

154206

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA

Makine Müh. Aytuğ ARIKAN

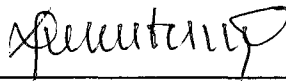
**Fen Bilimleri Enstitüsü
Makine Mühendisliği Anabilim Dalı
İmal Usulleri Programı'nda Hazırlanan**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

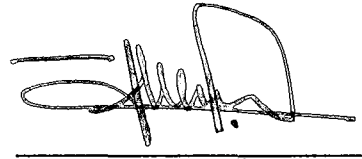
Tez Savunma Tarihi : 01 Ekim 2004
Tez Danışmanı : Prof. Dr. Erhan ALTAN, Yıldız Teknik Üniversitesi
Jüri Üyeleri : Prof. Nurullah Gültekin, Yıldız Teknik Üniversitesi
: Prof. Dr. Mesut Özgürler, Yıldız Teknik Üniversitesi



Prof. Dr. Erhan ALTAN



Prof. Nurullah Gültekin



Prof. Dr. Mesut Özgürler

İSTANBUL, 2004

İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER.....	ii
SİMGE LİSTESİ.....	iv
KISALTIMA LİSTESİ.....	vi
ŞEKİL LİSTESİ.....	vii
ÇİZELGE LİSTESİ.....	ix
ÖNSÖZ	x
ÖZET	xi
ABSTRACT.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Nanoteknoloji Uygulamaları	2
1.2. Nano Ölçekte İmalat.....	4
1.3. Nano Ölçekte Görüntüleme ve Metroloji.....	4
2. NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA.....	7
2.1. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Mekanığı.....	9
2.1.1. Malzeme İçindeki Kusurlara ya da Hatalara Bağlı İşleme Mekanizması	11
2.1.2. Hatasız Kristal Yapıların Teorik Kayma Dayanımı	13
2.1.3. Hatasız Kristal Yapıların Atomik Boyutta İşlenmesi.....	16
2.1.4. Atomik Kümelerin Nano Ölçekte İşleme Mekanizmaları.....	17
2.1.5. Sünek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesi	19
2.1.6. Sürtünme Yoluyla Abrazif Aşınma İle Talaş Kaldırma.....	20
2.1.7. Gevrek Malzemelerde Tane Altı Yapıların Yüksek Hassasiyette İşlenmesinde Peierls Gerilimi	22
2.1.8. Organik Polimerlerin Moleküler Sınır Hatalarına Bağlı Tane Altı İşlemleri.....	23
2.2. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Yöntemleri.....	23
2.2.1. Gevrek Malzemelerin Kayma Mekanizmaları İle Sünek Rejimde İşlenmesi	25
2.2.2. Nano Ölçekte Talaş Kaldırmada Kesici Takım Malzemesi Özellikleri	28
2.2.3. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşlemleri İçin Tezgah Özellikleri.....	29
2.3. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar	29
3. MOLEKÜLER DİNAMİK MODELLEME	38
3.1. Moleküler Dinamik Modellemenin Temelleri	38
3.1.1. Faz Uzayı Yörüngeleri	38
3.1.2. Dinamik Sistemlerin Sınıflandırılması.....	41
3.1.2.1. Bütünleşik Sistemler.....	42
3.1.2.2. Ayrık Sistemler.....	44
3.1.3. Periyodik Sınır Şartları (PBC).....	49
3.1.4. Korunum İlkeleri	49
3.1.4.1. Kütle Korunumu.....	50
3.1.4.2. Toplam Enerji Korunumu	50
3.1.4.3. Lineer Momentum.....	50
3.1.4.4. Açısal Momentum	50
3.2. Sonlu Fark Yöntemleri	51
3.2.1. Bir Prototip: Euler'in Metodu	52

