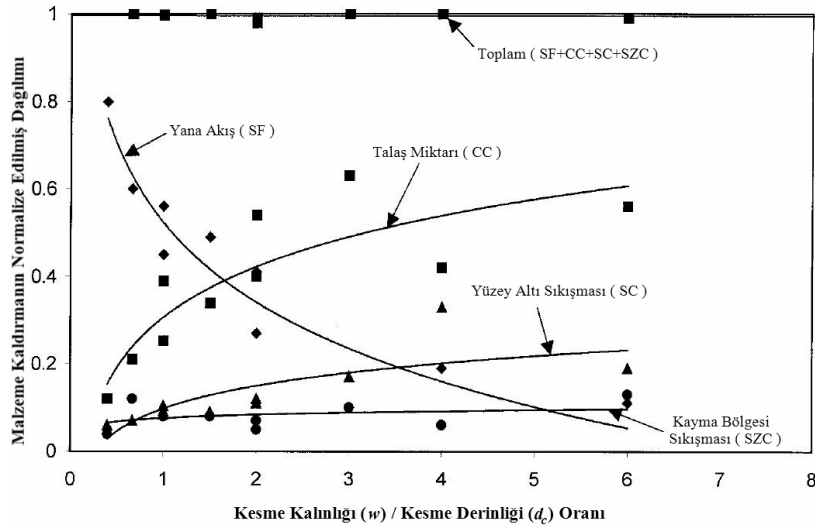
(a)



(b)

Şekil 3.81 İki farklı kesme genişliğinde oluşan atomların dağılımı. (a) 1,1 nm ; (b) 3,26 nm ; takım talaş açısı -30° ; kesme derinliği 1,1 nm [37]

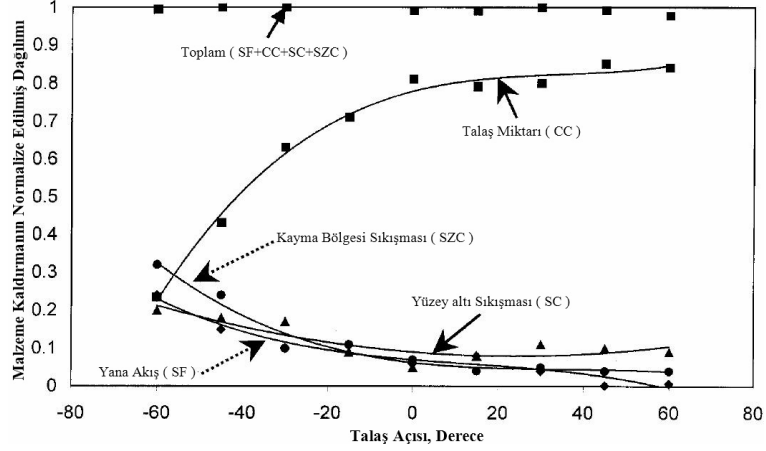
Yana akış, w_c arttığında azalmakta, d_c azaldığında artmaktadır. w_c/d_c arttığında ise, yana akış azalmaktadır. Negatif talaş açısı arttıkça kesme ve itme kuvveti ve özgül enerji değerleri de artmaktadır. Aynı şekilde talaş açısı arttığında ya da w_c/d_c oranı arttığında talaş miktarı da artmaktadır. Her iki durumda da yana akış azalmaktadır. Yüzey altı yoğunlaşması, talaş açısı arttıkça azalmakta, fakat w_c/d_c arttıkça artmaktadır. w_c/d_c oranı düşük olunca, malzeme kaldırılması, çok küçük talaş oluşumuyla, yana akış tarafından yerine getirilmektedir. w_c/d_c oranı büyük olunca, malzeme kaldırılması, talaş miktarının artmasıyla beraber yana akış azalmaktadır. Yine de, yüzey altı sıkışması, w_c/d_c oranı arttıkça artmaktadır. Yüzey altı deformasyonunu azaltmak için daha dar kalınlıklar tercih edilmeli, böylelikle malzeme kaldırma yana akış ile yapılmaktadır. Gerçekte, silisyum malzemenin taşlanması, bu durum talaş kaldırmanın ana modu olarak görülmektedir. Yana akış (SF), talaş miktarı (CC), yüzey altı sıkışması (SC) ve kayma bölgesi sıkışmasının (SZC) w_c/d_c oranına bağlı değişimlerini gösterir grafik Şekil 3.82’de görülmektedir.



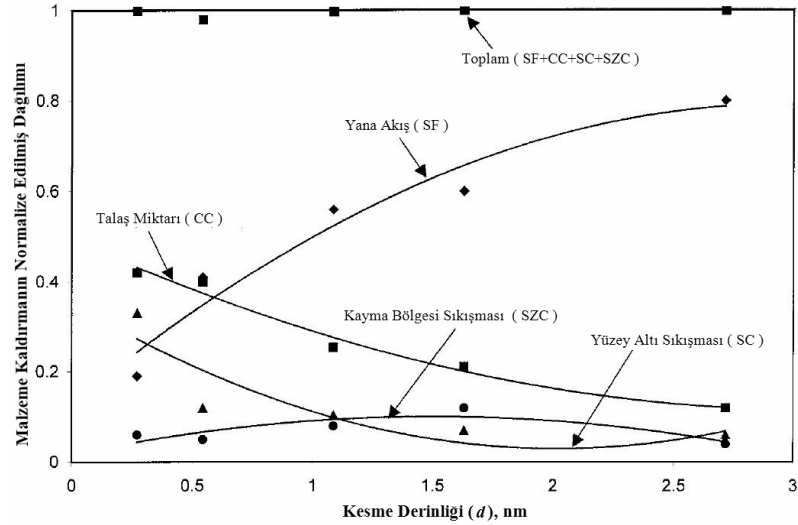
Şekil 3.82 Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının w_c/d_c oranına bağlı dağılımları [37]

Bu çalışmada ayrıca kesici takım talaş açısının etkileri de araştırılmıştır. Sonuç olarak, negatif talaş açıları arttıkça, kesici takım altında oluşan deformasyon uzunluğu da artmaktadır. Bu konuda Şekil 3.83’de takım talaş açısı ile yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının değişimleri verilmiştir [37].

Kesme derinliđi arttıkça, yüzey altı deformasyonları artmaktadır. Kesme ve itme kuvvetleri kesme kuvveti arttıkça artmaktadır. Buna karşın özgül enerji, kesme derinliđi azaldıkça artmaktadır [37].



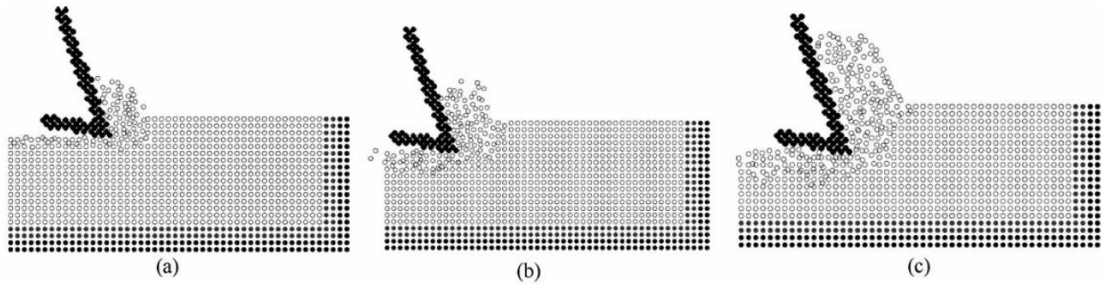
Şekil 3.83 Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının talaş açısına bağlı değişimleri (kesme genişliđi: 3,26 nm ; kesme derinliđi: 1,1 nm) [37]



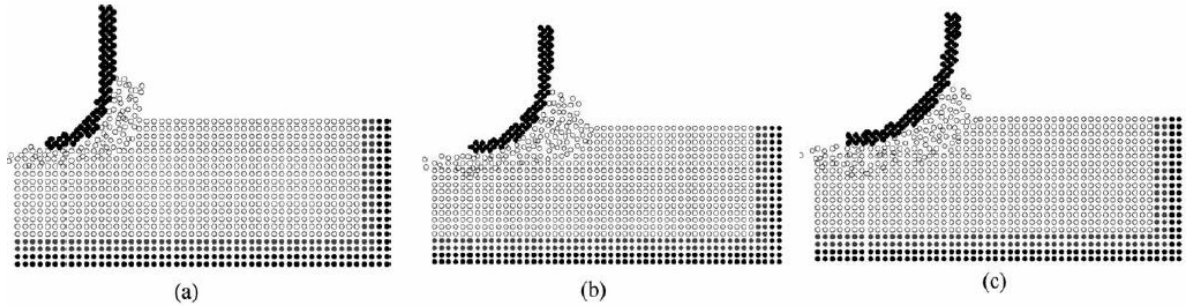
Şekil 3.84 Yana akış, talaş miktarı, yüzey altı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının kesme derinliğine bağlı değişimleri (Takım talaş açısı: -30° kesme genişliđi: 1,1 nm) [37]

Han v.d. yaptığı modellemede, takım geometrisinin nanometrik kesmeye etkileri gözlenmiştir. Han'a göre, kesme işlemi ilerledikçe, verilen kesme şartlarında, farklı kristal yönleri ve dislokasyon hareketleri için engeller boyunca ilave dislokasyonlar oluşması sebebiyle, dislokasyon yoğunluğu giderek artmaktadır. Ayrıca, kesme derinliğinin artması ile kuvvetlerdeki

artış nedeniyle dislokasyon yoğunluğunun arttığı ve bunun da kristal deformasyonunu ve kimyasal bağ kırılmasını oluşturabildiği görülmüştür. Şekil 3.85 ve Şekil 3.86’da değişik kesme derinliklerinde ve farklı kesici takım yarıçaplarında gerçekleştirilen nanometrik talaş kaldırmanın moleküler dinamik simülasyonları gösterilmektedir. Bunun sonucunda kesme derinliği arttıkça plastik deformasyonun boyutu artmakta ve buna bağlı olarak yüzey deformasyonları büyümektedir. Dislokasyon oluşumları genellikle yüksek kesme derinliklerinde meydana gelmektedir. Kesici takım uç yarıçapının artmasıyla yüzey deformasyonları artmakta ve talaş üretimi azalmaktadır [21].

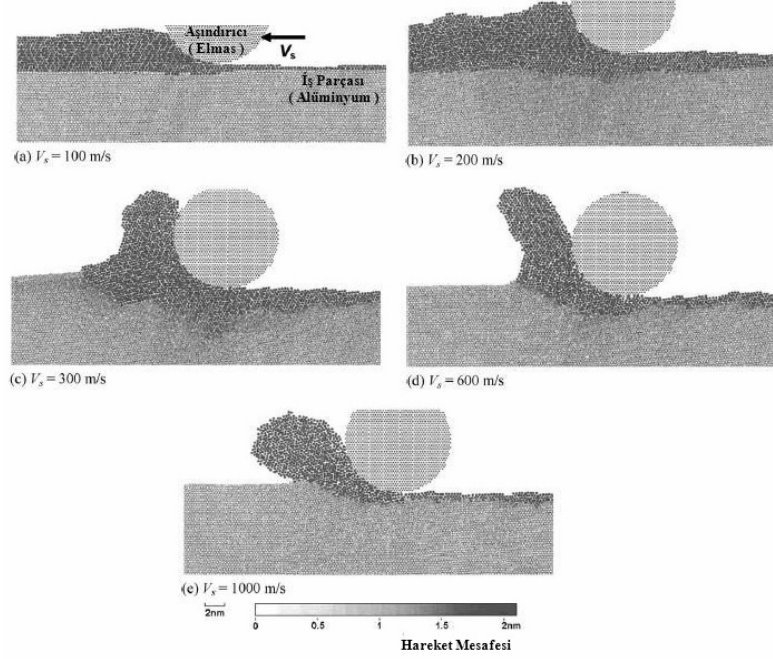


Şekil 3.85 (a) 0,4 *nm* ; (b) 0,6 *nm* ; (c) 0,9 *nm* gibi farklı kesme derinliklerinde gerçekleştirilen nanometrik kesmenin moleküler dinamik simülasyonu. Talaş açısı: 20°, Boşluk açısı: 10° [21]



Şekil 3.86 (a) 1,5 *nm* ; (b) 2 *nm* ; (c) 2,67 *nm* uç yarıçaplı takımlar kullanılarak 0,6 *nm* kesme derinliğinde gerçekleştirilen nanometrik kesmenin moleküler dinamik simülasyonu [21]

Shimizu v.d. yaptıkları çalışmada, alüminyum malzemenin deformasyonu ve talaş oluşum prosesi ile taşlama kuvveti ve temas mesafesi konularında modellemeler yapmışlardır. Shimizu’ya göre, taşlama hızı arttıkça taşlama kuvvetleri oranı artmaktadır, belli bir değerden sonra ise artış hızı sabitleşmektedir. Görülmektedir ki, derinlik yönündeki temas mekanizması plastisiteden elastisiteye dönmektedir. Şekil 3.87’de Shimizu v.d. yaptıkları çalışmada, değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları görülmektedir.



Şekil 3.87 Değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları [54]

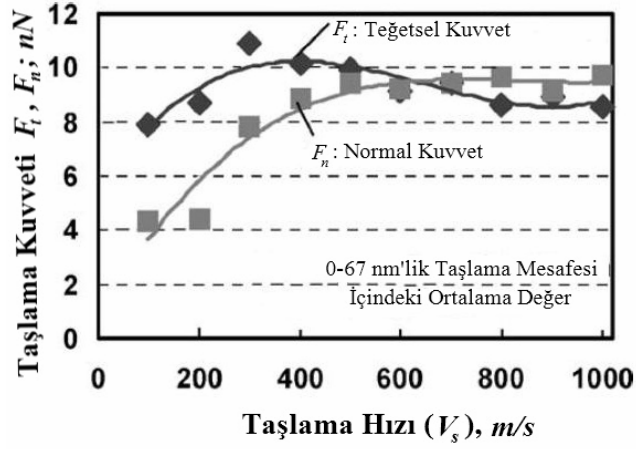
Şekil 3.87(a)'da görüldüğü üzere, çoğu atom aşındırıcının önünde toplanmakta ve abrazyon tozu olarak isimlendirilen yığın oluşturmaktadır. Bu, yatay ve eğri kayan yüzeyler üzerinde oluşan ve birkaç atomdan meydana gelen abrazyon tozu, aşındırıcı tanenin önünde birikmektedir. Abrazyon tozu, birinci katmandan altıncı veya yedinci kadar olan atomlar tarafından oluşturulmaktadır. Bu nedenle, genellikle plastik akış, aşındırıcının önünden oldukça uzağa kadar yayılmaktadır. Bu taşlamadan sonraki yüzey bitirme işleminde çapak oluşumuna veya yana akış olayının meydana gelmesine neden olabilir.

Taşlama hızının plastik dalga oluşum hızından biraz daha düşük olduğu Şekil 3.87(b)'de, abrazyon tozu yüksekliği Şekil 3.87(a)'dakine nazaran daha yüksektir. Bu abrazyon tozu ilk katmandan dokuzuncu veya onuncu katmana kadar olan atomlardan meydana gelmektedir.

Taşlama hızının hemen hemen plastik dalganın statik yayılma hızına eşit olduğu Şekil 3.87(c)'de, talaş oluşumu Şekil 3.87(a) ve (b)'ye göre farklı ve aşındırıcının önünde oluşan plastik deformasyon Şekil 3.87(a) ve (b)'ye nazaran daha küçüktür. Birinci katmandan altıncı veya yedinci katmana kadar olan atomlar talaşı oluşturmaktadırlar.

Taşlama hızının plastik dalga statik yayılım hızından büyük olduğu Şekil 3.87(d)'de talaş oluşumu açıkça gözlemlenmektedir. Birinci katmandan beşinci katmana kadar olan atomlar bu talaşı oluşturmaktadırlar. Aşındırıcı önünde meydana gelen plastik deformasyon net bir şekilde görülmektedir.

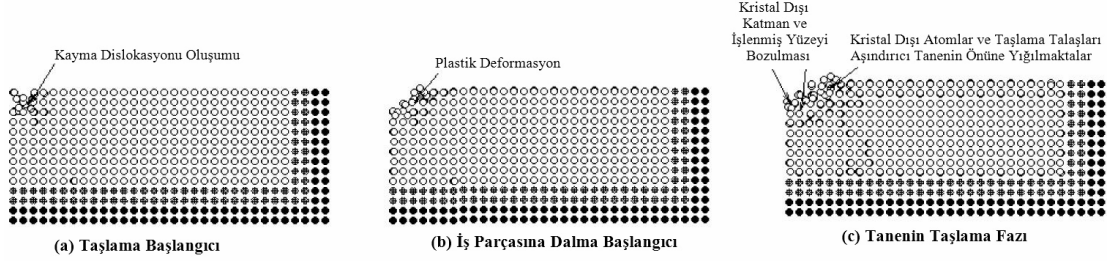
Taşlama hızının plastik dalga statik yayılım hızından oldukça büyük olduğu Şekil 3.87(e)'de talaşı oluşturan atomlar kristalliklerini kaybetmekte ve plastik deformasyona nazaran erime oluşumu görülmektedir.



Şekil 3.88 Taşlama kuvveti ve taşlama hızı arasındaki ilişki [54]

Şekil 3.88'de 0–67 nm'lik taşlama mesafesindeki ortalama taşlama kuvveti ile taşlama hızı arasındaki ilişki gösterilmektedir. Bu şekilden de görülebileceği üzere 300 m/s'ye kadar kuvvet değerleri yükselirken, bu değerden sonra düşüş göstermektedirler. Bunun en önemli sebebi, temas yüksekliğinin 300 m/s'den sonra düşmesidir [54].

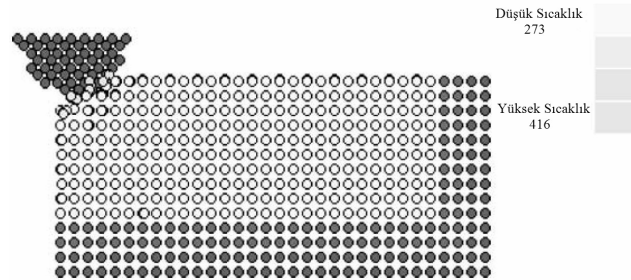
Lin v.d yaptıkları çalışmada, sürekli çizgisel mekaniğinden farklı olan moleküler dinamik simülasyonu kullanarak taşlama enerjisi dağılımına, taşlama gerilimine, gerinim durumuna ve atomik boşluktaki taşlama sıcaklığına göz atmış ve nano ölçekte taşlama modellenmiş, aşındırıcı tanenin etki bölgesinin yakınlarındaki mikroskobik bölgedeki talaş kaldırma ve yüzey oluşumu incelenmiştir



Şekil 3.89 Tanenin taşlama anındaki malzeme yapısındaki oluşumlar [44]

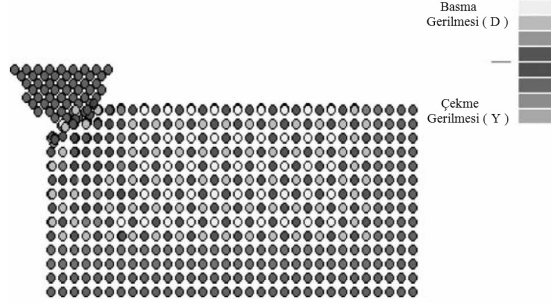
Şekil 3.89, abrazif tanenin taşlama işlemi esnasında farklı sürelerdeki malzeme yapısındaki oluşumları göstermektedir. Görülmektedir ki, abrazif tane ilerledikçe, abrazif tanenin önünde atomların kaymasından oluşan dislokasyon hareketleri söz konusudur (Şekil 3.89(a)). Daha sonra bu dislokasyonlar yığılmakta ve kristal kafeste plastik deformasyon olarak şekil almaktadır (Şekil 3.89(b) ve (c)).

Lin v.d. göre, kristal kafesteki atomlar yeniden yerleşmekte ve kristal dışı atomlar abrazif tanenin önüne doğru yığılmaktadır. Aşındırıcı tane hareketine devam ettikçe, malzeme kalkmakta ve taşlama talaşı oluşmaktadır. Eş zamanlı olarak, sıkıştırma gerilimi altında, abrazif tanenin önündeki kristal-dışı atomlar ve işlenmiş yüzeyin atomik kırılma bağı birleşmekte ve dıştaki kristal-dışı katman ve içteki kafes deformasyon katmanından oluşan işlenmiş yüzeyin deformasyon katmanını oluşturmak için yeniden oluşmaktadır. Lin v.d. göre, dislokasyon oluşumu sırasında atomların kinetik enerjileri artmakta, dolayısıyla atomik kristal kafesin ısı titreşimi artmakta ve malzemenin plastik deformasyonu kolaylaşmaktadır.

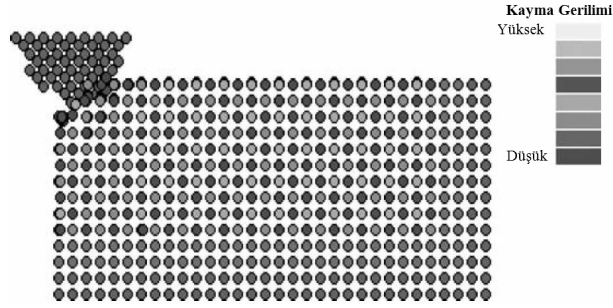


Şekil 3.90 Taşlama sıcaklığının resmi [44]

Abrazif tane ile gerçekleştirilen taşlama işleminde ki sıcaklık değişimi, çentik yapma işlemi anında oluşan sıcaklık değişimine nazaran oldukça büyüktür. Şekil 3.90'da görüldüğü üzere, deformasyon bölgesindeki sıcaklık ortalaması 440 K civarındadır.



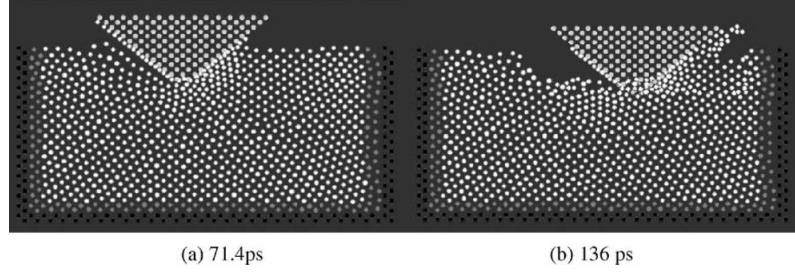
Şekil 3.91 Taşlama işlemindeki bası gerilmesinin durumu [44]



Şekil 3.92 Taşlama işlemindeki kayma gerilimi durumu [44]

Taşlama işlemi esnasındaki normal kuvvet ve teğet kuvvet hareketleri için taşlama bası gerilmesi ilk olarak Şekil 3.91 ve Şekil 3.92’de görüldüğü üzere abrazif tanenin önünde ve altında rahatsız edici etki yapmaktadır [44].

Cheng v.d. yaptığı çalışmada, geliştirilen yeni bir modelleme tekniğiyle, talaş kaldırma ısısının etkilerini simülasyona dahil ederek, nano ölçekte talaş kaldırmada takım aşınmasını ve kesme sıcaklığının iş parçası özellikleri üzerindeki etkisini incelemişlerdir. Bilindiği üzere takım aşınması, işlenmiş yüzey kalitesi için oldukça önemli bir faktördür. Bu simülasyonda, AFM elmas uçlu kesici takım kullanılarak tek kristalli silisyumun nano ölçekte işlenmesi üzerinde durulmuştur. Buradaki aşınma mekanizması sıcaklık hesaplaması, elmas kesici uçtaki gerilim ve elmas atomları ile silisyum atomlarının süblimleşme enerjisi ile sıcaklık arasındaki benzerliğin analiz edilmesi ile araştırılmaktadır. Yapılan moleküler dinamik simülasyonun (a) 71,4 *ps* ve (b) 136 *ps* olmak üzere iki farklı zaman adımıdaki resmi Şekil 3.93’de görülmektedir.

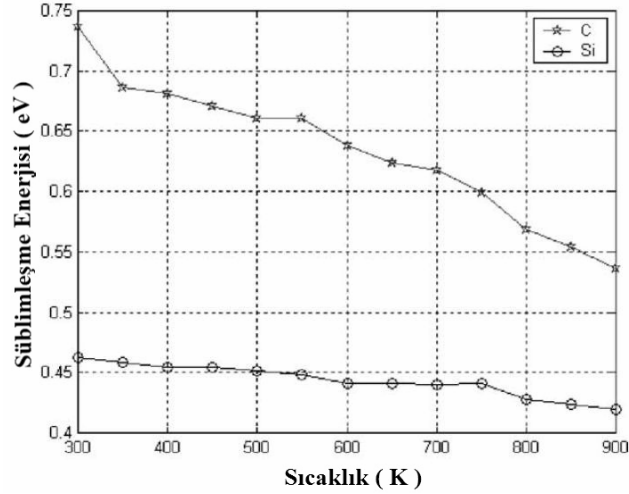


Şekil 3.93 Takım aşınmasının moleküler dinamik simülasyonu [12]

71,4 *ps*'de iş parçası malzemesinin kristal kafesi dengesiz bir hal almaya başladı ve gerilim enerjisinin serbest kalması nedeniyle iş parçası içindeki elmas kesici ucun her kenarında mikro dislokasyon başlangıcı görülmüştür. 136 *ps*'de ise birkaç iş parçası atomları talaş oluşturmak üzere ilerlemektedir. Bu ilerleyen atomlar, süreksiz bir atom kümesini oluşturmaktadır. İş parçası atomları ile kesici takım atomları arasında bağımsız difüzyon vardır. Birkaç kesici takım atomu talaş yüzünden ve elmas ucun kesici kenarından ayrıлып talaş ile birlikte hareket etmektedir. Bunun anlamı, takım kesici kenarından aşınmaya başlamıştır. Bu çalışmada, ortalama teğet kuvvetin ortalama normal kuvvete oranı 0,54'tür. Bu da iş parçası atomları ile elmas takım atomları arasında oldukça sert sürtünmelerin oluştuğunun göstergesidir.

Sürtünme ve deforme olmuş kristal kafesten serbest kalan gerilim enerjisi iç kısımdaki kesim sıcaklığının değişmesine neden olur. Kesim sıcaklığı, bir kısmının talaş ile uzaklaştırılmış olmasına rağmen kesici kenar üzerinde gene biraz sıcaklık artışı söz konusudur. Şekil 3.94'de C ve Si atomlarının süblimleşme enerjilerinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Ancak C atomlarının süblimleşme enerjisindeki değişim, Si atomlarının süblimleşme enerjilerindeki değişime kıyasla daha hızlı gerçekleşmektedir. Süblimleşme enerjisinin sert bir biçimde azalması ve çalışma atomlarındaki difüzyon C-C atomları arasındaki bağın zayıflamasına ve kolay kopmasına sebep olur.

Sonuç olarak, Cheng v.d göre, sıcaklık arttıkça takım malzemesini oluşturan atomlar arasındaki bağlar zayıflayacağından, takım aşınması sıcaklığa bağlıdır. Takım aşınmasının temel mekanizması termo-kimyasal aşınmadır [12].

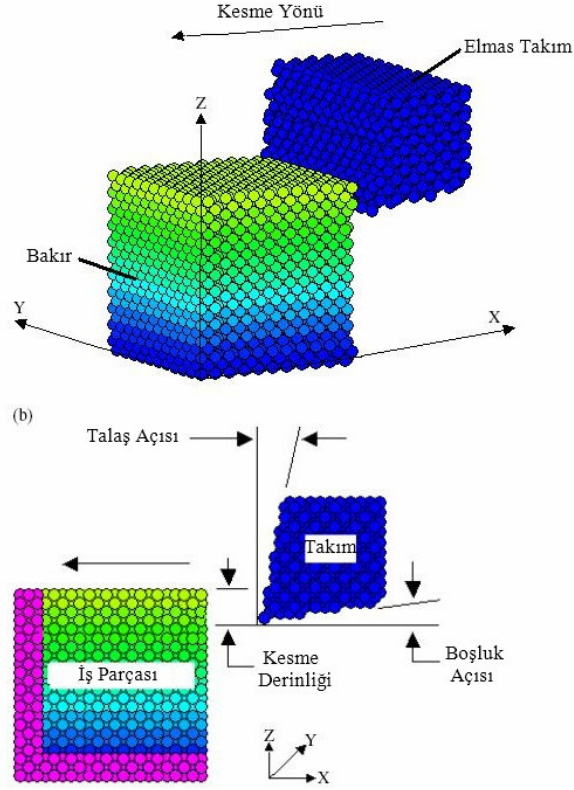


Şekil 3.94 C ve Si atomlarının süblimleşme enerjilerinin sıcaklıkla değişimi [12]

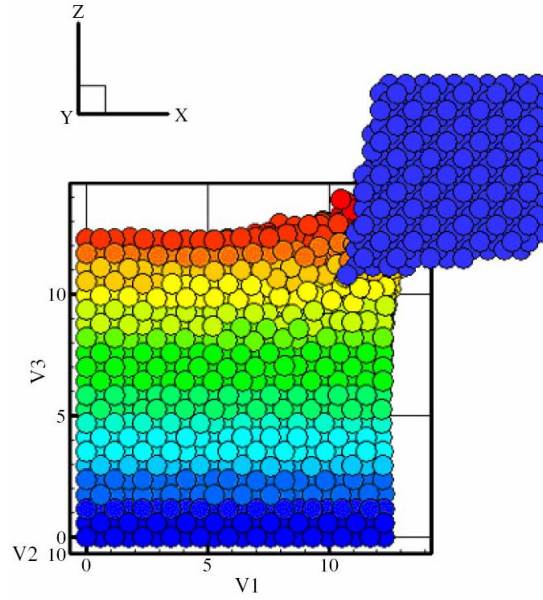
Lin v.d., nano ölçekte tek kristal bakırın talaşlı işlenmesinde talaş oluşumunu ve gerilme gerinme dağılımını anlamak için sonlu elemanlar metodu (SEM) ve moleküler dinamik (MD) tekniği ile birleştirmeyi esas alan bir metot önermişlerdir. Şekil 3.95’de kullandıkları simülasyon modeli görülmektedir ve bu şekilde moleküler dinamik simülasyondaki iş parçası, hareket bölgesi ve sabit sınır bölgesi olmak üzere ikiye bölünmüştür.

Bu çalışmada, nano ölçekte ortogonal kesme işlemi moleküler dinamik simülasyon kullanılarak gerçekleştirilmiştir. İlk olarak mükemmel bir yüzey merkezli kübik (FCC) yapıya sahip olan bakır iş parçası kullanılmıştır. Bakır atomlarının ilk hızı Gaussian dağılım fonksiyonu ile hazırlanmış ve sistem sıcaklığı da ($T = 293 K$) bu dağılım değeri ile karşılaştırılmıştır. Kullanılan elmas kesici takım rijit ve x yönü doğrultusunda hareket ederek bakırın kesme işlemi gerçekleştirilmiştir. Bu simülasyon işleminin 1000. adımına kadar olan sonuçları Şekil 3.96’da görülmektedir.

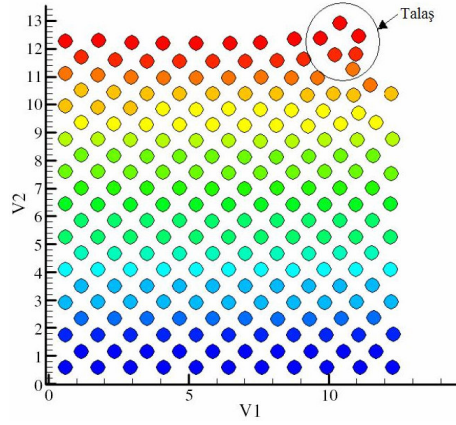
Şekil 3.96’da, takımın ön parçası (kısmı) ile basılan ve deforme olan bakır atomları ve oluşan talaş açıkça görülmektedir. Bu çalışmada yüzey gerilim durumundan çok, iş parçasının merkez kesitinde bulunan atomların pozisyonları gerilim ve gerinim eşitlikleri kullanılarak Şekil 3.97’de gösterilmiştir.



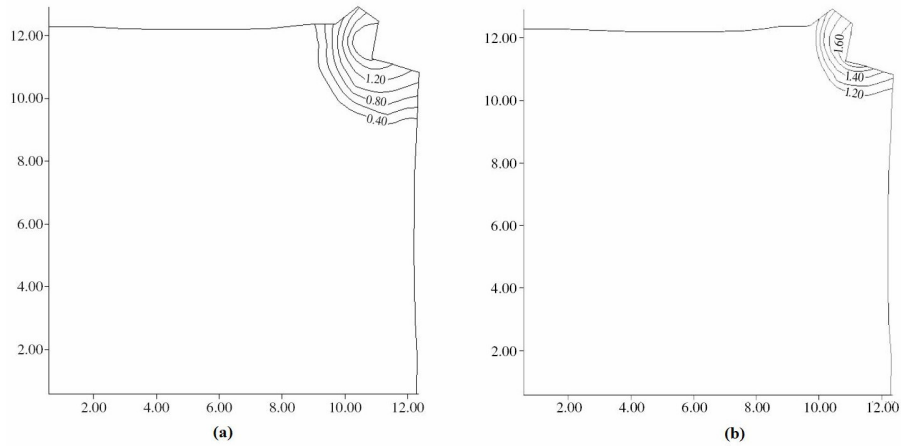
Şekil 3.95 Nano ölçekte talaş kaldırma işlemi için kullanılan tek kristalli bakırın moleküler dinamik simülasyon modelinin şeması [45]



Şekil 3.96 Nano ölçekte talaş kaldırmanın simülasyonunun 1000. zaman adımının yandan görünüşü [45]



Şekil 3.97 1000. zaman adımında bakır iş parçası merkez kesitindeki atomların konumları [45]

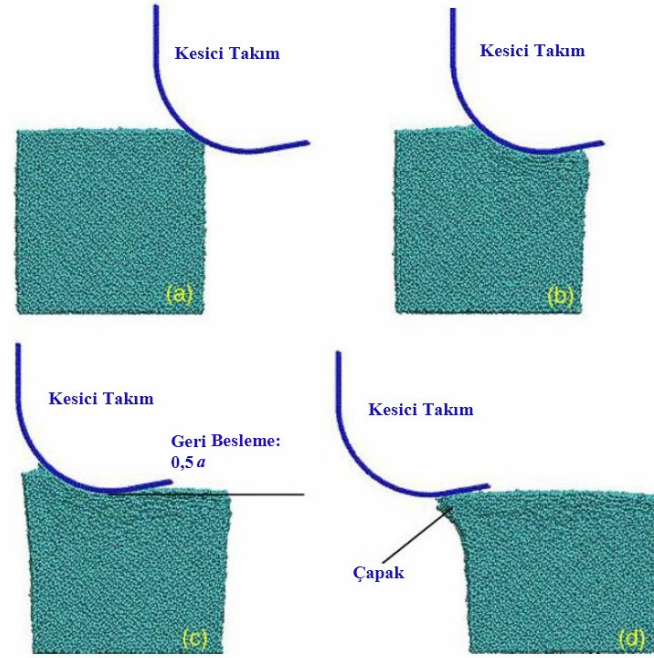


Şekil 3.98 1000. zaman adımında bakır iş parçası merkez kesitindeki (a) gerinim, (b) gerilim eşitlikleri [45]

FEM/MD simülasyon modeli kullanılarak iş parçası merkez kesitindeki atomların 1000. zaman adımındaki yer değiştirmelerinden yararlanarak hesaplanan gerilim gerinim eşitlikleri Şekil 3.98'de gösterilmektedir. Şekil 3.98'den de görüldüğü üzere kesici takım ucunun üstünden çok az mesafe uzaklıktaki talaş yüzünde en yüksek gerilim eşitliği oluşur. Bu en yüksek gerilim eşitliği değeri 1,8 civarındadır.

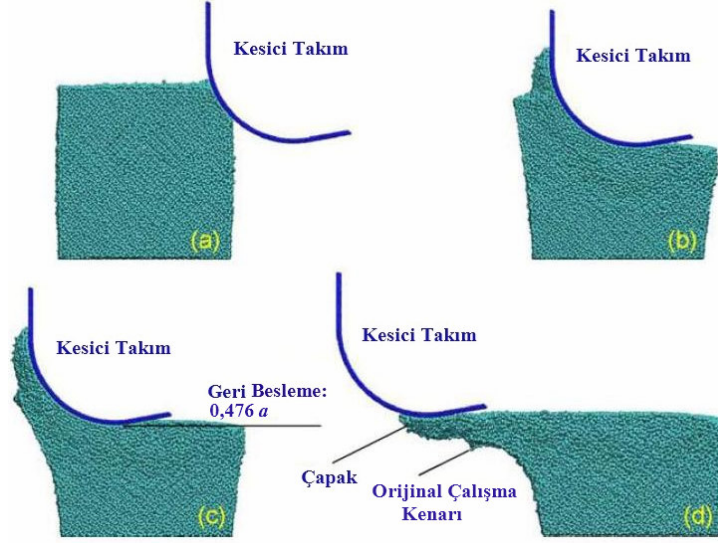
Bu çalışma sonucunda temel olarak, şekil fonksiyonu üzerinde görüşlerin FEM ve MD simülasyon modellerini birlikte kullanarak çok güzel sonuçların elde edilebileceği kanısına varılmıştır [45].

Fang ve arkadaşları ekstrüzyon esaslı metal kaldırmayı temel alan bir model oluşturmuşlar ve deneysel olarak kanıtlamak için çalışmışlardır. Burada, nano ölçekte talaş kaldırma esnasında iş parçası yüzeyinden kaldırılan malzeme davranışı incelenmiştir. Bu yöntemde, Tersoff potansiyeli kullanılarak tek kristalli silisyum malzeme nano ölçekte işlenmiştir. Şekil 3.99'da deforme olmamış talaş kalınlığının kesici kenar yarıçapına oranının 0,2 olduğu yerde ve deforme olmamış talaş kalınlığının 1 nm olduğu zamandaki moleküler dinamik simülasyonun resimleri görülmektedir.



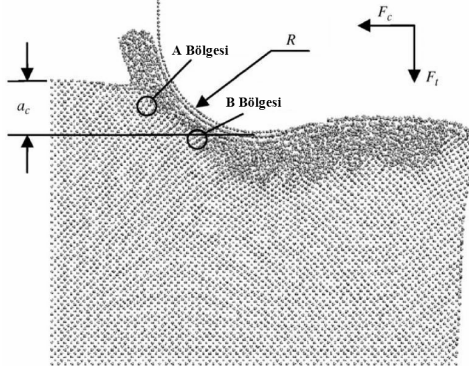
Şekil 3.99 Başlangıç anından (a), çıkış-çapak oluşumuna kadar olan tüm kesim işleminin moleküler dinamik simülasyonu, deforme olmamış talaş kalınlığı 1 nm [18]

Şekil 3.99'dan da görüldüğü üzere, 1 nm 'nin altında deforme olmamış talaş kalınlığı söz konusu ise bu durumda talaş oluşumu görülmemektedir. İş parçası, kesici kenarın en alçak noktasını geçtiği zaman, elastik bozulma $0,238 \text{ nm}$ civarında geri besler. Deforme olmamış talaş kalınlığının kesici kenar yarıçapına oranının $0,6$ olduğu yerde, deforme olmamış talaş kalınlığı 3 nm 'yi geçerse, iş parçası malzemesi Şekil 3.100'de görüldüğü gibi akar. Bu şekilde ekstrüzyon nedeniyle oluşan talaş görülmektedir. Elastik bozulma kalıcı bir geri besleme yaparken, kalıcı bir plastik deformasyon oluşur.



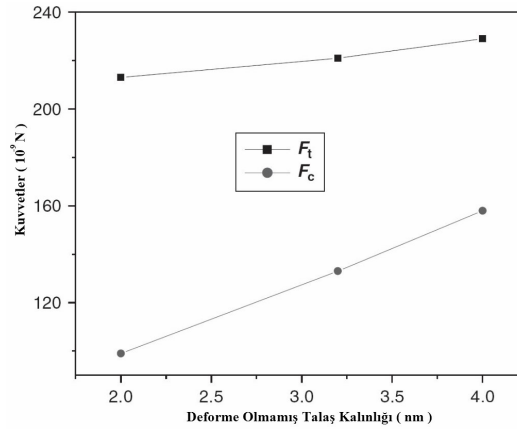
Şekil 3.100 Başlangıç anından (a), çıkış-çapak oluşumuna kadar olan tüm kesim işleminin moleküler dinamik simülasyonu, deforme olmamış talaş kalınlığı 3 nm [18]

Gevrek malzemelerin işlenmesinde iki temel kural yerine getirildiğinde gevrek-sünek geçiş bölgesinin oluştuğu bilinmektedir. Bu şartlardan bir tanesi, deforme olmamış talaş kalınlığı takım uç yarıçapından küçük olmalı; bir diğeri ise, takım kesici kenar yarıçapı nano ölçekte işleme için yeterince küçük olmalıdır. Bu iki kural, aynı zamanda sünek moda nano ölçekte talaş kaldırma için de gerekli olan şartlardır. M.B. Cai v.d. bu çalışmada, tek kristalli silisyum ince tabakasının nano ölçekte sünek modda talaş kaldırılması moleküler dinamik metodunu kullanarak modellemiş ve simüle etmişlerdir. Yapılan çalışma sonucunda, sünek modda kesme işlemi başarıldığında, kesici takıma etkiyen itme kuvveti, kesme kuvvetinden daha büyüktür. Deforme olmamış talaş kalınlığı arttıkça, kesme bölgesi içindeki bası gerilmesi azalır ve talaş oluşum bölgesinde çatlak oluşumuna yol açabilir. Takım kesici kenar yarıçapı arttığında, iş parçası içinde kesici kenar etrafındaki makaslama (kayma) gerilimi azalır ve çatlak oluşumu baskınlaşır, bu da talaş oluşum modunda süneklikten gevrekliğe geçişi meydana getirir. Burada M.B. Cai v.d., iki aşamalı çalışma yapmışlardır. Birincisinde, takım kesici kenar yarıçapı $4,0 \text{ nm}$ 'de sabit tutulup, deforme olmamış talaş kalınlığı $2,0 \text{ nm}$; $3,2 \text{ nm}$ ve $4,0 \text{ nm}$ alındı. İkincisinde ise farklı kesici takım kenar yarıçapları ($2,5 \text{ nm}$; $4,0 \text{ nm}$ ve $6,0 \text{ nm}$) kullanılarak, deforme olmamış talaş kalınlığının kesici kenar yarıçapına oranı $0,8$ 'e sabitlenerek test gerçekleştirilmiştir. Buna göre deforme olmamış talaş kalınlığı sırasıyla 2 nm ; $3,2 \text{ nm}$ ve $4,8 \text{ nm}$ alınmıştır.



Şekil 3.101 Kesici takım üzerine etkiyen kuvvetler ve talaş oluşum bölgesi içindeki gerilim alanları [43]

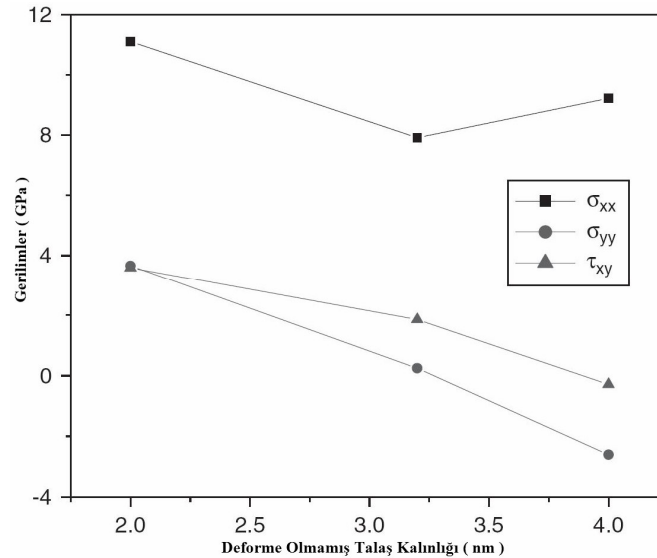
Şekil 3.101'den de görüldüğü üzere, kesici takım üzerine etkiyen kuvvetlerden, kesme yönünde olan kesme kuvveti (F_c), kesme yönüne dik olan ise itme kuvveti (F_t) olarak isimlendirilir. R , kesici takım kenar yarıçapı ve a_c ise deforme olmamış talaş kalınlığını ifade etmektedir. Şekil 102'de ise aynı kesici kenar yarıçapına ($4,0 \text{ nm}$) sahip takım ile gerçekleştirilen işlemden farklı deforme olmamış talaş kalınlıklarında kesme ve itme kuvvetlerinde meydana gelen değişimler gösterilmiştir. Şekilden de görüldüğü üzere, kesme kuvvetinin daima itme kuvvetinden büyük olduğu konvansiyonel talaş kaldırma işleminden farklı olarak nano ölçekte talaş kaldırmada itme kuvveti kesme kuvvetinden daha büyüktür. Aynı zamanda deforme olmamış talaş kalınlığı arttıkça, kesme ve itme kuvveti de artmaktadır ancak kesme kuvvetinin artış hızı daha fazla olmaktadır.