3.2.2.	Hatalar	53
3.2.3.	Algoritmik Kararlılık.....	55
3.2.4.	Moleküler Dinamik İçin Algoritmalar	56
3.2.4.1.	Verlet Algoritması.....	56
3.2.4.2.	Genel Öngörücü-Düzeltilici Algoritmalar.....	57
3.2.4.3.	Gear PEC Algoritması.....	58
3.2.5.	Enerji Korunumu.....	60
3.2.6.	Hesaplanan Yörüngelerin Güvenilirliği	61
3.3.	Atomlararası Potansiyel Modelleri.....	61
3.3.1.	İki-cisim Potansiyelleri.....	63
3.3.2.	Gömülü Atomlar Modelleri (GAM).....	64
3.4.	Moleküler Dinamik Adımları.....	65
3.4.1.	Başlangıç Süreci	65
3.4.1.1.	Önkoşullar	66
3.4.1.2.	Atomlar İçin Başlangıç Koşulları.....	68
3.4.2.	Dengeleme Süreci.....	69
3.4.2.1.	Dengeye Yaklaşma.....	69
3.4.2.2.	Dengenin Belirlenmesi	70
3.4.3.	Yapıların Katı-Sıvı Analizi	71
3.5.	MD Kullanılarak Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar.....	72
4.	SONUÇ	87
	KAYNAKÇA	91
	ÖZGEÇMİŞ.....	96

SİMGE LİSTESİ

δ :	İşleme enerjisi yoğunluğu
ω :	Özel talaş kaldırma enerjisi
τ_s :	Kayma dayanımı gerilimi
δ_s :	Özgül kesme enerjisi yoğunluğu
τ_{th} :	Teorik kayma gerilimi
μ :	Rijitlik modülü, kayma modülü
U :	Atomik aktivasyon enerjisi
U_0 :	Potansiyel eşik enerjisi
b :	Atomik uzaklık
d :	Kayan katmanlar arasındaki uzaklık
a :	Atomik uzaklık
a_T :	Temas alanı yarıçapı
τ_{max} :	Maksimum kayma gerilimi
P_i :	Dalma yükü
R_i :	Dalıcının küresel ucunun yarıçapı
E :	Boyuna elastiklik modülü
ν :	Poisson oranı
P_f :	Makaslama kaymasını başlatacak yükleme kuvveti
σ_{max} :	Maksimum radyal çekme gerilimi
σ_{th} :	Maksimum radyal çekme gerilimi
P_a :	Ayrılma için dikey yük
τ_c :	Peierls Gerilimi
b :	Burgers vektörü
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
d_{cc} :	Kırılma başlangıcı için kritik nüfuz derinliği
K_c :	Kırılma tokluğu
R_a :	Ortalama yüzey pürüzlülüğü
R_{max} :	Maksimum yüzey pürüzlülüğü
d_c :	Kritik kesme derinliği
N :	Atom sayısı
r_0, r_{eq} :	Kütle denge pozisyonu
γ :	Yay sabiti
E_k :	Kinetik enerji
E_T :	Toplam enerji
ω :	Salımın frekansı
H :	Hamiltonian
H_0 :	Bütünleşik Hamiltonian
H_p :	SapmışHamiltonian
V :	Sistem Hacmi
B :	Açısal momentum
t_0 :	Başlangıç anı

Δ_t :	Zaman adımı
$\langle E_k \rangle$:	Ortalama kinetik enerji
k_B :	Boltzmann sabiti
T :	Mutlak sıcaklık
U :	Potansiyel enerji
C :	Normalizasyon katsayısı
v :	Parçacık hızı
$\langle T \rangle$:	Denge sıcaklığı
H_x :	Boltzmann H fonksiyonu x komponenti
Ω :	Faz uzayı hacmi
\hat{A} :	Herhangi bir A değeri
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 kübk kap kenar uzunluğu
ρ^* :	Normalize kübk kap paketleme yoğunluğu
λ :	Pozisyonel düzen parametresi
$g(r)$:	Radyal dağılım fonksiyonu
δ_D :	Dirac delta fonksiyonu
r :	Kesici takım uç yarıçapı
w_c :	Talaş kaldırma genişliği