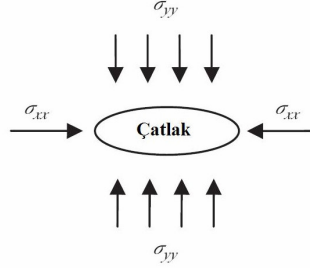
Şekil 3.102 Farklı deforme olmamış talaş kalınlıklarıyla yapılan kesme işleminde elde edilen kesme ve itme kuvveti değerleri [43]

Şekil 3.101’de görülen A bölgesi, iş parçası yüzeyine yakın ve aynı zamanda talaş oluşum modu ile ilişkili olan kritik gerilim bölgesi içinde olan, iş parçası üzerindeki özel bir bölgedir. Eğer bu bölge yüksek bası gerilmesi etkisi altında kalırsa, çatlak oluşumu gözlenir ve dislokasyon yayılımı etkin hale gelir. Aksine çekme gerilmesi söz konusu ise gevrek tipte talaş oluşumuna neden olan çatlak yayılımı etkin olur.

Şekil 3.103, farklı kesme derinliklerinde A bölgesindeki talaş içindeki normal gerilmeleri (σ_{xx}, σ_{yy}) ve makaslama (kayma, τ_{xy}) geriliminin değişimini göstermektedir. σ_{xx} ve σ_{yy} sırasıyla $-x$ ve $-y$ eksenlerindeki normal gerilmeleri, τ_{xy} ise x eksenindeki kayma gerilimini ifade etmektedir. Şekilden de görüldüğü üzere, farklı deforme olmamış talaş kalınlıkları altında σ_{xx} ’in değişim durumu tam olarak belli değilken, deforme olmamış talaş kalınlığı arttıkça σ_{yy} ve τ_{xy} azalmaktadır. Özellikle gerilim durumu basma gerilmesinden çekme gerilmesine doğru değişim göstermektedir (pozitif değerler basma gerilmesini, negatif değerler ise çekme gerilmesini ifade eder). Deforme olmamış talaş kalınlığı kesici kenar yarıçapına yakın veya daha büyük olduğunda, σ_{yy} , çekme gerilmesi haline dönüşür.



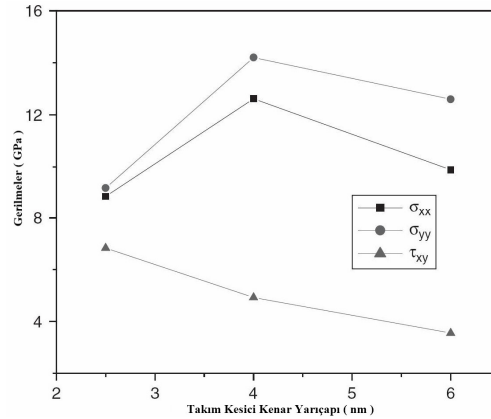
Şekil 3.103 Farklı kesme derinliklerinde kesme işlemi esnasında talaş içindeki A bölgesinde oluşan gerilmeler [43]



Şekil 3.104 Bası gerilmeleri etkisi altındaki çatlakın şematik gösterimi [43]

Şekil 3.104'de bası gerilmesi etkisi altındaki bir çatlakın resmi görülmektedir. Talaş oluşum bölgesinde, şekilden de görüldüğü üzere eğer σ_{yy} bası gerilmesi ise, çatlakın yayılması önlenir. Deforme olmamış talaş kalınlığı takım kesici kenar yarıçapına yakın veya daha büyük olduğunda A bölgesindeki σ_{yy} bası gerilmesinden çekme gerilmesine dönüşür, bundan dolayı talaş oluşum bölgesinde sünek moddan gevrek moda geçişe sebep olarak çatlak yayılımına neden olur. Bu durum ilk kuralı yani, deforme olmamış talaş kalınlığının takım kesici kenar yarıçapından küçük olması gerektiğini açıklar.

Şekil 3.101'de kesici takım kenarı altına yakın olan ve kayma gerilmesinin kritik değerden (malzeme akış gerilmesi) büyük olduğu, dolayısıyla dislokasyon yayılımının meydana geldiği talaş oluşum bölgesindeki bir diğer önemli bölge olan B bölgesi görülmektedir. Şekil 3.105'de talaş oluşum bölgesi içinde B alanından kesici kenar yarıçapının deforme olmamış talaş kalınlığına oranının sabit tutulduğu ve farklı kesici kenar yarıçaplarıyla gerçekleştirilen kesme işlemi sonrasında oluşan normal ve kayma gerilmeleri görülmektedir.



Şekil 3.105 Farklı yarıçaplardaki takımlarla yapılan kesme işlemi esnasında talaş içindeki B bölgesinde oluşan gerilmeler [43]

Farklı kesici kenar yarıçapına göre σ_{xx} ve σ_{yy} 'de meydana gelen değişim tam olarak belirgin değildir. Ancak kesici takım kenar yarıçapı arttıkça, kayma gerilimi net bir şekilde azalmaktadır. Ne olursa olsun kesici takım kenar yarıçapı, ne kadar artarsa artsın σ_{xx} ve σ_{yy} bası gerilmesi olarak görülür. τ_{xy} ise kesici takım yarıçapı arttıkça azalır ve belli bir noktadan sonra malzeme akış geriliminden daha küçük hale gelir. Bu nedenle, dislokasyon oluşumu meydana gelmez, çatlak yayılımı olabilir. Bu ikinci koşulu yani, nano ölçekte sünek modda işlemede takım yarıçapının yeteri kadar küçük olması gerektiğini açıklamaktadır.

Sonuç olarak, talaş oluşumu sünek modda olduğunda, kesici takıma etkiyen itme kuvveti kesme kuvvetinden daha büyüktür. Deforme olmamış talaş kalınlığı arttıkça kesim bölgesindeki bası gerilmesi azalır ve talaş oluşum bölgesindeki çatlak yayılımının azalmasına neden olur. Kesici takım kenar yarıçapı arttıkça, iş parçası içinde kesici kenar etrafında oluşan kayma gerilmesi, dislokasyon yayılımına ve çatlak yayılımına engel olacak seviyeye kadar düşer [43].

3.5.5.1 Nanometrik Taşlamanın Paralel Moleküler Dinamik Simülasyonu

Literatürde, nanometrik kesimin moleküler dinamik (MD) simülasyonu üzerine bildirilen çalışmaların çoğu, genişlik yönünde bir veya birkaç tabaka ile 2 boyutlu (2D) model (zorlanmış düzlem koşulları) kullanır. Böyle bir model gerçek koşulları temsil etmiyor olsa da, sadece hesapsal zamanı kısaltmak için kullanılır. 2 boyutlu (2D) dikey talaşlamada, düzlem zorlanma durumunu, iş parçasının genişliği, açıklanmış olanın ötesinde önemli derece arttırılmalıdır. Bu yapıldığında atomların sayısı artar, sonuç olarak sayısal zaman ve bellek kullanımı önemli ölçüde artar. Sayısal zamanı azaltmak için, çoğu zaman kesimin maksimum kullanışlı limitine kadar, kesim hızı önemli ölçüde (500 ms^{-1}) arttırılır, yani yaklaşık 10 ms^{-1} . İşlem zamanını kısaltmak için, iş parçası için daha az atom kullanılır. Böyle bir sınırlama çalışılabilecek tipte problemlere kısıtlamalar getirir. Veri yapılarının tanıtımı yapılmış olsa bile, çalışma zamanı ve bellek kullanımı, geleneksel yöntemlerin kullanımıyla kısaltılamaz.

Şimdiye kadar sayısal hızı geliştirmek için çeşitli yöntemler geliştirildi. İlgilenilen tekniklerin üçü; sözde muhasebecilik tekniği (Book-Keeping Technique); bağlı liste yöntemi (Linked-List Method) ve sınırlı alan moleküler dinamiği (Area-Restricted Molecular Dynamics) (ARMD)

veya sınırlanmış uzunluk moleküler dinamiğidir (Length-Restricted Molecular Dynamics-LRMD). Bağlı liste yönteminde olduğu kadar, muhasebecilik yönteminde de komşu atomlar yahut her bir atom için komşu kuvvet yaratılır. Kuvvet hesaplamaları için, komşu liste sadece; her bir atomun sıralanmış komşularıyla etkileşimini hesaplamaya yardımcı olur. Her birkaç adımda, atom konumları değişikçe, liste güncelleştirilmelidir. Isıdenetir atomlarının, hareketli atomların hemen yanında yer almasıyla, simülasyon alanının takım ucunun çevresinde sınırlı olduğu, ARMD; Maekawa ve Itoh tarafından tanıtıldı. Bu yöntemin dezavantajı, sınırlı simülasyon alanı, geleneksel yöntem ve ARMD sonuçlarının kıyaslanmasıyla belirlenmesindedir. Chandrasekaran, alan yerine simülasyon uzunluğunu sınırlamak için bir yöntem önerdi. Yine de iş parçasına yeni atomların eklendiği yöntem, hesaplama sonuçlarını etkiler ve bellek sonuçları saklamak için, talaşlanmış yüzeyin özelliklerinin analizini de gereksinir.

Bu çalışmada Chen v.d., hesaplama zamanını azaltmak için, uzaysal ayrışım yahut parçacık ayrışımına dayalı paralel moleküler dinamik yöntemini uygulamışlardır. Sonuç olarak, deneme testi yoluyla hesaplama zamanı önemli ölçüde azaltıldı. Üstelik nanometrik taşlama ile ilgili büyük ölçekli bir moleküler dinamik (MD) simülasyonu, oluşturulan paralel moleküler dinamik (MD) temelinde yürütüldü.

3.5.5.1.1 Moleküler Dinamik Simülasyonların Algoritması

(a) Nanometrik Taşlama Modeli:

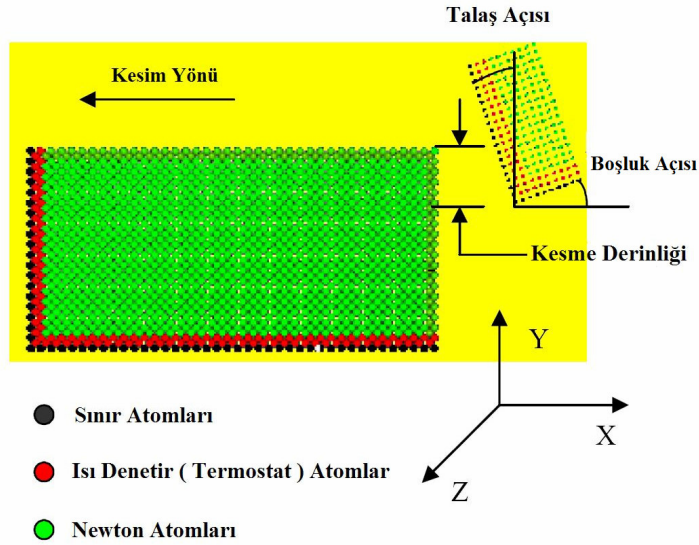
İş parçası ve takım malzemelerinin tek kristalli olduğu varsayımı ile Şekil 3.106'da gösterilen model temelinde, büyük ölçekli aşırı duyarlı (hassas) taşlama gerçekleştirildi. İş parçası boyutu, taşlama tane büyüklüğü ve taşlamanın büyüklüğü simülasyon deneylerinin uygulama gereksinimleri vasıtasıyla belirlenir. Basitlik sağlaması açısından, takım atomları rijit varsayıldı, örn: deformasyon yok. İş parçası üç farklı alana bölünür, yani, sınır alanı, termostat (ısı denetir) alanı ve Newton alanı. Newton alanındaki atomların hareketleri, sadece etkileşim geriliminden elde edilen kuvvetlerle belirlenir. Genelde, tecrübeyle bilinen bir denklem, Morse gerilim fonksiyonu ve EAM (Gömülü Atom Modeli) çoğunlukla metali açığa vurmak için kullanılır. Özellikle ikisi yüzey merkezli kübik (FCC) metalleri için hayli uygundur. Bu çalışmada,

hesaplama verimliliğini artırmak için, etkileşim biçimi olarak, Morse gerilimi seçilmiştir. i ve j atomları arasındaki gerilim $\phi(r_{ij})$, Denklem 3.151’de tanımlanır. Gerilimin türevi atomlar arasındaki etkileşim kuvveti ise, Denklem 3.152’de tanımlanır.

$$\phi(r_{ij}) = D \left\{ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right\} \quad (3.151)$$

$$F(r_{ij}) = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} = 2D\alpha \left\{ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right\} \quad (3.152)$$

r_{ij} ; i ve j atomları arasındaki uzaklık, $F(r_{ij})$; i ve j atomları arasındaki kuvvet, D, α, r_0 ve E ; deneysel materyal sabitlerini ifade etmektedir. Burada, tek kristalli bakır (Cu) iş parçası, elmas takım ve simülasyonun diğer parametreleri için, malzeme sabitleri Tablo 3.16’da gösterilmiştir.



Şekil 3.106 Nanometrik taşlamanın moleküler dinamik simülasyonu için kullanılan model [10]

İvme, i atomu için bileşke kuvvet ve dış kuvvetten, şu şekilde elde edilir:

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} \sum_{j \neq i} F(r_{ij}) + \frac{1}{m} F_{ext} \quad (3.153)$$

m ; i atomunun kütleini, F_{ext} ise dış kuvveti ifade etmektedir.

Tablo 3.16 Nanometrik kesimin parametreleri ve moleküler dinamik simülasyon koşulları [10]

Konfigürasyon	3 Boyutlu Kesim
Takım Malzemesi	Son derece sert
Takım Ölçüleri	$4 \times 10 \times 20$
İş Parçası	Bakır, kafes sabiti 3.62 \AA
İş Parçası Ölçüleri	$10 \times 40 \times 20$ (yüzey merkezli kübik)
Kullanılan Potansiyel (Gerilim)	Morse Gerilimi $D_k = 0.3429 \text{ eV}$
Morse Gerilimi Parametreleri	$a = 1.35588 \text{ \AA}^{-1}$ $r_0 = 2.6260 \text{ \AA}$ $r_{cut} = 6.0 \text{ \AA}$
Hacim (Bulk) Sıcaklığı	300 K
Kesim Hızı	200 m/s ve 20 m/s

Her bir atomun konumunu netleştirmek amacıyla, ivmeden yararlanarak, yer değiştirme ve hızın bulunması önemlidir. Sayısal integrallleme yöntemi için Verlet öngörücü-düzenleyici, Schofield algoritması mevcut; bu çalışmada, sayısal hataları minimuma indirmek amacıyla, Schofield entegrasyon yöntemi seçildi, yer değiştirme $r(t)$ ve hız $v(t)$ 3.154 ve 3.155 numaralı denklemlerde şu şekilde verilir:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{6}[4a_i(t) - a_i(t - \Delta t)](\Delta t)^2 \quad (3.154)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{1}{6}[2a_i(t + \Delta t) + 5a_i(t) - a_i(t - \Delta t)]\Delta t \quad (3.155)$$

Δt ; entegrasyon zamanı, $a_i(t)$; t anındaki ivmedir. Yukarıdaki denklemlerden; $t + \Delta t$ zamanında hız ve yer değiştirme belirlenebilir.

(b) Sınır Koşulu:

Sınırlı sayıda atomla; örneğin birkaç yüz ya da bin; nanometrik taşlamayı doğrulamak için, Şekil 3.106'da gösterilen sınır ve termostat (ısı denetir) atomları içinden seçilmeyen atomların etkilerini göz ardı etmek önemlidir. Genel olarak sınır atomlarının yer değişimi sabittir. Bu bölgeler, kenar etkilerini azaltmak ve örgünün uygun simetrisini sürdürmesi için hizmet eder. Termostat (ısı denetir) atomları için, Newton hareket denklemi çözümünden elde edilen hareket, termostat bölgesindeki her bir atomla ilgili, hız sıfırlama denkleminin hazır bulunuşuyla düzenlenir. Termostat bölgesinde atomların üzerinde çalışan hız sıfırlama fonksiyonu; genişletilmiş kafes model için geçerli olacak enerji transferi üzerindeki, toplu etkilerini tasvir etmek amaçlı hizmette bulunur. Bu çalışmada kullanılan hız sıfırlama fonksiyonu şu biçimdedir:

$$u_i(t + \Delta t) = av_i(t + \Delta t) \quad (3.156)$$

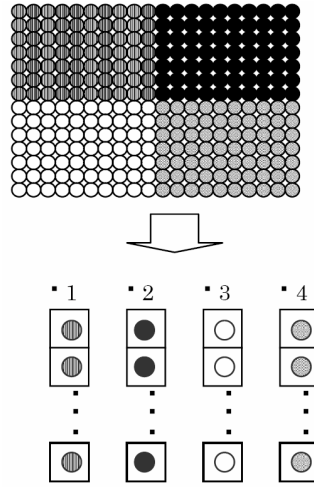
$$a = \sqrt{\frac{gNk_bT}{2} \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2}}} \quad (3.157)$$

u_i ; ölçeklendirilmiş hız, g ; bir atomun serbestlik derecesi, N ; atom sayısı, T sıcaklık, k_b ; Boltzmann sabiti.

3.5.5.1.2 Uzaysal (Parçacık) Ayrışma Dayalı Moleküler Dinamik (PMD)

Yukarıda tarif edildiği gibi, bu zamana kadar hesapsal hız başlıca; sözde muhasebecilik tekniği (Book Keeping Technique), bağlı liste (Linked-List) veya bölge kesim (Cut-off Area) yöntemleri ile geliştirilebilirdi. Ne var ki; moleküler dinamik (MD) simülasyonu için hesapsal zaman, hala çok fazla, öyle ki, araştırma alanındaki kullanım sınırlıdır. Elektronik aletlerin yüksek hızlı gelişimi, süper bilgisayarın çeşitli tipleri ve paralel işlem teknolojisi, geçen on yıllarda, yavaş yavaş olgunlaştı. Büyük ölçekli sorular için, hesaplama verimliliğini geliştirmek amacıyla; geliştirilmiş paralel işlem teknolojisinin kullanımı olası bir yöntem olur. Böylelikle çalışmada etkileşim hesabı; atomların konumunun güncellenmesi, v.b; Şekil 3.107'de gösterildiği gibi uzaysal ayrışım (SD) yahut Şekil 3.108'de gösterildiği gibi parçacık ayrışım (PD) temelinde çeşitli süreçlere uygulanmıştır. Başka bir deyişle, iş parçası bir örnek birkaç parçaya

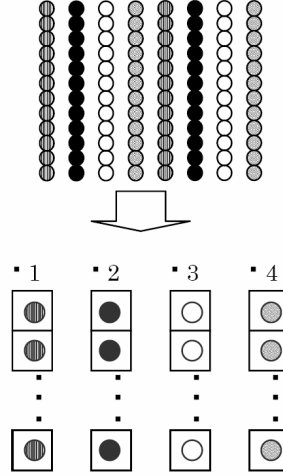
bölündü ve her bir parça, hesaplama için farklı işlemcilere dağıtıldı. Bir örnek olmayan veri dağılımı, takım ve iş parçası arasında etkileşim ortaya çıktıkça, uzaysal ayrışım için oluşabilir. Hareket ve atomların etkileşimini hesaplamak için; mesaj geçiş ara yüzüyle (Message Passing Interface-MPI) başka bir işlemcideki atomlar hakkındaki bilgilerle iletişim kurulmasına ihtiyaç hissedilir. Böyle bir durumda, işlemci sayısının artışıyla; programın ölçeklenirliğinin çok iyi olması için sadece komşu kısımlarla iletişim kurulmasına gereksinilir. Aksine, parçacık ayrışımı için, veri dağılımının tek düze olmayışından, sakınılabılır. Fakat bu, komşu atomların bilgisini edinebilmek için diğer tüm işlemcilerle iletişim için, uzaysal ayrışım için gerekli olandan daha çok zaman gerektirir.



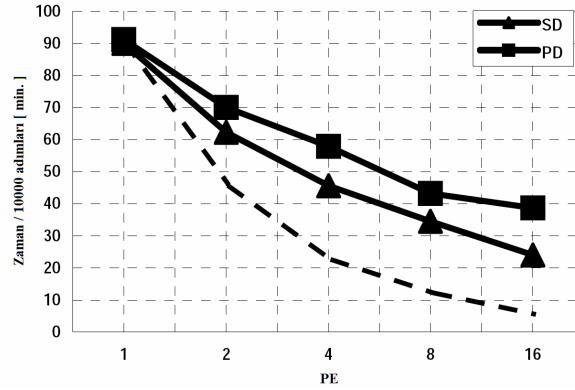
Şekil 3.107 Paralel Moleküler Dinamiğin Uzaysal Ayrışımı (SD) (4 işlemci için bir örnek) [10]

Uzaysal Ayrışım (SD) ve Parçacık Ayrışımı (PD) temelli, paralel moleküler dinamiğin (PMD) verimliliğini açıklanabilir hale getirebilmek için Visualization Supercomputer Onyx2'de değerlendirme gerçekleştirildi (v16CPU/9.6GFLOPS, 32GB, 4-IR2). Bir işlemci için hesaplamalar, geleneksel moleküler dinamikteki (MD) gibi ele alınabilir. Şekil 3.109'da gösterildiği gibi, 16 Pes'de uzaysal ayrışımın hesaplanan hızının 1 PE'dekinin 4 katı; parçacık ayrışımının hesaplanan hızının 1 PE'dekinin 2 katı geliştirildiği açıktır. Başka bir deyişle, uzaysal ayrışım (SD) olmasa da parçacık ayrışımı (PD) moleküler dinamiğin (MD) hesaplanan hızını geliştirdi; uzaysal ayrışım (SD), parçacık ayrışımından (PD) daha etkindir. Paralel moleküler dinamiğe (MD) dayalı, büyük ölçekli moleküler dinamik simülasyonu; sınırlanmış alan veya geleneksel moleküler dinamik simülasyonunun sınırlandırılmış uzunluğundan kaynaklanan kusurları uzakta tutabilir. Değerlendirmelerden, uzaysal ayrışımın (SD) büyük ölçekler için,

parçacık ayrışımının (PD) küçük ölçekli problemler için uygun olduğu görülür. Her iki algoritmanın temelinde de, en uygun moleküler dinamik (MD) yapısı geliştirildi.