KISALTMA LİSTESİ

UPM :	Ultra-Precision Machining
MD :	Molecular Dynamics
v.d.:	Ve diğerleri
MEMs :	Micro-Electro-Mechanics
TEM :	Transmission Electron Microscope
SEM :	Scanning Electron Microscope
SPM :	Scanning Probe Microscope
STM :	Scanning Tunneling Microscope
AFM :	Atomic Force Microscope
SPDT :	Single Point Diamond Turning
CNC :	Computer Numerical Control
LLNL :	Lawrence Livermore National Laboratory
PMMA :	Polymethylmethacrylate
FEM :	Finite Element Method
ODHO :	One Dimensional Harmonic Oscillator
KAM:	Kolmogorov-Arnold-Moser Motion
KH :	Kesme Hatası
YH :	Yuvarlama Hatası
NVT :	System of constant Number, Volume, Temperature of atoms
NEV :	System of constant Number, Energy, Volume of atoms
PEC :	Predict-Evaluate-Correct
GAM :	Gömülü Atom Modeli
ARMD :	Area-Restricted Molecular Dynamics
LRMD :	Length Restricted Molecular Dynamics
SF :	Side flow
CC :	Chip count
SC :	Subsurface Compression
SZC :	Shear Zone Compression
et.al.	Ve diğerleri

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1. Bakır üzerine yerleştirilmiş demir atomlarının görüntüsü	3
Şekil 2.1. Yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları	8
Şekil 2.2. Hocken, Wei Gao v.d. nano ölçekte talaş kaldırma için tasarladıkları deneysel nano ölçekte talaş kaldırma tezgahı.....	9
Şekil 2.3. Alaşım-sız çeliklerde talaş kalınlığı - kayma gerilimi ilişkisi	10
Şekil 2.4. Malzemelerde hata dağılımları ve işleme bölgeleri	11
Şekil 2.5. Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları	12
Şekil 2.6. Bölgesel yük altındaki malzemelerin bozulmaları	14
Şekil 2.7. Atomik makaslama kayması ve kayma için atomik bağlanma potansiyeli.....	15
Şekil 2.8. Katı yüzey etkisi göz önünde bulundurularak elde edilmiş iki atomun arasındaki modifiye Morse serbest potansiyel enerjisi	17
Şekil 2.9. Küre ve işparçasının teması sonucu oluşan gerilim dağılımı	18
Şekil 2.10. Statik sürtünmenin sürtünme ve aşınmaya dayalı mekanizması	20
Şekil 2.11. Cam, Seramik, Gibi Gevrek Malzemelerin Düzlem Leplenmesi ve Parlatılması..	24
Şekil 2.12. Elmas aşındırıcı taneyle gevrek işparçasının sünek rejimde işlenmesi	25
Şekil 2.13. Çok kesen ağızlı kesici takımlarla malzeme kaldırma hızı karşılaştırması.....	26
Şekil 2.14. İlerleme hızının sünek rejimde işleme için kritik nüfuz derinliğine etkisi.....	27
Şekil 2.15. Boyut etkisine bağlı talaş kaldırma modeli	28
Şekil 2.16. Mn-Zn ferrit tek kristal malzemenin yüzeyinin optik mikrografileri.....	30
Şekil 3.17. UPM ile özgül talaş kaldırma kuvvetinin kesme derinliğine göre değişimi	31
Şekil 2.18. Ueda v.d. kullandıkları UPM	32
Şekil 2.19. Talaş oluşumunun deneysel ve FEM analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları	33
Şekil 2.20. Görelî kesme uzunluğuna bağlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması	33
Şekil 2.21. Cam işparçasında çatlak oluşumsuz bitirme işlemiyle elde edilen yüzey	34
Şekil 2.22. UPM ile elde edilen talaşların SEM görüntüleri	36
Şekil 2.23. (111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişimi	36
Şekil 3.1. Bir Boyutlu ODHO'nun hareketi	39
Şekil 3.2. $(2mET)1/2$ ve $(2ET/\gamma)1/2$ yarı eksenlerine sahip faz uzayı yörüngesi.....	40
Şekil 3.3. Dinamik sistemlerin sınıflandırılması ve faz uzayında hareket hiyerarşisi.....	41
Şekil 3.4. İki serbestlik derecesine sahip hareketin yay sabitleri oranına bağlı olarak faz uzayı yörüngeleri.....	43
Şekil 3.5. Kararlı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları	45
Şekil 3.6. Faz uzayı içine sıkışmış faz noktası örneği	48
Şekil 3.7. ODHO için Euler yönteminin kullanılması.....	53
Şekil 3.8. Kesme ve yuvarlama hatalarının sonlu fark algoritmasına etkisi (Haile, 1991)	54
Şekil 3.9. Normalize Lennard-Jones potansiyeli ve kuvvetinin uzaklığa göre değişimi.....	64
Şekil 3.10. Belak v.d. yapmış oldukları çalışmada dalıcı altında oluşan deformasyon ve dalma boşluğundaki sağ-sol asimetrisi.....	72
Şekil 3.11. Farklı kristal yönelmelerinde ortaya çıkan işparçası deformasyonları.....	73
Şekil 3.12. Ikawa v.d. göre talaş kaldırma parametrelerinin kuvvet ve özgül enerjiye ekileri	74
Şekil 3.13. Bakır malzemenin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu	75
Şekil 3.14. Nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları	76
Şekil 3.15. Silisyumun nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma paterni.....	77
Şekil 3.16. Retsch ve Inasaki'nin nano ölçekte talaş kaldırma işleminde tane sınırlarının etkilerini inceledikleri moleküler dinamik modeli	78
Şekil 3.17. Atomistik kayma sisteminde deformasyon rejimlerinin değişimi, takım sağdan sola ilerlemektedir	79
Şekil 3.18. Çıkış bölgesinde çapak oluşumu ve bozulmalar	82

Şekil 3.19. İki farklı kesme derinliğinde oluşan atomların dağılımı.	83
Şekil 3.20. Yana akış, talaş miktarı, yüzeyaltı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının w_c/dc oranına bağlı dağılımları.....	84
Şekil 3.21. Değişik kesme derinliklerinde yapılan nanometrik kesme MD simülasyonları.....	85
Şekil 3.22. Değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları.....	85
Şekil 3.23. Tanenin taşlama anındaki malzeme yapısındaki oluşumlar.....	86



ÇİZELGE LİSTESİ

Çizelge 1.1. Takım Tezgahları ve Takım Pozisyonlama Ekipmanları ile Ölçüm Cihazlarının ve Veri İşleme Ekipmanlarının Çözünürlüğü ya da Pozisyonlama Hassasiyeti.....	6
Çizelge 3.1. Moleküler Dinamik Simülasyonlarında Kullanılan Birim Sistemi	66
Çizelge 3.2. Talaş Kaldırma Parametrelerinin Yüzey Kalitesine ve Yüzeyaltı Deformasyonuna Etkisi, Talaş Kaldırma Hızı: 200 m/s (Ikawa, 1993).....	75
Çizelge 3.3. Alüminyumun Farklı Kristal Oryantasyonlarında ve Kesme Yönlerinde Çeşitli Kesme Derinliklerindeki Kuvvetlere Ve Özgül Enerjiye Etkileri (Komanduri, 2000c)	81



ÖNSÖZ

İnsanoğlunun gelişme dürtüsü, 1960'lı yılların başında kuantum fizikçilerin toplu iğne başına yirmidört ciltlik bir ansiklopediyi kaydetme gibi o gün için ütöpik görülen fikirlerin gerçekleştirilmesine yol açmakta. Bugün artık özel tekniklerle 24 ciltlik ansiklopedi rahatlıkla bir toplu iğne başına kaydedilebilmekte.

Böyle ileri teknoloji uygulamalarını konvansiyonel tekniklerle yapmak, gerek kesinlik gerekse de verimlilik açısından mümkün olmamakta. Yüksek teknolojinin teorik temellerini uygulamaya dökmek için, yine yüksek teknolojiden faydalanarak konvansiyonel tekniklerin ötesinde, çok yüksek hassasiyette ve kesinlikte işlemler geliştirmek gerekmektedir.

Bu gereksinimleri karşılamak için yüksek teknolojiyle bütünleşik olarak gelişen "nanoteknoloji" giderek "geleceğin teknolojileri" tanımını almakta. Artık hemen hemen her uygulama nanoteknolojik açıdan ele alınmakta. Antibiyotik ilaçların olumsuz yan etkilerini göstermeyen doktor nano-robotlar, kuantum bilgisayarları, karbon nano-tüpleri bu yaklaşımın ürünleri olarak tasarlanmakta ve uygulamaya geçirilmekte.