Şekil 3.108 Paralel moleküler dinamiğin parçacık ayrışımı (PD) (4 işlemci) [10]



Şekil 3.109 Supercomputer Onyx2’de hesaplanan paralel moleküler dinamiğin (PMD) performansı [10]

3.5.5.1.3 Nanometrik Taşlama Simülasyonu

Bu çalışmada basitlik sağlaması açısından, takım olarak, sadece bir nanometrik taşlama tanesi alındı. Materyal olarak bakır (FCC) kullanıldı ve takımın tek kristalli elmas olduğu varsayıldı. Hesaplama zamanını kısaltmak adına, burada yalancı-üç (pseudo-three) simülasyonu olarak isimlendirilen simülasyonu yürütmek için sadece on katmanlı molekül kullanıldı. Ele alınacak takımın konfigürasyonu; eğim açısı ve boşluk açısından oluşmuş, keskin kenarı ile kusursuz bir takımdır. Simülasyonun hesaplama adımı, bir femtosecond (fs) olarak kurulur.

Nanometrik taşlama sürecini tanımlayan farklı değişkenler, aşağıdaki gibidir:

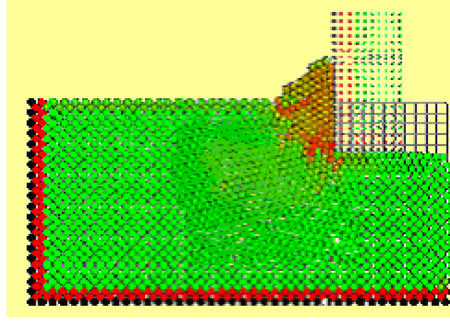
- (1) Kristal yüzeyin yönelimi ve kesim yönü,
- (2) Kesim hızı v_s ,
- (3) Kesme derinliği d_c ,
- (4) Takımın eğim α ve boşluk β açısı,
- (5) Alt tabakanın sıcaklığı T ,
- (6) Takımın sertliği, son derece katı veya biçim değiştirebilir olmalıdır.

Yüksek etkinlik amacıyla; çeşitli kuramsal deneyleri yürütmek adına, uzaysal ayrışımaya dayalı paralel moleküler dinamik kullanıldı. İlk olarak (001) bakırın nanometrik taşlamasını; kesim hızı, eğim açısı ve boşluk açısının fonksiyonu olarak simüle edilmiştir. Kesimin yönelimi $\langle 100 \rangle$ yönündeydi. Gerçek simülasyon için, kullanılan işlemciler 8'e ayarlanmıştır.

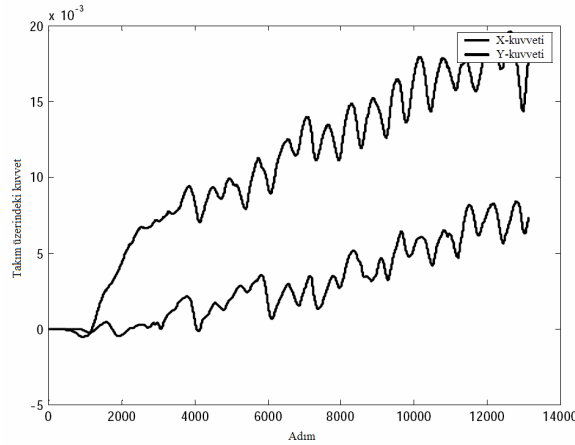
(a) Takım Üzerindeki Kuvvet:

Takımın iç katmanlarının toplamıyla; takım üzerindeki itme kuvveti (F_y), kayma kuvveti (F_x). Meyil açısı ve boşluk açısı birlikte 0° 'ye eşit olduğundan, nano taşlama; Şekil 3.110'de gösterildiği gibi, $v_s = 200ms^{-1}$ kesim hızıyla, $3.8nm$ uzaklığın üzerinde gerçekleştirildi. Talaş, takımın ilerisinde oluşturulmuş, takım boyunca izlenmiş ve yer değiştirme takımın ucunda gerçekleşmiştir. Özellikle, talaşlanmış yüzeyin özelliği, önemli derecede pürüzsüzdür. Bu durumda dik açılı bir takım, alt yüzeyin üretilen yer değiştirmesinin gevşemesini sağlamak için, sınır olarak bir yatay düzlem sağlar. Şekil 3.111'da gösterilen, kuvvetteki tesadüfi değişimler, KCR tarafından bulunan sonuçlarla oldukça benzerdir. Kesim süreciyle, kesme kuvveti artmıştır. Dereceli artışın sebebinin, talaş oluşumu için takım etrafında (alçak frekans süzgeciyle üstesinden gelinebilecek) biriken moleküllerden kaynaklandığı düşünülebilir. Dereceli artışın ötesinde, düzensiz bileşenler de kesme kuvvetinde içerilir. Kesme hızı $200ms^{-1}$ olduğunda takımın hareket ettiği uzaklık yaklaşık 100 piko saniyede (ps) 55 bakır kafestir. Alçak frekanslı bileşenlerdeki itme kuvvetinin ve kayma kuvvetinin FFT sonuçlarının filtre ile uzaklaştırılması Şekil 3.112'de gösterilir. Her 100 ps 'de 55 kafes çevresinde sadece bir

zirvenin olduğu açıktır. Mikro düzey bakış açısından, kesim süreci genellikle, esnek deformasyon, yer değişimi ve iş parçası kafesinin kaymasından oluşur. Bunun için, yer değişimi ve kafesin kaymasını engellemek için en geniş hacimli enerji gereksinilir. FFT'nin zirvesi ile takımın geçmiş asıl kafes sayısı, arasındaki uyuma da bu süreci gösterir.

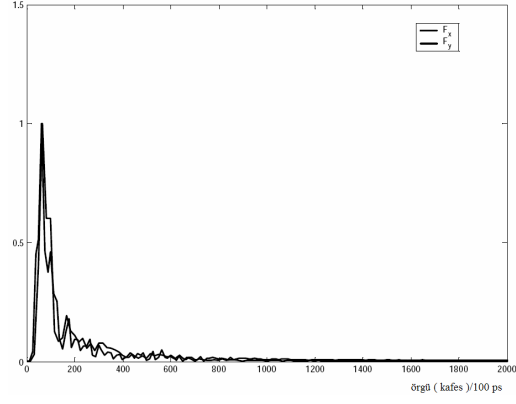


Şekil 3.110 Nanometrik taşlamanın simülasyon sonuçları. Meyil açısı ile boşluk açısının 0° , $200ms^{-1}$ kesim hızında ve $3.8nm$ uzaklığın üzerinde gerçekleştirilen işlemin konfigürasyonu görülmektedir [10]

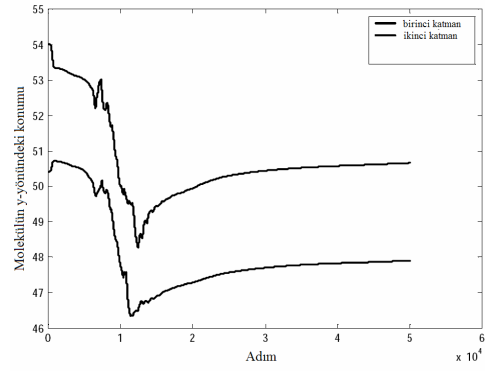


Şekil 3.111 $200ms^{-1}$ hızındaki itme kuvveti F_y ve kayma kuvveti F_x [10]

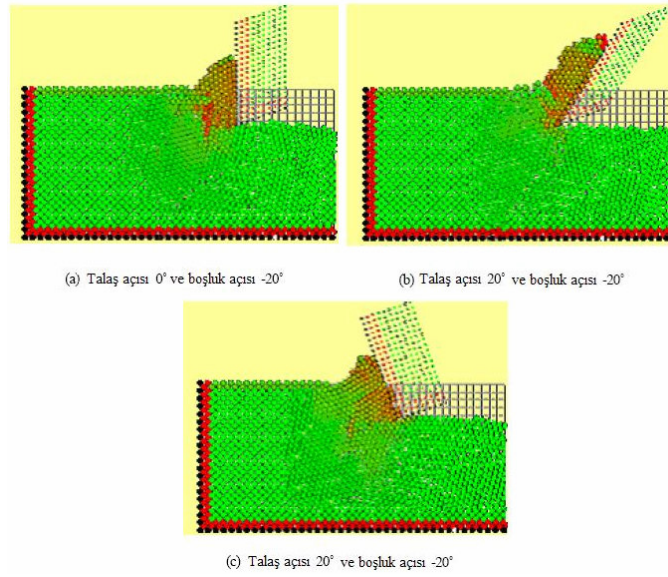
İş parçasının moleküllerinin birinci ve ikinci tabakada takımın altında kesim süresince taranması, Şekil 3.113'de resmedilir. Kesim süreciyle; takım üstlerinden geçerken, iki farklı dönem; sıkıştırma dönemi ve esnek toparlanma dönemi, ortaya çıkmıştır. Yani başlangıçta moleküller sıkıştırıldı ve sonra takım üstlerinden geçerken gevşetildi. Moleküller takıma yaklaştıkça, (takımın yakınında oldukça), daha da dikkat çeker şekilde sıkıştılar. Talaşlanmış yüzey için, uzun bir gevşeme sürecinden sonra, denge durumu tekrar kazanılmış olacaktır.



Şekil 3.112 Alçak frekanslı bileşenlerdeki itme kuvvetinin ve kayma kuvvetin FFT sonuçları [10]



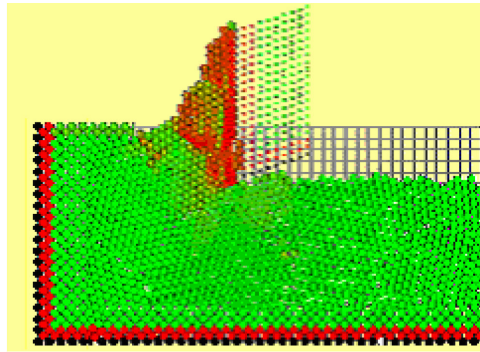
Şekil 3.113 İş parçasının moleküllerinin birinci ve ikinci tabakada takımın altında kesim süresince taranması [10]



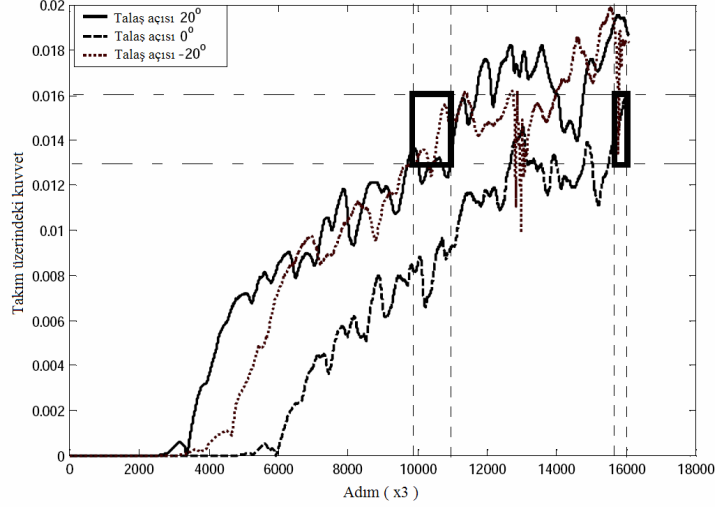
Şekil 3.114 33 ps sonraki $200ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları [10]

(b) Takım Aşınması:

Bu testler dizisinde, nanometrik taşlamanın moleküler dinamik (MD) simülasyonu; $v_s = 200ms^{-1}$ kesim hızıyla, (örn, 0° , 20° , ve -20°) değişen takım eğim açısıyla, tek kristalli bakırla yürütüldü. Kesme derinliği 1.82 nm 'de sabit tutuldu. Şekil 3.114(a)-(c), nanometrik taşlama işleminden sonraki, 33 ps , moleküler dinamik (MD) simülasyon çizimlerini gösterir. Bu, farklı meyil açılarıyla, moleküler dinamik (MD) simülasyon çizimlerinin, karşılaştırılması, bazı benzerlik ve farklılıklar gösterir. İş parçasına gelince; talaşın biçimi ve talaşlanmış yüzeyin özellikleri her bir durum arasında farklıdır. Özellikle, takımın durumuyla ilgili dikkate değer bir fark; 0° meyil açılı takımın hiçbir iş parçası molekülü, (a)'da gösterildiği gibi, takıma katılmazken; (b) - (c)'de gösterilen 20° ve -20° meyil açılı takımlarla aşınmanın olduğunu gösterir. Şekil 3.115 nanometrik taşlama sürecinden 48 ps sonraki moleküler dinamik (MD) simülasyon çizimini gösterir. Şekil 3.114(a) ve Şekil 3.115 arasındaki karşılaştırmada; yaklaşık 33 ps 'den sonra aşınma görülmesi de, 48 ps 'den sonra aşınmanın ortaya çıktığı, dikkate alınabilir. Daha fazla gözlemlerle, 0° meyil açısıyla takım aşınması, $48 \sim 49 \text{ ps}$ 'den başlarken; 20° ve -20° meyil açılarıyla; takımın aşınmasının yaklaşık $30 \sim 33 \text{ ps}$ 'den itibaren görüldüğü aşıkardır. Şekil 3.116, itme ve kayma kuvvetlerinin toplamı olan, takıma dikey olan bileşke kuvveti gösterir. Kesim işlemleriyle, genellikle her bir durumda talaş oluşur ve kesme kuvveti artar. Karşılaştırıldığında; $30 \sim 33 \text{ ps}$ 'de, 20° ve -20° meyil açıları için bileşke kuvvet; yaklaşık olarak $48 \sim 49 \text{ ps}$ 'de 0° meyil açısı için bileşke kuvvete denktir. Bu sebeple takıma dikey olan kesme kuvveti, takımın aşınmaya neden olan esas faktörlerden biridir.



Şekil 3.115 48 ps sonraki 0° talaş açısı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları [10]

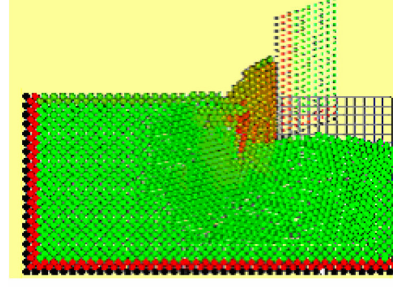


Şekil 3.116 Takıma dik bileşke kuvvet [10]

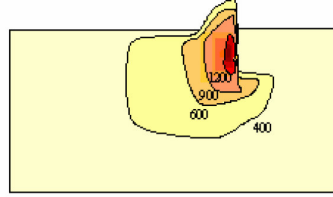
(c) Sıcaklık ve İşlenmiş Yüzey:

Şekil 3.117(a)-(b), yerel sıcaklığın; 33 ps'den sonra $200ms^{-1}$ kesim hızında, kurulumunu ve dağılımını gösterir. Takımın altındaki yerel kinetik enerjiler, 900 K eşit ve hatta talaşta daha yüksektir (1200 K). Sıcaklık yerel olarak bakırın (Cu) erime sıcaklığına yakınsadığından, güçlü atomik yeniden yapılanma oluşabilir. Şekil 3.118(a)-(b) 33 ps'den sonra $20ms^{-1}$ kesim hızında yerel sıcaklığın moleküler kurulum ve uzaysal dağılımını gösterir. Şekil 3.117 ile kıyaslandığında, talaşlamadan sonra daha küçük bir sıcaklık artışı (200 K) var. En yüksek sıcaklıkta ($v_s = 200ms^{-1}$) takımın arkasındaki talaşlanmış yüzey atomik olarak (çok küçük oranda) pürüzlü, fakat hız düştükçe pürüzsüzleşir. $v_s = 20ms^{-1}$ 'e indirgenmiş yüksek hızlarda ($200ms^{-1}$), doğrudan takımın ilerisinde, düzensizlik ve iş parçasının sıkışması söz konusudur. Yüksek hızlar için takımın önünde oldukça geniş bir talaş oluşturuldu, fakat bu; yer değiştiren atomların, düşük hızda daha fazla yeniden düzenlenme zamanına sahip olmasından dolayı; düşük hızlar ($20ms^{-1}$) için daha küçüktür.

Yüksek hızlar pürüzlü yüzeyle sonuçlanırken ($200ms^{-1}$); pürüzsüz bir yüzey oluşturmak için düşük hız ($20ms^{-1}$) gereklidir. Çok kristalli alt tabakalar kullanılırsa, düşük talaşlama hızında, yer değiştirme, daha az sorunlu olabilir.

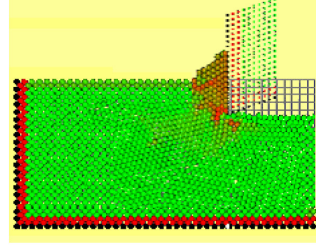


(a) Moleküler Konfigürasyon

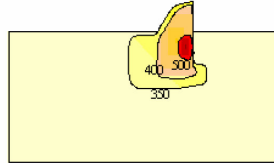


(b) Yerel sıcaklığın (K) uzaysal dağılımı

Şekil 3.117 33 ps sonraki $200ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları [10]



(a) Moleküler Konfigürasyon



(b) Yerel Sıcaklığın (K) Uzaysal Dağılımı

Şekil 1.118 33 ps sonraki $20ms^{-1}$ kesim hızı ile gerçekleştirilen simülasyon sonuçları [10]

Sonuç olarak, paralel moleküler dinamik, uzaysal ayrışım ve parçacık ayrışımı üzerine kuruldu. Süper bilgisayarda değerlendirme testiyle, geleneksel moleküler dinamikten (MD) daha yüksek verimlilik sağlanmıştır. Metal kesim veya taşlamaya gelince; diğer işlemcilerde iletişim kurulması gerekli komşu moleküllerin bilgisi için hesaplanan zaman, uzaysal ayrışım için, parçacık ayrışımı için gerekli olandan daha kısadır. Moleküler dinamik (MD) simülasyonu mesela, $20ms^{-1}$ 'den (ki geleneksel moleküler dinamik (MD) ile dikkate değer zaman

kullanmak için büyük ölçekli simülasyonlara daha önce uygulanmamıştır) daha az hız için paralel moleküler dinamiğinin (PMD) kullanımıyla gerçekleştirildi.

Paralel moleküler dinamik (MD) simülasyonları; tek kristalli bakır (001) yüzeyi açıklayan atomik sürece temel öngörü sağladı. Kesme kuvvetinin değişiminin, iş parçası kafesinin kayışına bağlı olduğu FFT ile kanıtlandı. 20° , -20° ve 0° , meyil açılarındaki durumlar karşılaştırıldığında, takıma dik kesme kuvveti, yaklaşık olarak, takımda meydana gelen aşınmayla aynıdır. Yüksek talaşlama hızları ($200ms^{-1}$), geniş talaş oluşumuyla birlikte, pürüzlü talaşlanmış yüzeye sebep olur. Yerel kinetik enerjide veya takımın altındaki ve talaştaki yerel sıcaklıkta büyük artış vardır. Aksine düşük talaşlama hızları ($20ms^{-1}$) daha küçük talaş oluşumuyla, daha pürüzsüz talaşlanmış yüzeye neden olmuştur. Kinetik enerji veya takımın altındaki ve talaştaki yerel sıcaklıkta da daha az artış vardır [10].

3.5.5.2 Nanometrik Kesimin Mekanığı Üzerine Bir Araştırma ve Sınama Ortamının Geliştirilmesi

Bu çalışmada Cheng v.d., nanometrik ölçekte kesim mekanığı, geleneksel kesim yöntemleriyle karşılaştırmalı olarak incelemiştir. Nanometrik kesim işleminin simülasyonu ve modellenmesi için moleküler dinamik (MD) simülasyon yöntemi kullanıldı. Modeller ve simüle edilen sonuçlar atomik güç mikroskopunda (AFM) kesim denemeleriyle değerlendirilmiştir. Üstelik aşırı duyarlıkta denektaşı tipi (bench-type ultraprecision) imalat makinesinin kavramsal tasarımı sunulmuştur. Makine üç boyutlu MEMS aygıtların nanometrik kesimi için olanak sağlamayı amaçlamaktadır. Çalışma; gerilim, nanometrik kesim tekniklerinin uygulanması/tahmin edilebilirlik teçhizatı, üretilebilirlik ve nano ölçekte imalatın verimliliği üzerine yapılmıştır.

3.5.5.2.1 Nanometrik Kesim Modeli

Etrafıca bir nanometrik kesim modeli, iş parçası ve kesici takımın mikro yapısını ve kesici takımın molekülleri ile iş parçası arasındaki etkileşimi kapsamalıdır. İş parçası ve kesici takımın ideal mikro yapısı, Şekil 3.164'de gösterildiği gibi kendi kristal yapılarından elde edilebilir. Şekil, nanometrik kesim için, tüm atomların komşu atomları ile etkileştiği, tipik bir moleküler dinamik (MD) model gösterir.