1970'li yıllarda, mikro-işleme uygulaması olarak ele alınan ve mikro ölçekte talaş kaldırma ilkeleriyle incelenen yüksek hassasiyette işleme (UPM) için, günümüzde ilerleme ve kesme derinliği gibi işlem parametrelerinin nanometrik boyutta olabilmesi ve işlem bölgesinin atomik şartlara maruz kalması sebebiyle, makro ve mikro ölçekteki mekanizmalar yetersiz kalmakta, ayrıca nano ölçekte talaş kaldırma tekniklerinin de ele alınması gerekmektedir. Bu sebeple, yüksek hassasiyette işlemenin incelenmesi, mikro ve nano ölçekte talaş kaldırma olguları birlikte kullanılarak ifade edilmektedir.

Bu çerçevede ele alınan tezde, ilk bölümde nanoteknoloji ve nanoteknoloji uygulamaları ele alınacak, nano ölçekte imalat ve görüntüleme teknikleri tanıtılacaktır. İkinci bölümde, nano ölçekte talaş kaldırma mekaniği, nano ölçekte talaş kaldırma yöntemleri ele alınacak ve günümüze kadar yapılmış uygulamalar değerlendirilecektir. Üçüncü bölümde, nano ölçekte talaş kaldırma olgusunun atomik boyutta teorik olarak incelenebilmesi ve görselleştirilebilmesi amacıyla kullanılan moleküler dinamik uygulamaları ele alınacak ve moleküler dinamiğin temel esasları verilecektir. Son bölümde moleküler dinamik yöntemi kullanılarak elde edilen sonuçlar tartışılacaktır.

Mekaniğe değişik bir bakış açısı getiren bu tekniğin, ileride daha geniş kapsamlı uygulamaları için altyapı oluşturmasını umut ettiğim bu çalışmada emeği geçen Prof. Dr. Erhan Altan'a, tüm İmal Usulleri Programı öğretim üyeleri ve araştırma görevlisi arkadaşlarıma ve bir an olsun desteklerini eksik etmeyen aileme teşekkür ederim.

ÖZET

Son 30 yılda teknolojideki gelişmelerin paralelinde gelişen nano ölçekte talaş kaldırma teknikleri, nano ölçekte mekanizmaların atomik etkilere maruz kalması sebebiyle, makro ve mikro ölçekteki yapılardan farklı olarak ele alınmaktadır. Nano ölçekte talaş kaldırma sırasında, malzeme kristal yapısı içerisinde noktasal hataların dağılımlarının sifira yaklaşması sebebiyle, kesme kuvvetleri işparçası kristal yapısı içindeki çok büyük atomik bağ kuvvetlerini yenmek zorunda kalırlar. Atomik yapıların süreksizlikleri sebebiyle de bu kesme kuvvetlerini ve özgül kesme enerjilerini sürekli ortamlar mekaniği teknikleriyle hesaplamak mümkün olmamaktadır.

Bu çalışmada; nanoteknolojinin günümüzdeki yeri ve önemi ele alınmış, nano ölçekte talaş kaldırma incelenmiş, deneysel çalışmalar ve moleküler dinamik esaslı modellemeler literatür esaslı incelenmiş ve günümüze kadar elde edilen sonuçlar irdelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Nano Ölçekte Talaş Kaldırma, Yüksek Hassasiyette İşleme, Moleküler Dinamik



ABSTRACT

Nano scale machining techniques, that have been developed parallel to advances in nanotechnology in the last 30 years, are studied differently from the macro or micro scale structures, because nano scale structures are under atomic effects. During nano scale machining, the distribution of point defects are accumulated to zero, therefore the cutting forces must withstand against the atomic bonding forces in the crystal structure of the workpiece. Because of the discontinuity of the atomic structures, these cutting forces and the specific cutting energies cannot be calculated by means of continuum mechanics.

In this work; the situation and importance of nanotechnology in today, are given, nano scale machining are investigated, experimental works and models based on molecular dynamics are devoted literally and the results until today are examined.