3.5.5.2.2 Kesim Enerjisi ve Kesme Kuvvetleri

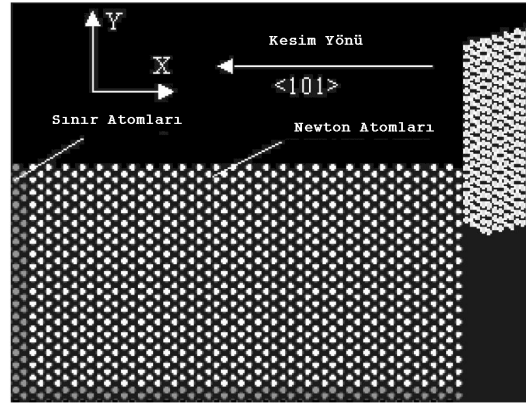
Atomlararası kuvvetler, ilgili atomların gerilim fonksiyonunun türetilmesi ile hesaplanabilir. Örneğin, Mors gerilim fonksiyonuna dayanarak, Denklem 3.158’de ifade edildiği şekilde i ve j arasındaki atomlararası kuvvet:

$$u(r_{ij}) = D_k [\exp(-2a(r_{ij} - r_0)) - 2\exp(-a(r_{ij} - r_0))] \quad (3.158)$$

$$F(r_{ij}) = -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} = 2D_k a [\exp(-2a(r_{ij} - r_0)) - \exp(-a(r_{ij} - r_0))] \quad (3.159)$$

D , bağıntı enerjisi; a , esneklik katsayısı ve r_0 denklemdeki atomik uzaklığı ifade etmektedir. i ’nci iş parçası atomuna etkiyen kuvvet, 3.160 no’lu denklemde ifade edildiği gibi çevredeki atomların etkileşiminin toplanmasıyla elde edilir.

$$F_{wi} = \sum_{j \neq i}^{N_t} F_{wtij} + \sum_{j \neq i}^{N_w} F_{wwij} = \sum_{j \neq i}^{N_t} -\frac{du(r_{wtij})}{dr_{wtij}} + \sum_{j \neq i}^{N_w} -\frac{du(r_{wwij})}{dr_{wwij}} \quad (3.160)$$



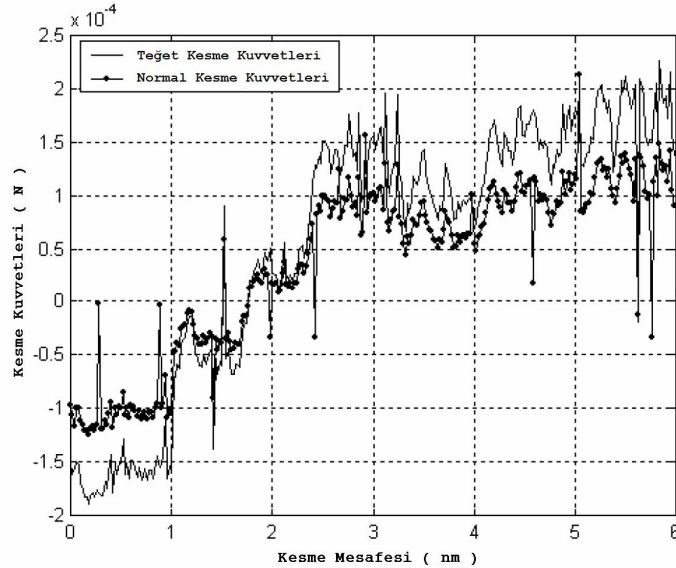
Şekil 3.119 Nanometrik Kesimin Moleküler Dinamik Simülasyon Modeli [11]

N_t ve N_w sırasıyla kesici takımın ve iş parçasının atom sayısını ifade etmektedir. F_{wtij} ve F_{wwij} sırasıyla; i ’nci iş parçası atomu üzerine; kesici takımdan ve diğer iş parçası atomlarından etkiyen atomlar arası kuvvetleri ifade etmektedir. Her bir takım atomundaki kuvvet aşağıdaki benzer işlemle elde edilir:

$$F_{ti} = \sum_{j \neq i}^{N_t} F_{tij} + \sum_{j \neq i}^{N_w} F_{twij} = \sum_{j \neq i}^{N_t} -\frac{du(r_{tij})}{dr_{tij}} + \sum_{j \neq i}^{N_w} -\frac{du(r_{twij})}{dr_{twij}} \quad (3.161)$$

F_{twij} ve F_{tij} sırasıyla; i 'ninci kesici takım atomu üzerine; iş parçası ve diğer kesici takım atomlarından etkiyen atomlar arası kuvvetlerdir.

Genel olarak, nanometrik talaş kaldırmada, düşük kesme derinliği sebebiyle, kesme kuvvetleri, konvansiyonel (geleneksel) talaş kaldırmadakilerden daha küçüktür. Şekil 3.120 tek kristalli silisyumun, $30nm$ yarıçap ve $1.76nm$ kesim derinliği ile nanometrik kesiminin moleküler dinamik simülasyonundaki kesme kuvvetlerindeki değişimleri gösterir. Simüle edilmiş ortalama teğetsel kesme kuvvetleri $55.8mN$ 'dir. Ortalama normal kesme kuvvetinin ortalama teğetsel kesme kuvvetine oranı 0.66 , ki konvansiyonel kesimdekinden daha büyüktür. Bu nanometrik kesimdeki düşük kesme derinliğinden kaynaklanmakta, böylelikle iş parçası esas olarak kesim eğimince işlenir. Sıkıştırıcı etkileşimler, iş parçasının bozulumunda baskın kalacak ki bu sebeple (sıkıştırıcı etkileşimler) takım-talaş ara yüzünde artan sürtünme katsayısı ve yüksek kesim oranıyla sonuçlanacaktır.



Şekil 3.120 Tek kristal yapılu Silisyum ile nanometrik talaş kaldırma boyunca kesme kuvvetlerinde meydana gelen değişim [11]

3.5.5.2.3 Moleküler Eylem Fonksiyonu

Atomlararası kuvvet, iş parçası ve kesici takımındaki atomların hareketini simüle eden güçtür. Atomların hareketi Newton'un 2. yasası ile aşağıdaki şekilde sınırlandırılır:

$$\frac{d^2(r_{wi})}{dt^2} = \frac{F_{wi}(r_{wtij}, r_{wwij})}{m_{wi}} \quad (3.162)$$

$$\frac{d^2(r_{ii})}{dt^2} = \frac{F_{ii}(r_{twij}, r_{ttij})}{m_{ii}} \quad (3.163)$$

r_{wi} ve r_{ii} sırasıyla; iş parçası ve kesici takım atomlarının yer değiştirme vektörüdür.

İş parçası ve kesici takım materyalinin atomlarının konumları (3.162) ve (3.163) numaralı denklemlerin çözümüyle elde edilebilir. Eğer iş parçası atomunun ve kesici takım atomunun ayrı ayrı konumu tespit edilebilirse, kesim olayı atomik ölçekte çalışılabilir, örneğin, nano ölçekte. Bu sebeple talaş uzaklaştırma mekanizması, yüzeylerin üretimi, takım aşınması ve süreçle ilintili nano tribolojik durum tamamıyla ve kesinlikle araştırılabilir.

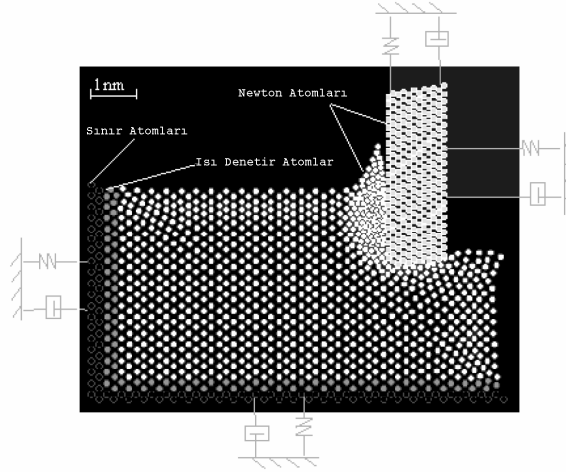
Yapısal ve bağlantısal sertlik ve imalat makinesi / takım işleme / malzeme yapısında sönüm nedeniyle, doğrusal olmayan moleküler dinamik simülasyon modeli Şekil 3.121'de gösterildiği şekilde geliştirilmiştir. Bu modelde, talaş kaldırmada diğer izole edilmiş doğrusal olmayan etkileri araştırmak için, takım aşınması dahil edilmemiştir. Şekil 3.121'de gösterildiği gibi, malzeme üç farklı bölgeye ayrılır; Newton atomları bölgesi, ısı denetim atomları bölgesi ve sınır atomları bölgesi olarak isimlendirilir. Sınır atomları; (3.164 numaralı denklemlerle hesaplanan), yeni atomların ortalama yer değişmesiyle, sabit konumdadır. Kafes titreşimi bu sebeple ihmal edilir, sınır etkileri azaltılır ve örgünün uygun simetrisi sürdürülür. Isı denetim atomları, işlem sıcaklığını kontrol etmek için ölçeklendirilir. Newton atom bölgesindeki ve kesici takımındaki atomlar, Newton'un 2. yasasına göre davranan atomlar olarak değerlendirilir. Elmas kesici takım ve iş parçası arasındaki eylem, Morse gerilim fonksiyonu ile hesaplanır. İş parçasındaki Newton atomları ve ısı denetim atomlarının devinimi (3.164) numaralı denklemlerle belirlenir:

$$m_i \ddot{r}_i + \frac{h_c}{\omega} \dot{r}_i + \lambda_s (r_i + \beta_{c1} r_i^2 + \beta_{c2} r_i^3) + \lambda_a r_i = F(r_i) \quad (3.164)$$

m_i , hesaplanan atomun kütlesi; h_c hysterik sönümlenme sabiti; ω , çatlak sıklığı. λ_s ve λ_a sırasıyla; başlangıçtaki sertlik fonksiyonunun eğimi ve atomlar arası sertlik katsayısını ifade etmektedir. β_{c1} ve β_{c2} sertlik fonksiyonunun doğrusal olmayan sabit kullanıldı. Yer değiştirme r_i^{n+1} ve hız v_i^n 3.165 ve 3.166 numaralı denklemlerle verilir:

$$r_i^{n+1} = r_i^n \left(1 - \frac{h^2}{2m_i} \lambda_a - \frac{h^2}{2m} \lambda_s \right) + h v_i^n \left(1 - \frac{h h_c}{2m \omega} \right) - \frac{h^2}{2m_i} F_i^n - \frac{h^2}{2m_i} \lambda_s \left[\beta_{c1} (r_i^n)^2 + \beta_{c2} (r_i^n)^3 \right] \quad (3.165)$$

$$v_i^{n+1} = \frac{\omega + h_c}{\omega - h_c} v_i^n + \frac{\omega h}{2m_i (h_c + \omega)} \left[(F_i^n + F_i^{n+1}) - (\lambda_s + \lambda_a) (r_i^n + r_i^{n+1}) - \lambda_s \beta_{c1} \left[(r_i^n)^2 + (r_i^{n+1})^2 \right] - \lambda_s \beta_{c2} \left[(r_i^n)^3 + (r_i^{n+1})^3 \right] \right] \quad (3.166)$$



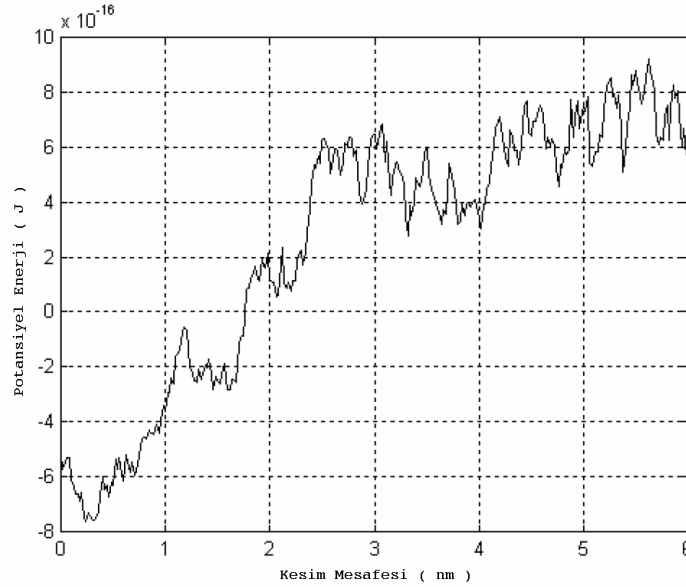
Şekil 3.121 Nanometrik kesim için doğrusal olmayan bir moleküler dinamik simülasyon modeli [11]

h , integralleme zamanını ifade etmektedir. Tipik olarak materyal atomları ve takım atomları, sırasıyla; yüzey merkezli kübik örgü (FCC) ve elmas kafeste konumlanır. Başlangıç hızları ($20^\circ C$) oda sıcaklığında, Maxwell dağılımından elde edilir. (3.165) ve (3.166) numaralı

denklemlerle yinelemeli hesaplamalarda, $n + 1$ zamanda i atomunun yer deęiřtirmesi ve $n + 1$ zamandaki hızı belirlenebilir. Nanometrik kesimin yamulma ya da kırılma süreci, böylelikle yukarıda bahsedilen atomik düzeyde, modelleme ve hesaplamalarla çalışılabilir.

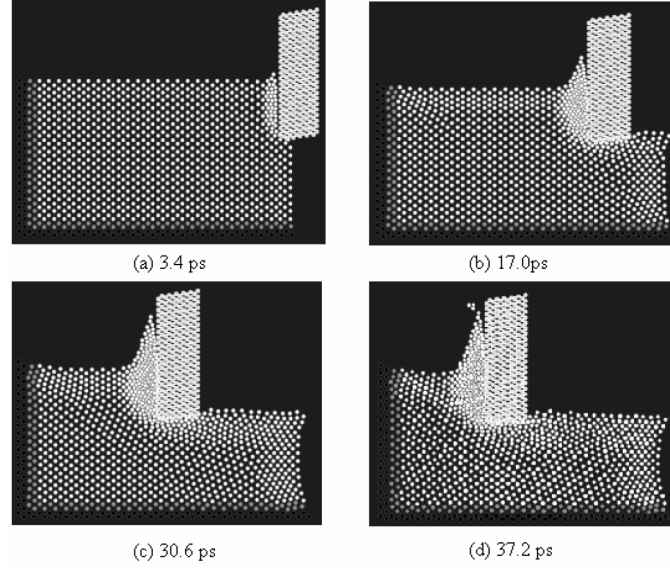
3.5.5.2.4 Talař Kaldırılmış Yüzeylerin Üretilmesi

0.35nm uç yarıçaplı elmas kesici takım kullanılarak, mono kristalimsi alüminyumun (001) düzleminde nanometrik dikey kesimi simüle edilmiştir. Kesilmemiş talař kalınlığı 1.4nm , kesim hızı 20m/s olarak belirlenmiştir. Kesim hızı, hesaplama zamanını kısaltmak için normalden daha yüksektir. Kesim yönü (010), zaman basamağı 34fs.'dir. Bařlangıç sıcaklığı 20°C . Takımın meyil açısı 0° ve boşluk açısı 10°'dir. Simülasyonda sunulan iş parçası, hesaplama kuvvetince sınırlandırılmış olarak, 3516 Al atom içerdiği ve kesici takımın 1931 atom içerdiği varsayılmıştır. Talař yer deęiřimi ve talař kaldırılmış yüzeylerin üretimi, kesim işleminin sonucudur.



Şekil 3.122 Nanometrik kesim işlemi süresince potansiyel enerjideki deęişim [11]

Talař kaldırma işlemi boyunca gerilim enerjisindeki deęişim, Şekil 3.122'de gösterilmiştir. Şekil, kesici takımın ilerleyişinden evvel gerilim enerjisinin negatif olduğunu, takımın işlemesiyle gerilim enerjisinin pozitif olduğunu göstermektedir. Kesim sürecinde, büyük ihtimalle doğrusal olmayan kaynaklardan ileri gelen, enerjide güçlü deęişim var.

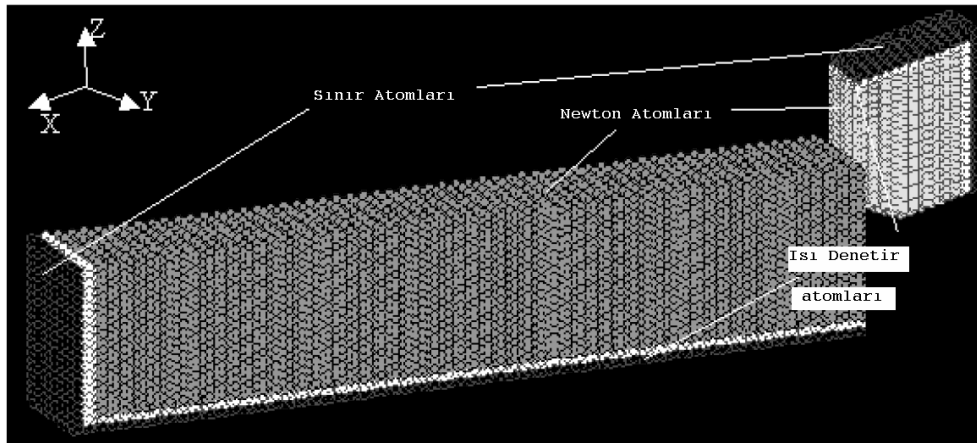


Şekil 3.123 Nanometrik talaş kaldırma işleminin moleküler dinamik simülasyonları [11]

Şekil 3.123; moleküler dinamik (MD) simülasyonu ile elde edilen nanometrik kesim işleminin anlık fotoğrafını göstermektedir. Talaşın bir birim atomik kümeyle uzaklaştığı görülebilir. Şekil 3.122 ve 3.123’de gösterilen sonuçlara dayanarak, nanometrik kesim yüzeylerinin üretimi, şu şekilde açıklanabilir: Kesici yüzün işlenmesine bağlı olarak, iş parçası atomları ve elmas takım atomları arasındaki çekme kuvveti, itici hale gelir. Elmas atomlarının bağın enerjiyi Al atomlarınınkinden daha fazla olduğundan çalışma kafesi sıkıştırılır. Sıkıştırılmış kafeste depolanan gerinim enerjisi belirli bir düzeyi aştığında, atomlar, gerinim enerjisini salmak için, yeniden düzenlenmeye başlar. Atomlar yeniden düzenlenmeyi gerçekleştirecek yeterlilikte değilse, mikro dislokasyonlar meydana gelir. Üst tabakadaki sıkıştırılmış atomlar ile alt tabakadaki atomlar arasındaki itme kuvvetleri artar, böylelikle, üstteki atomlar kesici yüz boyunca hareket eder ve aynı zamanda, takım atomlarındaki itme kuvvetleri, atomları kesme çizgisinin altına sıkıştırmak için, artan talaş akışına direnç gösterir. Kesici uç hareketi ile bazı dislokasyonlar yukarı yönlüdür ve yüzeye ulaştıklarında, serbest yüzeyden kaybolurlar. Bu olgu talaş oluşum sürecine uymaktadır. Başarılı üretimin ve dislokasyonların kayboluşunun sonucu olarak, talaşın muntazam uzaklaşacağı görülür. Kesici takımın geçişiyle, yan yüzeydeki baskı serbest kalır. Atomların katmanları yukarı hareket eder ve esnek toparlanmayla sonuçlanır, böylece talaş kaldırılmış yüzey üretilir. Sonuç olarak; talaş uzaklaştırması ve talaş kaldırılmış yüzey üretiminin, aslında, iş parçası materyallerinin kayma hareketinden kaynaklandığı belirtilebilir.

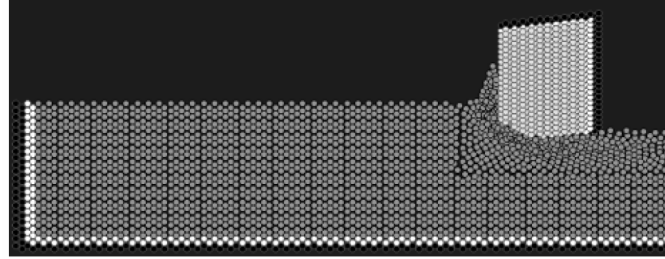
3.5.5.2.5 Kesici Takım Aşınması

Tek kristalli atomun nanometrik kesimi, takım aşınmasında örnek olay olarak alınır. Şekil 3.124, mikro kristalimsi alüminyumun, elmas kesici takımıyla, (001) düzleminde dikey kesiminin üç boyutlu moleküler dinamik simülasyonunu gösterir. İş parçasının ve takımın modeli yaklaşık 90000 atomunu içerir. Isı denetir atomları, işlem sıcaklığını kontrol eder. Sınır etkilerini azaltmak için, sıkı sınır koşulları benimsenir. Elmas takımın kesici kenar yarıçapı $1.3nm$, kesilmemiş talaş kalınlığı $1.5nm$ olarak belirlenmiştir. Hesapsal zamanı azaltmak için, $100m/s$ kesim hızı kullanılmıştır. Bu kesim hızı gerçekçi olmamakla birlikte; $20m/s$ 'den $200m/s$ 'ye kadar olan kesim hızlarında elde edilen yüzey kalitesi ile arasında çok küçük bir fark olduğu ispatlandı. İş parçasındaki Al etkileşimleri ve elmas takımındaki C-C etkileşimleri için, uyarlanmış gömülü atom gerilimi kullanılmış. Bu modelde, nanometrik kesimde, kesim ısısının ısı denetir etkisi; alüminyum ve karbon atomlarının süblimleşme enerji parametrelerinin, sıcaklık değişimlerine göre uyarlanması yoluyla içerildi. Bu; enerjinin eş paylaşımı teoremi ve Kirchhoff'un yasasıyla alüminyum ve karbon atomlarının süblimleşme entalpisi sayesinde, kesim sisteminin denge sıcaklığının hesaplanmasına dayanmaktadır. Bu kuralsal toplulukta, sabit basınç altında, alüminyum atomu ve karbon atomunun süblimleşme entalpisi süblimleşme enerjisine eşitlenir. Süblimleşme enerjisi ve sıcaklık arasındaki ilişkiye bağlı olarak, süblimleşme enerjisini, MEAM potansiyeli içinde düzenlenmiştir. Potansiyel farkı, atomlar arası kuvvetler olacağından; kesim ısısının etkisi, kesim sistemine eklenir.

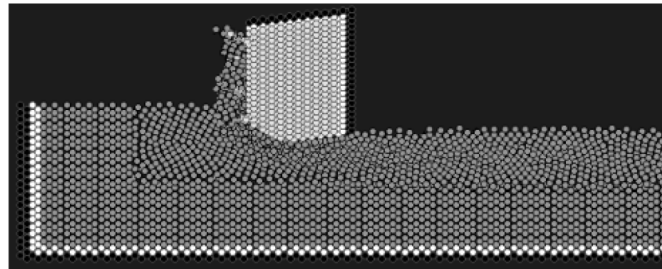


Şekil 3.124 Nanometrik kesim için 3 boyutlu moleküler dinamik simülasyon modeli [11]

Takım aşınmasını açık bir şekilde gözlemleyebilmek için, iş parçası ve takım atomlarının, (200) düzlemindeki anlık görüntüleri Şekil 3.125’de gösterilir; (a)’da başlangıçtan 20.4 ps ve (b)’de, 120 ps’ye kadar. 20.4 ps’de, kesici ağız altında iş parçasının kristal hali ve eğim yüzeyi bozulmaya başlar. 120 ps’de, iş parçası ve takım atomları arasında belirgin yayınım vardır. Takımın ucundan birkaç takım atomu ayrılır ve talaşla hareket eder ve onların birkaçı kesici uca bağlanır ve yan yüzeyde çalışma atomları ile dağılır. Yine de, kesici kenarın şekli çoktan değişmiştir ki, takımın kesici kenarının aşınmaya başladığını gösterir. Olgu, kesim bölgesindeki hızlı sıcaklık artışıdır. Kesim sıcaklığındaki artışla, C’un süblimleşme enerjisi önemli ölçüde düşer. Aksine, Al’un süblimleşme enerjisindeki değişim küçüktür. Karbon süblimleşme enerjisindeki düşüş, C-C kovalent bağının zayıflamasıyla sonuçlanacaktır ve elmas atomlarının bağıntı enerjisinin düşmesine sebep olur. Çalışma atomlarının kinetik enerjisindeki artışla, bazı çalışma atomları takım atomları ile dağılır. Çalışma atomlarının yayınımı, takım atomlarının bağını zayıflatabilir. Üstelik elmas atomlarının zayıflamış bağı da bu sefer, çalışma atomlarının yayınımını yükseltir. İş parçasındaki maksimum zorlanma, takımın ucuyla birlikte ara yüzde bulunur. Bu, Şekil 3.125(b)’de gösterilen simülasyon sonuçlarıyla da kanıtlandığı gibi; takım ucunun aşınmaya uygun olduğunu gösterir.



(a) 20.4 ps



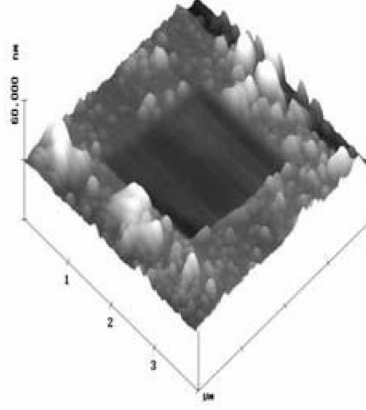
(b) 120 ps

Şekil 3.125 Farklı zaman adımlarında moleküler dinamik simülasyonun görüntüleri [11]

3.5.5.2.6 Nanometrik Kesim İçin Sınama Ortamı

(a) Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ile Nanometrik Kesim Denemeleri:

Nanometrik kesim fiziği bilgisi hiç şüphesiz, aşırı duyarlı talaş kaldırma takımı ile yürütülen nanometrik kesim denemeleriyle doğrudan elde edilebilir. Yine de, atomik kuvvet mikroskop (AFM) tekniklerinin geliştirilmesi, bu bilgiyi elde etmek için, alternatif yollar sağlamıştır. Nanometrik kesim mekanizmasını çalışmak için; bir AFM'nin keskin elmas ucu, iş parçasının yüzey kesiminde, tek-uçlu elmas kesici takımına benzetmek için kullanılmıştır. Buna rağmen, yüzey taraması yoluyla, yüzey topografyası elde etmek için, uç normal olarak kullanılır. AFM dirseğinin tork kalınlığı, konvansiyonel bir takım tutuş mekanizmasının kalınlığından daha az ve AFM'nin normal yükü, konvansiyonel çalışma takımı bağlantı yükünden daha küçük olduğu halde, AFM'nin kullanıldığı nanometrik kesimde, malzeme uzaklaştırma işlemi, elmas takımın kullanımındakiyle oldukça benzerdir. Üstelik AFM ile nanometrik kesimin, malzeme uzaklaştırma hacmi, geçerli moleküler dinamik simülasyonu ölçeği ile tutarlıdır. Bu sebeple, nanometrik kesim denemeleri, tek kristalli silikon levha üzerinde, bir AFM'nin (Nanoscope IIIa Dimension 3100, Digital Instruments) elmas ucuyla, kazıma modunda yürütüldü. Elmas takımın kesici kenar yarıçapı, $30nm$, ve dirseğin tork kalınlığı $2.9 \times 10^{-5} N/V$ (imalatçılarca sağlandığı kadar)'dır. Denemelerde, girintili yazma ve kazıma süreci boyunca, normal yük $40\mu N$, tarama hızı $1Hz$. olarak belirlenir. Elmas ucun, bir ölçüde, yüzeye çentik biçiminde yazmasından sonra, $2\mu m$ 'ye $2\mu m$ talaş kaldırılmış yüzey alanı üretilene kadar, kazıma işlemi tekrarlanır. Talaş kaldırılmış yüzeyin doku görüntüsü ve satıh tesviyesi analiz diyagramı sırasıyla Şekil 3.126 ve 3.127'de gösterilir. Yüzey ortalama pürüzlülüğü R_a , $0.447nm$ olarak ölçülmüştür. Sonuçlar; elmas kesici takımıyla, nanometrik kesimin üretilebilirliğinin ve tahmin edilebilirliğinin iyi olduğunu göstermiştir. Ayrıca tork gerilim sinyaline ve dirsek sertliğine dayanarak, kesme kuvveti $67.4\mu N$ olarak ölçülebilir. Kuvvet değeri; 3.5.5.2.2'nci bölümünde belirtilen, nanometrik kesimin Moleküler Dinamik simülasyonunun kestirimiyle tamamıyla tutarlıdır ($67.4 - 55.8/67.4 \times 100\% = 17.2\%$ fark).



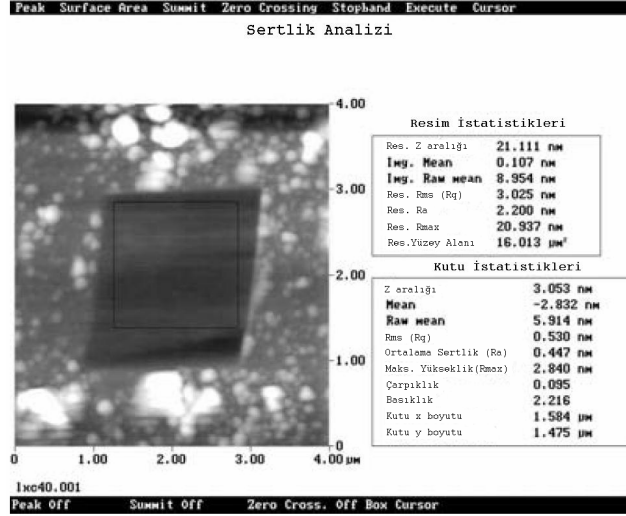
Şekil 3.126 Talaş kaldırılmış yüzeyin topografyası [11]

(b) Nanometrik Kesim İçin Aşırı Duyarlı Talaş Kaldırma Makinası:

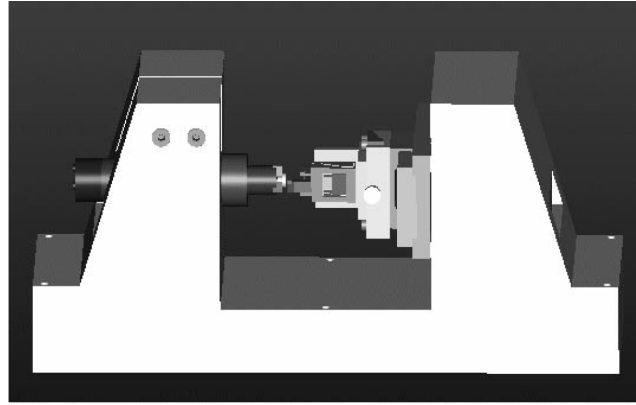
Şekil 3.128, nanometrik kesim süreci için, denektaşı-tipi aşırı duyarlı talaş kaldırma makinesinin kavramsal tasarımını sunar. Talaş kaldırma makinesi, 3D MEMS aygıtların üretimi için, aşırı duyarlı talaşlama becerisinde olmayı amaçlar.

Talaş kaldırma makinası aşağıdaki özelliklere sahiptir:

- Düşük maliyet, endüstriyel fizibilite ve yerel çevresel kontrolün rahatlığı açısından denektaşı-tipi,
- Geliştirilmiş teknolojinin esnek uygulanabilirliğini ve ürünlerin kişiselleştirilebilirliğini sağlamak adına modüler yapıya sahip,
- Lineer motor ve hareket kontrolü için; akıllı elle ayarlanabilir birimle birleştirilmiş piezoelektrik devindirici, kullanır [11].



Şekil 3.127 Yüzey sertlik analizi [11]



Şekil 3.128 Nanometrik kesim için geliştirilen denek-taşı tipi aşırı duyarlı talaş kaldırma makinesinin taslağı [11]

3.5.5.3 Bakırdan Nano Ölçekte Talaş Kaldırmanın MD Simülasyonu

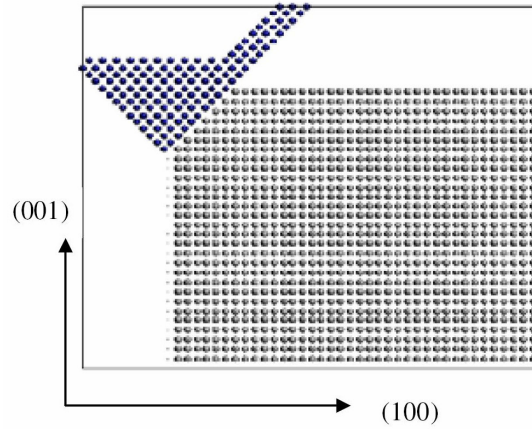
Biswas v.d.tek kristalli bakırın nanometrik talaş kaldırılmasının moleküler dinamik simülasyonları gömülü atom metoduyla gerçekleştirmişler. Bu çalışmada malzeme taşınımı, talaş formasyonu, materyal ayrılmalar ve sürtünme kuvvetleri simüle edilmiştir.

Bu çalışmada, elastik özellikleri, kusurlu oluşum enerjilerde, yakın sıkıştırılmış bir yığın çeşitli metallerin kırılma mekanizmasını modellemede, oldukça başarılı olmuş, kanıtlanmış EAM'dan yararlanılmıştır. EAM geniş çapta yüzey özelliklerine de; yüzey enerjilerini başarılıca

tanımlamada, yüzeyin yeniden oluşturulmalarında, metal yüzeydeki soğurmelerde başarılı bir şekilde uygulanmıştır.

EAM'ın temel yaklaşımı, yoğunluk-işlevsel teoriden geliştirilen, bir atomik sistem için toplam potansiyel enerji (U), yerleştirme enerjisinin (F) ve kısa-dönemli itici potansiyel enerji çiftinin (ϕ) toplamıdır:

$$U = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (3.167)$$



Şekil 3.129 İş parçasının ve kesici takımın -45° meyl açısıyla, bakır (100) yüzeyinin nanometrik kesiminden önceki başlangıç şekli. Kesim derinliği 0.9nm . Hücrenin kenar ve altındaki katmanlar sert. Atomların $x-z$ düzlemi (sabit y düzlemi) gösterilir. [9]

Gömülü enerji, bir atomu i , bu atomun bölgesinde ana elektron yoğunluğu $\rho_{h,i}$ 'na yerleştiren enerjidir. Herhangi bir noktadaki elektron yoğunluğu, bireysel atomik yoğunlukların toplamı olarak uygun şekilde tanımlanır. Gömülü fonksiyon $F(\rho_{h,i})$, kuantum mekanik katkılarını, katının bağıntılarına birleştirir. EAM'daki parametreler, doğru kafes sabitlerden, yığın zorlama çarpanı ve formasyonun ısısından verimlilik sağlamak için uygun hale getirilmiştir.

Buradaki simülasyon uzayı, bakır bir iş parçasıdır. Nano ölçek işleme uygulamaları için önemi ve yarı iletken teknolojide bir ara bağ olmasından dolayı bakır seçilmiştir. Bakırın (001) düzleminin nano ölçekte talaş kaldırılmasını simüle etmek için, 6350 atom içeren (Şekil 3.129) $20a \times 4a \times 20a$ boyutlarında bakır levhadan yararlanılmış; alüminyum yüzeylerdeki önceki

simülasyonların çalışma alanındakine benzer şekilde, a ; bakırın örgü sabiti ($3,61 \text{ \AA}$)'dir. Simülasyonlar 15000 atomlu geniş sistemlerde benzer sonuçlarla gerçekleştirilmiştir. Cilalama ilk olarak bakırın (001) yüzeyinde [100] yönü boyunca araştırılmış. Periyodik sınır koşulları x veya z istikametinde değil fakat y istikameti boyunca devam ettirilmiştir. xz yüzeyi ve xy düzleminin altındaki (iş parçasının altı) atomlar, sabit tutulmuştur. Diğer tüm atomların moleküler dinamik (MD) algoritması boyunca hareketine izin verildi. Atomik koordinatların zaman entegrasyonu için öngörü düzeltici Gear algoritması kullanıldı. Tüm sistemin sıcaklığı standart Nose termostatıyla sürdürüldü. Çalışma alanının detayları Tablo 3.17'de özetlenmiştir.

İş parçasının (Şekil 3.129) sol taraftaki ucunda, başlangıçta takımı konumlayan, takımın simülasyonları için yakın plan, yüzeyin üzerinde çıkıntı oluşturmuştur. Takım, iş parçası boyunca kararlı hal nano-kazıma sürecini etkince simüle ederek sertçe hareket etmiştir. Bu mekanik aşınımı ve metal bir yüzeydeki eşbiçimsizliğin düzlemselleştirilmesini, belki CMP'deki durum gibi modeller.

İş parçasının sert kazınmasını takip eden çeşitli derinliklerdeki girintili yazmanın alternatif yöntemi, bu çalışmada bahsedilen ilk yöntemdeki nano ölçekte talaş kaldırma için, nitelik olarak benzer sonuçları üretmiştir. Yine de kararlı hal talaş kaldırma işlemiyle ilgili olarak daha az, önceki girintili yazma simülasyonu ile daha çok bağlantılıdır.

500–700 bakır atomundan oluşan takım, meyil açısına bağlıdır. Takımın (110) eksenini alt tabakanın (100) eksenine paraleldir. Negatif talaş açısıyla çentik açıcı aygıt benzeri takım kullanılmıştır. y yönündeki takım genişliği ($3a$) iş parçasından daha küçük 2 atomik katman olduğundan, iş parçası boyunca bir kanal üretmiştir. Takım atomları, iş parçasının sabit atomik sınır duvarlarına karşı sürtünüyor. Tam bir 3 boyutlu simülasyonda beklenileceği gibi, materyalin dağılmış kanal tarafında birikmesine izin verilmemiştir. Takım, CMP'deki yüzeye karşı aşındırıcı parçaları sıkıştırmadaki yastığın rolüne benzer şekilde, aşındırıcı takım serttir ve azalan itici güçle tutulur.

Tablo 3.17 Çalışma alanı ve simülasyon parametreleri [9]

Simülasyonlar İçin Potansiyel	EAM	
Alt Tabaka Malzemesi	Bakır	
Alt Tabakanın Kristal Yapısı	Yüzey Merkezli Kübik (FCC)	
Çalışma Alanı Ölçüleri (100)	$20a \times 4a \times 15a$ (001) yüzeyi	6350 atom (1452 atom karışık)
	$a = 3,61 \text{ \AA}$	
Takım Ölçüleri	$(x) \times 4a \times 11a$ (001) x 'e bağlı α_r	304 atom
Boşluk Açısı	45°	
Talaş Açısı, α_r	-45° 'den -63° 'ye	
Kesim Doğrultuları	(001) yüzeyi üzerinde [100] doğrultusu	
Kesme Derinliği	(001) yüzeyinde $6a = 2.1nm$	
Kesme Hızı	$1.8 - 180ms^{-1}$	
Alt Tabaka Sıcaklığı	300K	
Moleküler Dinamik Zaman	0.814fs	

Takım, [100] istikametinde, küçük artışlarla (Δx), kesim yüzeyi boyunca yer değiştirir. Takımın her durumu için, dizge moleküler dinamik (MD) algoritmasıyla ~ 50 zaman basamağıyla gelişir. Takım koordinatları [100] istikameti boyunca Δx tarafından artar ve moleküler dinamik (MD) simülasyonu tekrarlanır. Δx 'in yer değiştirmesi mümkün olduğunca uygun bir şekilde küçük oldukça, simülasyon sürekli benzeri işlemeye yaklaşır.

Tipik metalden talaş kaldırılması durumunda veya CMP durumunda, yumuşak bakır bir yüzey, çok sert bir takımla veya aşındırıcı öğeyle işlenir. Bakır yüzey hazırlığına bağlı olarak önemli derecede yumuşakken (sertlik $< 5\Omega$) elmasın sertliği 10Ω ve aşındırıcı alüminyum oksit 9Ω .

Alt tabakanın altındaki 8 katmanını ($1.2nm$) $300K$ 'de tutarak sıcaklık kontrol edilmiştir. Sıcaklık belirlenen sıcaklıktan $10K$ 'dan fazla saparsa, bu 8 alt tabakadaki atom hızlarının yeniden ölçeklendirilmesi gerçekleşir. Bu algoritma sıcaklığın yüzeydeki talaş kaldırılmış

bölgeden, iş parçasının en büyük kısmına doğru, deneye benzer şekilde, aktarımına izin verir. Sıcaklık kontrolü sıcaklık toleransındaki küçük değişimlere karşı duyarsızdır.

Bakırın deneysel talaşlı işlenmesi i , torna takımıyla, $1-10ms^{-1}$ işleme hızında gerçekleştirilir. Yarı iletken işleminde koruyucunun (pad) CMP adımında $20-50RPM$ dönme hızıyla dönüşü, $0.5-1.0ms^{-1}$ gibi daha da düşük talaş kaldırma dönme hızı üretmiştir. Bu işleme hızının yönetimiyle karşılaştırmak için pek düşük işleme hızını, $1.8ms^{-1}$, $\Delta x = 0.0004nm$ 'deki oldukça küçük artışlarla simüle etmişlerdir. Bu işleme hızı önemli derecede, önceki simülasyonlardan daha yavaştır. Takım $\sim 0.4nm$ uzaklığı içinden geçerken, yaklaşık olarak 1000 yer değiştirme artışı kullanılmıştır. Daha yüksek kesim hızları için, $18ms^{-1}$, $\Delta x = 0.004nm$ kullanılmıştır.

Talaş kaldırma işleminden sonra, takım sabit yüklü pozisyonda tutularak, iş parçası gevşetilebilir ve ~ 150000 zaman adımları ($120ps$) boyunca gevşetilmesine izin verilmiştir. Bu gevşeme hızlı talaş kaldırma adımından sonra alt tabakanın yeniden örgütlenmesine neden olur ve bu düşük kusurlu iş parçasını düzenlemek için önemlidir.

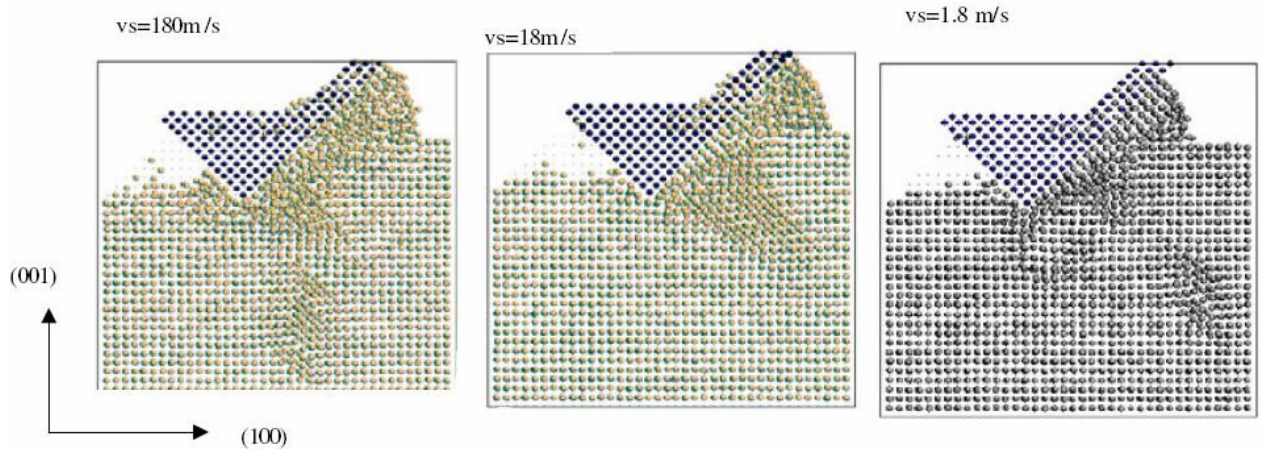
Nano ölçek ön cilalama işlemini tanımlayan farklı değişkenler şu şekildedir;

- (1) Kristal yüzey yönelimi ve kesim yönü,
- (2) Kesim hızı v_s ,
- (3) Kesim derinliği d_c ,
- (4) Takımın meyil açısı α ,
- (5) Takımın kristal yönelimi ve iş parçasıyla takım arasındaki açı,
- (6) Alt tabakanın sıcaklığı T ,
- (7) Son derece sert veya biçim değiştirebilir olan takımın katılığı,
- (8) Gevşeme için zaman ölçeği ve talaş kaldırma işleminden sonra iş parçasının yeniden örgütlenmesi.

İlk olarak (001) bakır yüzeyin nano ölçekte talaş kaldırılması, 1.8 'den $180ms^{-1}$ 'e değişen kesim hızının v_s , bir fonksiyonu olarak simüle edilmiştir. Kesimin yönelimi (100) yönündeydi. Tablo

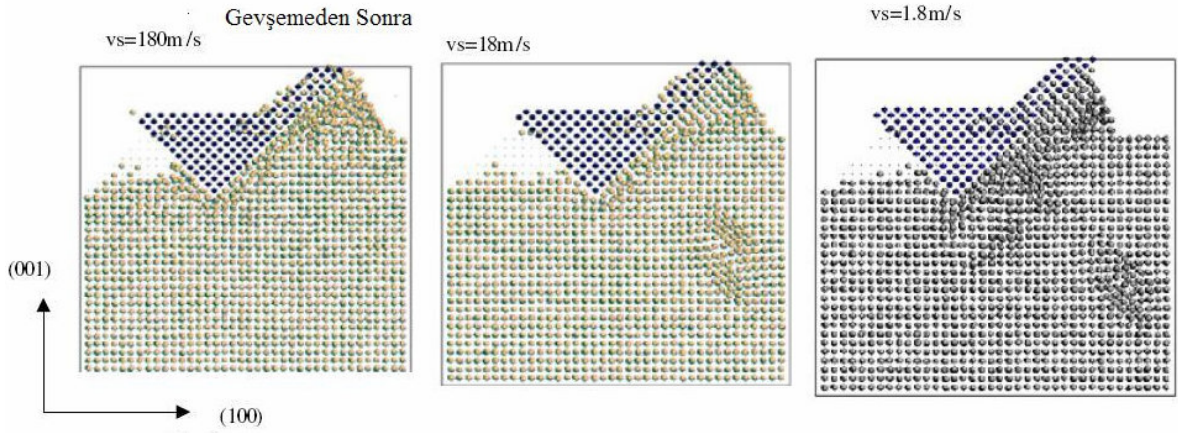
3.17'de gösterilen çalışma alanı parametreleri kullanılmıştır. -45° meyil açılı ilk simülasyon seti, talaş kaldırma hızı v_s ve talaş kaldırılmış yüzeyin doğası arasında zengin karşılıklı etkileşimi gösterir. Şekil 3.130, kesim $\sim 2.7nm$ boyunca ilerledikten sonra, farklı işleme hız sonuçlarını karşılaştırır. En yüksek hızda ($v_s = 180ms^{-1}$) takımın arkasındaki talaş kaldırılmış yüzey, otomatik olarak pürüzlü, fakat hız düştükçe düzleşiyor. İş parçasının, daha yüksek hızlar için (180 ve $18ms^{-1}$) takımın ilerisinde, önemli ölçüde sıkıştırma ve düzensizliği var, bu $v_s = 1.8ms^{-1}$ için azalıyor. Oldukça büyük bir talaş, daha yüksek hızlar için (180 ve $18ms^{-1}$) takımın ilerisinde biçimlendirilmiş, fakat yer değiştiren atomların, yeniden düzenlenmeye daha fazla zamanı olduğundan, en düşük hızda ($1.8ms^{-1}$), daha yavaştır. Dislokasyonlar, üç hızın tümü için üretilmiştir ve alt tabakada daha derince ortaya çıkmıştır (180 ve $18ms^{-1}$, Şekil 3.130). Dislokasyon döngüleri kayıp atomik sıra çiftlerinden oluşur.

Deneysel olarak, takım işleme bölgesi boyunca geçtikten sonra, ($\sim ms$) takım bu bölgeden uzakta olduğunda ve işlenmiş yüzey gevşemeyebilir olduğunda, makroskopik zaman mevcuttur. Bu gevşeme adımının kusurları tavlatabilir hale getirdiği bulunmuş ve bu yüksek kalite iş parçası elde etmede kritiktir.



Şekil 3.130 Bakır (100) yüzeyinin, -45° meyil açılı sert bir takım ile 180 , 18 ve $1.8ms^{-1}$ kesim hızlarında, nanometrik kesiminin, moleküler dinamik simülasyonundan sonraki nihai şekli. Tüm hallerde kesim derinliği $1nm$ [9]

İş parçasının 150k MD adım (120ps) gevşemesi, yüklü takımla, üç işleme hızı için karşılaştırılır (Şekil 3.131). $v_s = 180ms^{-1}$ için takım altındaki sıkıştırma ve derin dislokasyon döngüleri, arkasında hemen hemen kusursuz bir iş parçası bırakarak, önemli ölçüde tavlur (Şekil 3.131). Yine de benzer dislokasyonla örnek 18 ve $1.8ms^{-1}$ tavlama hızlarından sonra kalır. Aslında örnek $v_s = 18ms^{-1}$ 'nin tavlama süresince dislokasyonlar bir parça derinleşmektedir. Takımın ilerisindeki karışıklık tüm durumlarda indirgenir. Takımın arkasında işlenmiş yüzey $180ms^{-1}$ için pürüzlü kalır, fakat hız $1.8ms^{-1}$ 'e indirildiğinde düzleşmiştir.



Şekil 3.131 İş parçasının, yüklü durumdaki takımla Moleküler Dinamik (MD) 120ps 'de (150k MD adımları) çalışırken 180, 18 ve $1.8ms^{-1}$ kesim hızlarında gevşemesinden sonraki şekli. Şekil 3.130'da gösterilen son halleri gevşetildi [9]

$v_s = 180ms^{-1}$ için dikkate değer gevşeme oluşur, çünkü takımın altında yüksek sıcaklık (kızgın nokta) bölgesi biçimlendirilir ve kesimden sonra talaşa doğru genişletilir (Şekil 3.132). Takımın altındaki yerel kinetik enerjiler, 900K sıcaklığa eş ve talaşa daha da yüksektir. Sıcaklık yerel olarak Cu'nun erime sıcaklığına yaklaştığından, sağlam atomik yeniden örgütlenme oluşabilir. Gevşeme, artık enerjinin dağıtılmasına, yığına ısı iletimiyle izin verir ve yüksek enerjili ve düzensiz atomik bölgeyi tavlur. Sıcaklık $v_s = 180ms^{-1}$ için çok yüksek olduğundan, önemli tavlama oluşmakla birlikte, artık enerji 120ps'den sonra tamamen dağıtılmadı ve sıcaklık takımın önünde 600–1000K'e düşmüştür (Şekil 3.132). Ek 80ps için başka tavlama (görülmeyen), tüm iş parçası için 600K'den daha azına düşürür. Karşılaştırma olarak, $v_s = 18ms^{-1}$ için talaş kaldırma işleminden sonra, dislokasyonları tavlama için yetersiz,

200K 'den daha düşük bir sıcaklık artışı var (Şekil 3.132). Aşırı yavaş $1.8ms^{-1}$ simülasyonu süresince hemen hemen hiç ısıtma yok ve ihmal edilebilir tavlama vardır.

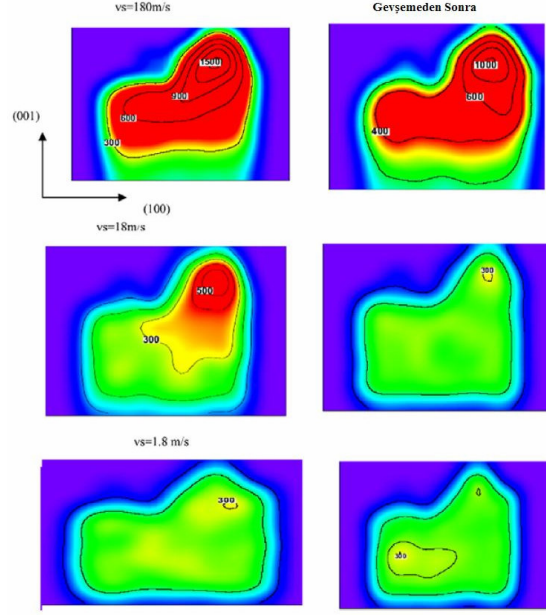
Tavlama boyunca iş parçasının potansiyel enerjisi, geniş gevşeme nedeniyle çokça, $0.1 eV/atom$, düşmüştü. Bu işleme hızları için çok küçük tavlama ile tutarlı olarak $v_s = 1.8ms^{-1}$ ve $18ms^{-1}$ için potansiyel enerjiler gevşeme süresince yalnızca biraz düşer (Tablo 3.18).

Yüksek hızlar ($180ms^{-1}$) pürüzlü yüzeyle sonuçlanırken düz bir yüzey yaratmak için düşük hızlar ($18 - 1.8ms^{-1}$) gereklidir. Çok kristalli alt tabakalar kullanılmış ise, alçak işleme hızında dislokasyonlar daha az sorunsal olabilir. Bunlar, takım alt tabakada çalıştıktan sonra, nanometrik kesim süresince artık enerjinin gevşemesi için değerlendirilecek ilk simülasyonlar - önceden simüle edilmemiş bir özelliktir. Takımı altındaki yüksek sıcaklık bölgesi, yerel bölgedeki zorlanmanın geliştirilmesini önerir. Talaş kaldırma işleminin zaman süreklisi simülasyonu içinde birleştirilmeye ihtiyaç hisseden bir özelliktir.

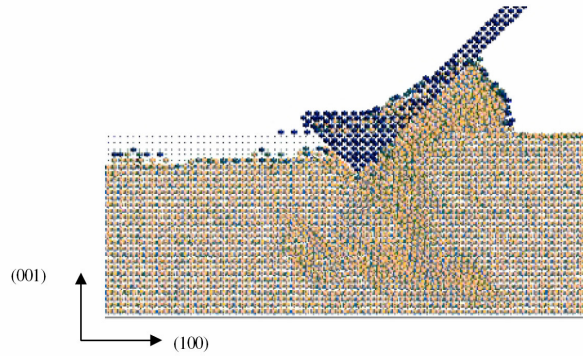
Tablo 3.18 İş parçasının kesimden ve gevşemeden sonraki potansiyel enerjileri (PEs) [9]

Hız v_s (ms^{-1})	Kesim Sonrası PEs ($eV/atom$)	Gevşeme Sonrası PEs ($eV/atom$)
180	-3.1296	-3.2358
18	-3.2019	-3.2140
1.8	-3.2164	-3.2170

Alt tabaka ve takımın aynı yönelimiyle, 12000 atomlu, önemli ölçüde geniş, dizgenin, nano ölçekte talaşlı işlenmesi gerçekleştirilmiştir (Şekil 3.133). Nano ölçekte talaş kaldırma $6.8nm$ 'den daha büyük bir uzaklık üzerinde gerçekleştirilmiştir. Takımın altında dislokasyon çiftleri, takımın çevresinde düzensiz bir bölge ve takımın ilerisinde (önünde) önemli talaş oluşumu var. Esas sonuçlar, daha küçük bir dizgedekiyle (sistem) benzer ve bu benzer sistemin nano talaş kaldırma işleminde daha küçük olan dizgenin ana fiziksel süreçleri tanımlamak için kullanılabileceğini göstermiştir.



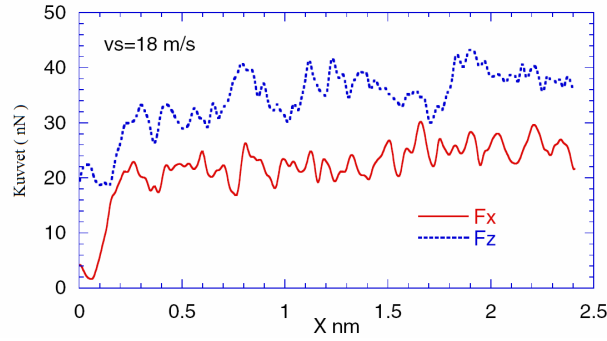
Şekil 3.132 İş parçasının $120ps$ için gevşemesine izin verildikten sonraki (Şekil 3.131'deki biçim) sıcaklıkla karşılaştırmalı olarak; kesim simülasyonundan sonra (Şekil 3.130'daki biçim) iş parçasındaki yerel sıcaklığın (K) uzaysal dağılımı. Sonuç çiftleri 180 , 18 ve $1.8ms^{-1}$ kesim hızları için gösterilir. Her bir resimde farklılaşan ölçek ve sabit sıcaklık konturlarının değerleri gösterilir [9]



Şekil 3.133 (001) yönelimdeki yüzeyle, 12000 atomlu önemli derece büyük bir dizgenin nano işleme simülasyonu. Gösterilen biçim, $18ms^{-1}$ hızda $6.8nm$ boyunca işlemeden sonra [9]

Takımdaki iç katmanlardaki kuvvetleri toplayarak, takımdaki normal kuvveti veya itme kuvveti (F_z), ve kesme kuvveti (F_x) hesaplanmıştır. İş parçasına karşı sürtünen ve iki boyutlu kesim geometrisinin bir el yapımı olan, takımdaki dış katmanların kuvvet katkılarını ihmal etmişirler. İş parçası ve takım arasındaki kafes kaydı, bu simülasyonda ihmal edilmiş olan, büyük periyodik kuvvet değişimlerine neden olabilir. Kesme kuvvetinin itme kuvvetine oranı sürtünme katsayısını

verir ($\mu = F_x/F_z$). İşleme uzaklığıyla bu kuvvetlerin değişimi, 45° takımı ve bir $0.9nm$ kesme derinliği ve $v_s = 18ms^{-1}$ için gösteriliyor. Zaman ortalamalı kuvvetlerden, $\mu = 0.64$ elde ettik. Şekil 3.133'de daha büyük dizgeler için oldukça benzer kuvvet değişimleri ve μ bulundu. Metal işleminde, kuru metal için, büyük kesme kuvvetlerinin oluşturulduğu yerde, μ 'nün büyük değerleri beklenebilir. Kesme derinliği, Şekil 3.134'dekine nitelik bakımından benzer tavrıyla, itme ve kesme kuvvetleri artarken, artmakla birlikte, μ bu değer civarında kalır.



Şekil 3.134 (a) Yüzey -45° meyil açılı takımla, Şekil 3.175'deki geometride, $18ms^{-1}$ hızla işlenirken, itme F_z (kalın) ve kayma kuvveti F_x (çizgili) (b) Yüzey -45° meyil açılı takımla işlenirken, itme F_z (kalın) ve kayma kuvveti F_x (çizgili). Takım ve iş parçasının kristal eksenleri arasında 45° uygunsuzluk var [9]

0.6 (durgun katsayı) ve 0.5 (kinetik katsayı) çelikte kuru çelik için μ 'nün hesaplanan değeri, deneysel olarak ölçülen sürtünme katsayısına uyar. Bakırın değerinin çeliğin bu değerine benzer olmasını bekleriz. Buradaki simülasyon, iki yüzeyin sıyrılmasına karşılık, alt yüzey işlemlerini içerdiğinden μ 'nün hesaplanan değerinin, ölçülen kinetik sürtünme katsayısından daha büyük olması şaşırtıcı değildir. μ 'nün değeri yüzey düzgünlüğüne de bağlıdır.

Sonuç olarak, burada simüle edilmiş olan, daha önceki simülasyonlarda dikkate alınmamış, yeni bir kritik bakış açısı, kesim ilerledikten sonra, iş parçasının gevşetilmesidir. Bu işlenmiş bölgede üretilen artık enerjinin, iş parçasının en büyük kısmına yöneltilmesine izin verir ve bu kusur ve hasarları tavlama da kritiktir. İşlenmiş bölgedeki artık enerjinin iş parçasında zorlama yaratmada kritik olabileceğini saptanmıştır.

Takım ve iş parçası yanlış yönelimli olduğunda (Şekil 3.134), kuvvetlerdeki tesadüfi değişimler, KCR tarafından bulunan sonuçlarla oldukça benzerdir. Sürtünme katsayısının μ , kristal geometriye bağımlılığı da KCR tarafından bulunmuştur. Pozitif meyil açılı takımlar için $\mu > 1$ değerlerini, negatif meyil açılı (-45°) takımlar için $\mu < 1$ değerlerini bulmuşlardır.

EAM kullanılan MD simülasyonları, tek kristalli (001) bakır yüzeyin nanometrik kesime temel oluşturan atomik işlemin, temel kavrayışını sağlamıştır. Nanometrik kesim iki adımdan oluşur: takım işlenmiş bölgeyi geçtikten sonra, takım üst yüzeyi üretirken, malzeme taşınması; iş parçasının düşük kusurlu şekle gevşemesince takip edilir. Nanometrik kesim süresince, yüksek sıcaklık yerel bölgesi ve takımın aşağısında zorlanma var. Gevşeme işlemi bu artık enerjii tavlama ve iş parçasının çok küçük yerinden edilmesine neden olur. Burada gözlenen malzeme taşınma, CMP işleminin mekanik kısmıyla benzer.

Yüksek işleme hızları ($180ms^{-1}$) büyük talaş oluşumlarıyla, pürüzlü işlenmiş yüzeylere neden olur. Takımın altında ve talaşın içinde, büyük yerel kinetik enerji veya yerel sıcaklık artışı var. Bu artık enerji iş parçasının neredeyse yer değiştirmeden bağımsız olması için gevşemesini olanaklı kılmıştır. Düşük işleme hızlarında ($1.8-18ms^{-1}$), alt tabakadaki kalıcı dislokasyonlarla birlikte, küçük talaş oluşumuyla pürüzsüz işlenmiş yüzey oluşumu var. İşleme süresince takımın aşağısında sıcaklık artışı ($< 200K$)'den düşüktür. Dislokasyonlar genellikle yüzeye 45° 'de görünür.

Sürtünme katsayısı (μ), takımın geometrisine bağlıdır. -45° meyil açılı takım için, $\mu \sim 0.64$. μ , takım kristal eksenleri ve iş parçası kristal eksenleri arasındaki yönelim (uyum) derecesine de duyarlıdır [9].

4. SONUÇLAR

Nano ölçekte talaş kaldırma iki ana gruba ayrılarak araştırılmıştır. Birincisi deneysel araştırmalar ki bu konuda uygun takım tezgahlarının geliştirilmesi üzerine çalışılmakta, nano ölçekte talaş kaldırma yöntemleri, işlem parametreleri ve etkileri araştırılmaktadır. İkincisi ise nano ölçekte talaş kaldırmanın tam olarak anlaşılabilmesi ve deneysel çalışmalara göre daha kolayca işlem etkileri ve parametrelerinin araştırılması amacı ile simülasyon tekniklerinin kullanılmasıdır. Bu konuda yaygın olarak geliştirilen simülasyon yöntemleri Monte Carlo ve Moleküler dinamik simülasyonlarıdır [4].

Moleküler dinamik ve Monte Carlo simülasyonları ile takım-iş parçası etkileşimleri ve malzemenin talaş kaldırma esnasındaki davranışı incelenebilmekte, takım geometrisi ve kesme parametreleri gibi işleme etki eden değişkenler kolaylıkla incelenebilmektedir. Moleküler dinamik simülasyon ile ilgili; doğru potansiyel enerji yüzeylelerinin elde edilebilirliği, yüksek kesme hızları kullanma ihtiyacı, daha az sayıda iş parçası atomlarının göz önünde bulundurulması gibi önemli kısıtlamalar söz konusudur. Son ikisi hesap zamanını kabul edilebilir bir değerde tutmak için kullanılır.

Yukarıdaki sınırlamaların son ikisinin üstesinden gelebilmek için bir çözüm yolu olarak, zamanın veya kesme hızının doğrudan işleme dahil edilmediğinden Monte Carlo yöntemi kullanılmaktadır. Aynı zamanda, moleküler dinamik simülasyonlarında ayrıntılı vakit alan hesapların bazıları küçük bir parçada olsa kullanışlıdır. Örneğin, atomların denge konumlarına ulaşmalarından önceki zamanda kesin hareketleriyle ilgili olarak hiçbir şekilde ayrıntılı bilgi önem taşımayabilir. Bu şekilde önemi olmayan konulara yer vermeyen bir yöntem kullanırsak, değerli hesaplama zamanı ve bellek idareli kullanılabilir.

Yüksek kesme hızlarında daha çok moleküler dinamik simülasyon kullanılmasına rağmen, kesme hızı düştükçe Monte Carlo yönteminin etkisi daha da artacaktır. Nanometrik kesimin birçok moleküler dinamik simülasyonu, hesapsal zamanı azaltmak için, yüksek hızlarda ($100 - 500ms^{-1}$) gerçekleşir. Monte Carlo yöntemlerinde, hesapsal zaman kısaltılabilir, çünkü, zaman değişkeni doğrudan işleme dahil edilmez. Ancak nano ölçekte, malzemelerin plastik akış ve kırılmalarının atomistik olması nedeniyle, analizlerde sürekli ortamlar mekaniği ilkeleri kullanılamamaktadır.

Bu nedenle nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmalarını ve parametrelerini incelemek için moleküler dinamik modelleme ve simülasyon daha yaygın bir şekilde kullanılmaktadır [5].

Malzemelerin yüksek hassasiyette işlenme tekniklerinde farklı mekanizmalar görülmektedir. Malzemenin hatalardan bağımsız atomik boyutta işlenmesi mekanizması, malzemenin noktasal hatalarına bağlı atom kümelerinin işlenmesi mekanizması, tane-altı yapıların işlenmesi ve çok taneli yapıların işlenmesi mekanizmaları gibi. Yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları için atom kümelerinin ve kristal altı yapıların mekanizmaları önem kazanmaktadır. İş parçasında, takım önünde oluşan deformasyon mekanizması, dislokasyon oluşumu ve yayılımı ve yüzey altı deformasyonlarının hepsi malzemelerin kristal yapılarına ve kesme yönüne bağlı olarak değişim göstermektedir. Farklı kesme yönlerindeki talaş kaldırmanın dislokasyon oluşumuna ve yayılımına doğrudan etkisi vardır.

Nano ölçekte talaş kaldırıldığında, yani talaş kalınlığı $1 \mu m$ 'den az olduğunda, talaş kaldırma enerjisi büyüktür. Bunun nedeni $1 nm$ ve $0,1 mm$ aralığındaki kesme derinliklerinde, atomik bağ yapısını kırıp talaş kaldırmak için malzemede dislokasyonların değil, sadece noktasal hataların etkili olmasıdır. Dislokasyonlar $0,1 \mu m$ 'nin üzerinde talaş oluşumunda etkin olmaktadır [4].

Nano ölçekte talaş kaldırma konusunda yapılmış çalışmaların ışığında, gevrek malzemelerin, kırılma mekanizmasının dışında, sadece plastik deformasyona bağlı malzeme kaldırılması ile çok daha yüksek yüzey kalitesine sahip ve çok yüksek hassasiyette ürünler imal etmek gibi yenilikler gündeme gelmektedir. Sünek malzemelerin birçoğunda olumsuz makaslama (kayma) oluşumuna rağmen, iş parçası içinde çatlak yayılımı olmadan olumlu çapak oluşumları görülmüştür. Buna karşın, gevrek malzemelerin çoğunda çatlak ile birlikte olumsuz çapak oluşumu meydana gelmiştir. Sonuç olarak gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılmasında, kesici takım kırılmasının olma ihtimali yüksektir.

Gevrek malzemelerin işlenmesinde iki temel kural yerine getirildiğinde gevrek-sünek geçiş bölgesinin oluştuğu bilinmektedir. Bu şartlardan bir tanesi, deforme olmamış talaş kalınlığı takım uç yarıçapından küçük olmalı; bir diğeri ise, takım kesici kenar yarıçapı nano ölçekte işleme için yeterince küçük olmalıdır. Bu iki kural, aynı zamanda sünek modda nano ölçekte talaş kaldırma

için de gerekli olan şartlardır. Moleküler dinamik çalışmalarında da görülmektedir ki, talaş kaldırma genişliğinin az olması, kesici takım ucundaki hidrostatik basıncı arttırmaktadır, dolayısıyla da yüzey altı deformasyonlarını azaltmakta ve böylece gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesine olanak sağlamaktadır. Bunun yanında hidrostatik basınç üzerinde etkili olan faktörler; talaş açısının yönü ve büyüklüğü, iş parçasının kristal oryantasyonu, ilerleme hızının artması da, sünek rejimde talaş kaldırma için kritik kesme derinliğini azaltmaktadır. Araştırmalar neticesinde, kesici takım uç yarıçapı arttıkça, kesici takımın sürme ve perdelama kuvvetlerinin artması sebebiyle kesme kuvvetleri de artmaktadır. Çok küçük kesme derinliklerinde oldukça yüksek bir enerji, deformasyon için harcanmaktadır. Nano ölçekte talaş kaldırma çalışmalarında talaş kaldırma derinliğinin de bir teorik sınırı vardır. Buna göre, minimum talaş derinliği, kesici takım uç yarıçapından oldukça fazla bir biçimde etkilenmektedir ve uç yarıçapının 1/10 mertebesindedir.

Takım kenar yarıçapı ve kesme derinliğinin kesme ve itme kuvvetlerine, kuvvet oranına, özgül enerjiye ve yüzey altı deformasyonuna etkilerinin araştırılması sonucunda, kesici takım yarıçapına nazaran kesme derinliğinin daha önemli olduğu konvansiyonel talaş kaldırma yöntemlerinden farklı olarak, nano ölçekte talaş kaldırma yöntemlerinde bu durum, küçük kesme derinlikleri ve tek kristalli elmas takım için mümkün olan en küçük kenar yarıçapı nedeniyle önemli değildir. Araştırmalar neticesinde, dislokasyon oluşumunun özellikle yüksek kesme derinliklerinde meydana geldiği görülmüştür. Düşük kesici kenar yarıçapı değerlerinde kesme ve itme kuvvetleri, kesici kenar yarıçapı arttıkça artarken, yüksek takım yarıçapı değerlerinde bu kuvvetler daha az veya daha çok bağımsız hale gelmektedirler. Değişik uç yarıçaplı takımlarla yapılan modellemelerde, kesme derinliği ve uç yarıçapı oranı sabit tutularak yapılan denemelerde görülmektedir ki, kesme derinliğinin artmasıyla, bu orandan bağımsız olarak, kesme kuvvetlerinde artış ve özgül enerjide de düşüş olmaktadır.

Kesici takım körleşirse, yüksek hızlarda bu körleşmiş takımla işlemede ortaya çıkan kuvvetler, kör veya keskin takımla düşük hızlarda gerçekleştirilen kesme işlemi esnasında oluşan kuvvetlere nazaran önemli derecede yüksek olmaktadır. Bu nedenle, kesici takım keskin ve kesme hızı yüksek olmalıdır [29].

Nanometrik talaş kaldırmaya takım talaş açısının etkisinin incelenmesi çalışmalarında, aynı kristal oryantasyonuna sahip malzemeler arasında yapılan araştırma neticesinde, takım talaş açısı arttıkça talaş uzunluğu artmakta, buna karşın yüzey altı deformasyonları azalmaktadır. Kesme derinliği arttıkça, yüzey altı deformasyonları artmaktadır. Kesme ve itme kuvvetleri kesme kuvveti arttıkça artmaktadır. Buna karşın özgül enerji, kesme derinliği azaldıkça artmaktadır. Kesme ve itme kuvvetleri, itme kuvvetinin kesme kuvvetine oranı, özgül enerji ve yüzey altı deformasyonları, negatif talaş açısı arttıkça artmıştır. Özgül enerji değeri, konvansiyonel talaş kaldırmaya nazaran nano ölçekte talaş kaldırmada daha büyük çıkmıştır.

Nano ölçekte talaş kaldırma konusunda moleküler dinamik yöntemi kullanılarak yapılan modellemelerde, sıcaklığın etkisi de araştırılmıştır. Sıcaklık arttıkça, atomların kinetik enerjisi azalacağından ve atomlar arasındaki bağlar zayıflayacağından, malzemenin eşik potansiyeli azalacaktır. Sıcaklık arttıkça takım malzemesini oluşturan atomlar arasındaki bağlar zayıflayacağından, takım aşınması sıcaklığa bağlıdır. Takım aşınmasının temel mekanizması termo-kimyasal aşınmadır [12].

Nano ölçekte talaş kaldırmada kesme derinliği nanometre boyutundadır. Fakat kesici takımın ucuna etkiyen kayma gerilimi atomik bağ kuvvetlerine bağlı olarak çok yüksektir. Çelik gibi alışılmış metal malzemelerden yapılmış talaş kaldırma takımları ve aşındırıcı taşlama taşları, kesici ucun aşınmasının aşırı derecede artması nedeniyle, atom kümelerinin nano boyutta talaşlı işlenmesi için uygun değildir. Nano ölçekte talaşlı işlemede kullanılabilecek tek kesen ağızlı takımla elmas ile sınırlandırılmıştır [5]. Kesme kuvvetlerinin önemli bir parametresi olan kesici takım ucu yarıçapı, elmas malzemede 50 *nm* ve altında rahatlıkla elde edilebilmektedir [6].

Günümüzde nano ölçekte talaş kaldırma işlemi için geliştirilen ve bu konuda patenti alınmış olan bir başka araştırma konusu ise, iş parçası yüzeyindeki malzemenin nano boyutlarda buharlaşmaya neden olarak nano ölçekte işlemeyi sağlayan, bir veya daha fazla karbon nanotüp'den elde edilen elektron ışınım tekniğidir. Bu yöntemle iş parçası yüzeyinin işlenmesi, nanotüplerden buharlaştırma için gerekli olan güç miktarının eşik enerjisinden düşük olması yeterli olabilmektedir. Bu işlem için kullanılan aygıt, vakum sağlayıcı, nano pozisyonlandırıcı, iş parçası yüzeyinin ısıtılması için lazer ısıtıcısı ve seviye yükseltici gibi elemanlardan oluşmaktadır. Bu yöntemle elektrik iletkenliği olan metal ve polimerlerin, özellikle, silisyum

nitür, titanyum nitür, tungsten karbür, nikel, kobalt, altın, alüminyum, polikristalli elmas v.b. malzemelerin işlenebileceği tespit edilmiştir [98].

Nanoteknolojinin gelişmesiyle beraber, yeni, ısıl dayanımları ve sertlikleri nano ölçekte talaş kaldırma işlemi için uygun olan takımların geliştirilmesi devam etmekte ve nanometrik konum doğruluğu ve tekrarlanabilirlik sağlayan tezgahların gelişmesiyle beraber, nano ölçekte talaş kaldırma teknikleri de gelişmektedir. Aynı zamanda moleküler dinamik modelleme ile nano boyutta mekanizmaların ve etkilerin anlaşılmasına yönelik çalışmalar devam etmektedir.

Bilgisayarlar, materyaller, sensörler, enerji, haberleşme ve ilaç alanındaki nanoteknoloji-destekli gelişmeler ve tüm bunların birbirleriyle hiç umulmayan dinamik etkileşimleri yüzlerce yeni ürünün ve pazar uygulamalarının doğmasına yol açacaktır, -bunların çoğu, bugün pek çok kimsenin tahminlerinin ötesindedir. Nanoteknoloji'nin iş dünyasını tam manasıyla nasıl etkileyeceğini tahmin etmek, yapılabilecek bu tahminlerden daha da zordur.

Ulusal Bilim Vakfı'nın düzenlediği bir seminerde, nanoteknoloji uzmanlarının yaptığı bir araştırma, nanoteknoloji konusundaki muhtemel ticari uygulama türlerinin, önümüzdeki on beş ile yirmi yıl içinde büyük ihtimalle hayata geçeceğini ortaya çıkarmıştır. Yani, buradaki soru, nanoteknoloji'nin gerçekten var olup olmayacağı değil; ne zaman hayatımıza dahil olacaktır. Nanoteknoloji, modern endüstriyel spektrumu yeni gelişmelerle doldurup taşımaktadır. Üstelik yenilikler de her geçen gün daha çok göz önüne çıkmaktadır. Üstelik bundan on yıl sonra karşımıza çıkması muhtemel olarak adlandırılan gelişmeler, yepyeni ilerlemeler sayesinde sadece beş yıl sonra bile kapımızı çalıyor olabilecektir. Zira nanoteknoloji birçok yönden, sadece sıradaki büyük şey olmakla kalmayacaktır... nanoteknoloji her şey olacaktır [62].

KAYNAKLAR

- [1] Alaca, B. E., (2004), "Directed Nanowire Networks Through Self-Assembly", Micro and Nanotechnology Workshop, Koc University
- [2] Allen, M. P., (2004), "Introduction to Molecular Dynamics Simulation", John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Volume 23, 1-28
- [3] Altan, E., (2005), "Nanoteknoloji ve Nano Ölçekte Talaş Kaldırma-Bölüm I", TT Magazin Makale, Kasım/Aralık 2005, 88-96
- [4] Altan, E., (2005), "Nanoteknoloji ve Nano Ölçekte Talaş Kaldırma-Bölüm II", TT Magazin Makale, Ocak/Şubat 2006, 87-94
- [5] Altan, E. ve Arıkan, A., (2005), "Nano Ölçekte Talaş Kaldırma", Mühendis ve Makina, Cilt:46, Sayı:550
- [6] Arıkan A., (2004), "Nano Ölçekte Talaş Kaldırma", Yüksek Lisans Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
- [7] Atangüç, G. ve Demir, A. G., (2005), "Nanoteknoloji ve Uygulama Alanları", Bitirme Tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği
- [8] Bozkaya, Y., (2005), "Nanoteknoloji", Anadolu Üniversitesi İleri Teknolojiler Araştırma Birimi Nanoteknoloji Bilim Dalı
- [9] Chandra, A., Bastawros, A., Morris, J. R., Biswas, R. ve Ye Y. Y., (2003), "Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper", Institute of Physics Publishing, Nanotechnology 14, 390-396
- [10] Chen, H., Hagiwara, I., Zhang, D. ve Huang T., (2005), "Paralel Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Grinding", Transactions of JSCES
- [11] Cheng, K., Luo, X., Guo, X. ve Holt R., (2003), "An investigation on the mechanics of nanometric cutting and the development of its test-bed", Int. J. Prod. Res., Vol. 41, No. 7, 1449-1465
- [12] Cheng, K., Luo, X., Ward, R. ve Holt R., (2003), "Modeling and simulation of the tool wear in nanometric cutting", Wear 255, 1427-1432
- [13] Cheung, C. F., (2003), "Influence of cutting friction on anisotropy of surface properties in ultra-precision machining of brittle single crystals", Scripta Materialia 48, 1213-1218
- [14] Choi, T. Y., (2002), "Femtosecond Pulsed Laser Processing of Electronic Materials: Fundamentals and Micro/Nano-scale Applications", University of California, Berkeley
- [15] Erkut, H., (1992), Yönetimde Simülasyon Yaklaşımı, İrfan Yayınevi, İstanbul, s.1,2
- [16] Esen, H. Ö., (1994), İletme Yönetiminde Sistem Yaklaşımı, Avcıol Basım Yayın, İstanbul, s.27
- [17] Fang, F. Z., (1998), "Nano-turning of single crystal silicon", Journal of Materials Processing Technology 82, 95-101

- [18] Fang, F. Z., Wu, H. ve Liu Y. C., (2005), "Modelling and experimental investigation on nanometric cutting of monocrystalline silicon", *International Journal of Machine Tools&Manufacture* 45, 1681-1686
- [19] Gonsalves, K. E., He, W., Poker, D. B. ve Batina N., (2003), "Micro/nano machining of polymeric substrates by ion beam techniques", *Microelectronic Engineering* 65, 153-161
- [20] Gürdilek, R., (2001), "Nanoteknoloji", *Bilim ve Teknik*, Aralık, 4-5
- [21] Han, X. S., Lin, B., Yu, S.Y. ve Wang S. X., (2002), "Investigation of tool geometry in nanometric cutting by molecular dynamics simulation", *Journal of Materials Processing Technology* 129, 105-108
- [22] Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H. ve Ohmori G., (1991), "An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Tool-Work Interaciton in Diamond Turning", *Annals of the CIRP*, Vol.40, 551-554
- [23] Ikawa, N., Shimada, S. ve Tanaka H., (1992), "Minimum thickness of cut in micromachining", *Nanotechnology* 3 (1), 6-9
- [24] Inamura, T., Takezawa, N. ve Kumaki Y., (1993), "Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting", *CIRP Ann.* 42 (1), 79-82
- [25] Ikawa, N., Mizumoto, H., Arii, S., Yoshimoto, A. ve Shimizu T., (1996), "Twistroller friction drive for nanometer positioning-simplified design using ball bearings", *CIRP Ann. Manuf. Technol.* 45 (1), 501-504
- [26] Jackson, M. J. ve Robinson, G. M., (2005), "A review of micro and nanomachining from a materials perspective", *Journal of Materials Processing Technology* 167, 316-337
- [27] Kan, van J.A., Bettiol, A. A. ve Watt F., (2003), "Proton Beam Nano-machining: End Station Design and Testing", *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Volume 777
- [28] Karayağın, İ. İ., (1993), *Yöneylem (Hareket) Araştırması Kantitatif Planlama ve Karar Verme Yöntemleri*, 3. Baskı, Menteş Yayınevi, İstanbul, s.279
- [29] Kim, J. D. ve Moon, C. H., (1996), "Study on the cutting mechanism of micro-cutting using molecular dynamics", *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* 11 (5), 319-324
- [30] Koç, M. B., (2003), "Nanotüpler", Bitirme Tezi, Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi
- [31] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (1998), "Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach", *Wear* 219, 84-97
- [32] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., Khajavi A. N., (1998), "A new method for molecular dynamics simulation of nanometric cutting", *Philosophical Magazine B*, Vol. 77, No. 1, 7-26
- [33] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (1999), "Some aspects of machining with negative-rake tools simulatng grinding: a molecular dynamics simulation approach", *Philosophical Magazine B*, Vol. 79, No. 7, 955-968
- [34] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (2000), "M.D. Simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum-effect of crystal orientation and direction of cutting", *Wear* 242, 60-88

- [35] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (2000), "MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum", *Wear* 240, 113-143
- [36] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (2001), "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", *Materials Science and Engineering A311*, 1-12
- [37] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (2001), "Molecular dynamics simulation of the nanometric cutting of silicon", *Philosophical Magazine B*, Vol. 81, No.12, 1989-2019
- [38] Komanduri, R., Chandrasekaran, N. ve Raff, L. M., (2001), "Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single-crystal cubic metals at nanolevel", *International Journal of Mechanical Sciences* 43, 2237-2260
- [39] Komanduri, R., Narulkar, R. ve Raff, L. M., (2004), "Monte Carlo simulation of nanometric cutting", *Philosophical Magazine*, Vol. 84, No. 11, 1155-1183
- [40] Kuş, P., (1999), *Simülasyon Uygulamaları*, Kara Harp Okulu Öğretim Başkanlığı
- [41] Li, W. J., (2003), "MEMS and Nanotechnology: How and Why?", Summer Course on Railway Engineering
- [42] Li, X. P., Rahman, M. ve He, T., (2005), "Tool wear characteristics and their effects on nanoscale ductile mode cutting of silicon wafer", *Wear* 259, 1207-1214
- [43] Li, X. P., Cai, M. B. ve Rahman, M., (2006), "Study of the mechanism of nanoscale ductile mode cutting of silicon using molecular dynamics simulation", *International Journal of Machine Tools&Manufacture* 47, 75-80
- [44] Lin, B., Yu, S. Y. ve Wang, S. X., (2003), "An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding", *Journal of Materials Processing Technology* 138, 484-488
- [45] Lin, Z. C. ve Huang, J. C., (2004), "A nano-orthogonal cutting model based on a modified molecular dynamics technique", *Institute of Physics Publishing, Nanotechnology* 15, 510-519
- [46] Marinescu, I. D., (2004), "Nanomachining Bridges Precision Engineering and Nanotechnology", *Innovation*, Vol. 4, No. 3, 25-26
- [47] Ni, J., (2004), "Nanoscale Machining and Measurement", Research Project, University of Michigan College of Engineering
- [48] Oral, A., (2005), "Taramalı Uç Mikroskobu: Atomlardan Manyetik Girdaplara Görüntüleme", *Bilim Ve Teknik*, Ağustos 2005, 17-18
- [49] Özkan, C. S., (2004), "Nanocarbon Materials for Active Electronics and Bio-Nanotechnology", *Micro and Nanotechnology Workshop*, Koc University (<http://www.engr.ucr.edu/~cengizlab>)
- [50] Öztürk, L., (1997), "Simülasyon Tekniğinin İncelenmesi ve Bir Monte Carlo Çalışması", Yüksek Lisans Tezi, Marmara Üniversitesi Sosyal Bilimler Enstitüsü
- [51] Partridge, P. G., Fookes, A., Nicholson, E. D., Pearce, T. ve Meaden, G., (1997), "Nanoscale grinding of ceramics using diamond fibres", *Diamond and Related Materials* 6, 893-897

- [52] Poole, C. P. ve Owens, F. J., (2003), "Introduction to Nanotechnology", 1.Edition Academic Press, New York
- [53] Service, R. F., (2000), "Atom-Scale Research Gets Real", Science, Çeviri: Raşit Gürdilek, (2001), Umutla Kabusun Arasında Nanoteknoloji, Bilim ve Teknik, Ocak, 40-43
- [54] Shimizu, J., Zhou, L. B. ve Eda, H., (2002), "Simulation and experimental analysis of super high-speed grinding of ductile material", Journal of Materials Processing Technology 129, 19-24
- [55] Sumomogi, T., Nakamura, M., Endo, T., Goto, T. ve Kaji, S., (2002), "Evaluation of surface and subsurface cracks in nanoscale-machined single-crystal silicon by scanning force microscope and scanning laser microscope", Materials Characterization 48, 141-145
- [56] Şahin, O., (2001), "Moleküler Dinamik Simülasyon Metodu ile Li_n Klastırlarının Yapısal Özelliklerinin İncelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
- [57] Şahin, Ş., (2006), "NVT-Monte Carlo Simülasyonu ile Sıvı Kristal Ortamın Analizi", Yüksek Lisans Tezi, Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
- [58] Şarer, B., Hançerlioğulları, A., Übeyli, M., (2004), "Nükleer Hesaplamalarda Monte Carlo Yönteminin Kullanımı", Çalışma Projesi, Gazi Üniversitesi
- [59] To, S., Lee, W. B. ve Chan, C. Y., (1997), "Ultraprecision Diamond Turning of Aluminium Single Crystals", Journal of Materials Processing Technology 63, 157-162
- [60] TÜBİTAK, (2004), "Nanobilim ve NanoTeknoloji Stratejileri", Vizyon 2023 Projesi, Nano Teknoloji Strateji Grubu
- [61] Tülbentçi, K., Kaluç, E. ve Sarı, N., (1999), Talaşlı Şekil Verme Ders Notları (İmal Usulleri-IV), Kocaeli Üniversitesi Yayınları No:12, Mühendislik Fakültesi Yayını:10
- [62] Uldrich, J. ve Newberry, D., (2005), Sıradaki Büyük Şey Aslında Çok Küçük, Çeviri: Tolga Alıcı, Ledo Yayınları 5
- [63] Wong, T. B., Mengüç, P. M. ve Vallance, R. R., (2004), "Nano-Scale Machining Via Electron Beam and Laser Processing", Journal of Heat Transfer, Volume 126
- [64] Yan, J., Syoji, K., Kuriyagawa, T. ve Suzuki, H., (2002), "Ductile regime turning at large tool feed", Journal of Materials Processing Technology 121, 363-372
- [65] Yaniv, Z., (2005), "The Symbiotic Relationship of Nanotechnology and Creativity", Applied Nanotech Inc.
- [66] Yılmaz, N., (2006), "Sıvı Kristal Yapıların Lennard-Jones Potansiyeli Kullanarak NPT-Monte Carlo Simülasyonu ile İncelenmesi", Yüksek Lisans Tezi, Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
- [67] Yuan, Z. J., Zhou, M. ve Dong, S., (1996), "Effect of diamond tool sharpness on minimum cutting thickness and cutting surface integrity in ultraprecision machining", J. Mater. Process. Technol. 62 (4), 327-330
- [68] Zhang, L. ve Tanaka, H., (1997), "Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale-a molecular dynamics analysis", Wear 211, 44-53

İNTERNET KAYNAKLARI

- [69] <http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/images/stm.gif>
- [70] <http://www.azonano.com>
- [71] <http://www.cordis.europa.eu/nanotechnology/home.html>
- [72] http://www.cranfield.ac.uk/sims/mem/dave_s/tetraform.html
- [73] http://www.eng.nus.edu.sg/EResnews/0402/sf/sf_3.html
- [74] <http://www.eng.rpi.edu/dept/materials/COURSES/NANO/shaw/BIGafm.gif>
- [75] <http://www.enm.blogcu.com/1179385/>
- [76] <http://www.foresight.org>
- [77] <http://www.gyte.edu.tr/ebulten/sayi2/nanoteknoloji.htm>
- [78] <http://www.istanbul.edu.tr/fen/fizik/ssp/nanoyapi.htm>
- [79] <http://www.msu.edu/~hungerf9/gear1.jpg>
- [80] <http://www.nano.bilkent.edu.tr/>
- [81] <http://www.nano.tech.org.uk>
- [82] <http://www.nanotechcafe.com/>
- [83] <http://www.nanoteknoloji.net/>
- [84] <http://www.relisoft.com/Science/Physics/images/oscillator.gif>
- [85] <http://www.sciam.com/nanotech>
- [86] <http://www.students.sabanciuniv.edu/~enisf/nanoteknoloji.htm>
- [87] http://www.upm.pi.titech.ac.jp/capsule_eng.html
- [88] <http://www.zyvex.com/nano>
- [89] <http://www.ostp.gov/nstc/html/iwgn/IWGN.Public.Brochure/>
- [90] <http://yunus.hacettepe.edu.tr/~dogan/40.html>
- [91] www.kimyasal.net
- [92] www.nanoworldusa.com
- [93] www.nanosight.com
- [94] www.research.ibm.com/atomic/nano/roomtemp.html
- [95] www.science.unsw.edu.au/research/nanotalk_science2.pdf
- [96] <http://www.msu.edu/~hungerf9/gear1.jpg>
- [97] <http://www.eng.rpi.edu/dept/materials/COURSES/NANO/shaw/BIGafm.gif>
- [98] <http://www.uspto.gov/patft/index.htm>

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı	Kerem Bartık	
Doğum tarihi	22.08.1981	
Doğum yeri	İstanbul	
Lise	1995-1999	Haydarpaşa Süper Lisesi (Not: 4,06/5)
Lisans	2000-2004	Kocaeli Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Makine Mühendisliği Bölümü (Not: 72/100)
Yüksek Lisans	2004-....	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Makine Müh. Anabilim Dalı, Makine Malzemesi ve İmalat Teknolojisi Anabilim Dalı

Staj yaptığı kurum(lar)

2003-Haziran	Onay Set ve Kalıp Ekipmanları Tic. Aş., İstanbul (4 Ay)
2004-Haziran	Boral Boru Profil ve Tic. Ltd. Şti., Kocaeli (4 Ay)

Çalıştığı kurum(lar)

2004-2005	Aslar Pres Döküm Sanayi ve Tic. Aş., İstanbul Üretim Planlama Görevlisi
2005-Haziran	Morey's Piers, ABD, Bakım Onarım Elemanı (5 Ay)
2005-2006	Transport Tesisleri Tic. ve Ltd. Şti., Gebze Üretim Planlama Görevlisi