Keywords: Nano-Scale Machining, Ultra-Precision Machining, Molecular Dynamics



1. GİRİŞ

Richard Feynman, 1959 yılında okuduğu bildirisinde (Feynman, 1959), o günün geçerli fizik kuramlarıyla, atomik boyuttaki işlemlerin mümkün olabirliğine fakat güncel tekniklerin bu beceriden yoksunluğuna değinmiştir. O günün şartlarına göre hayal ürünü görülen bu yaklaşım, nanoteknolojinin ortaya çıkışına öncülük etmekle kalmamış, ayrıca nano ölçekte ve atomik boyutta işleme tekniklerinin ortaya çıkış zamanlamasını tam olarak ortaya koymuştur.

Nano, bir büyüklüğün 10^{-9} katı olarak tanımlanır. 1 nm metrenin 10^9 'da birine, ortalama bir insan saç kılının yaklaşık yüzbinde birine ve hidrojen atomunun çapının 10 katına eşittir. Normal bir insanın gözü odaklanarak en fazla 20 μm 'yi (20000 nm) çözümleyebilir. Yeni teknoloji transistörler 90 nm boyuta kadar küçülmüşlerdir ve grip virüsünün çapı yaklaşık 100 nm kadardır. Ayrıca günümüzde nanoteknoloji, 1 nm deforme olmamış talaş kalınlığına kadar talaşlı işleme imkan verecek şekilde gelişmiştir.

Feynman'dan 15 yıl sonra Taniguchi, ilk defa nanoteknoloji terimini kullanan kişi olmuştur. Taniguchi'ye göre nanoteknoloji: "nanometre altı çözünürlük ile nanometrik hassasiyette pozisyon kontrol, boyutsal ölçüm ve malzeme işleme teknolojileriyle bütünleşik işleme sistemleri" olarak tanımlanır (Taniguchi, 1983). Yine de günümüzde nanoteknoloji için tam bir tanım yoktur. Avrupa ve Amerika'da nanoteknoloji atomik boyut olgusu bilimi olarak tanımlanır. Fakat atomik boyut olgusunun ve işleminin temellerini anlama adına yapılan bu çalışmaları 'nanobilim' olarak adlandırmak daha doğrudur. Corbett v.d. yapmış olduğu daha kapsamlı tanıma göre nanoteknoloji "boyutu 100 nm'den küçük olan ve istenilen fonksiyonel performansı sağlamak için gerekli yapıların çalışmaları, gelişimi ve malzemelerin, araçların ve sistemlerin işlenmesi" olarak açıklanmıştır (Corbett, 2000).

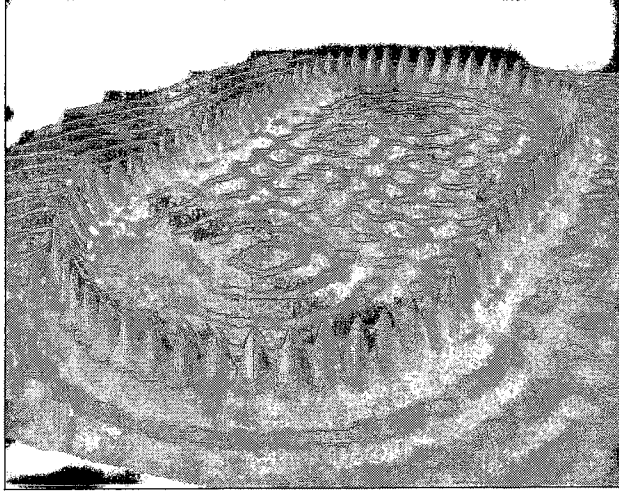
Nanobilim ile nanoteknoloji arasındaki farkı ayırt etmek önemlidir: nanobilim esas olarak nano boyut olgusunun anlaşılması üzerinde durur; fizik, kimya, biyoloji ve mühendisliğin buluşma yeridir. Nanoteknoloji ise, yukarıda verilmiş tanıma göre, henüz emekleme döneminde kabul edilebilir. Bu nedenle nanoteknoloji, bazı disiplinlerde yapılan teknolojik gelişmeler yoluyla teşvik edilmekte ve çalışmalar şu konularda devam etmektedir;

- Nanometrik toleranslar ve nanometre altı yüzey bitirme işlemlerini sağlayabilen yüksek hassasiyette proseslerin, makinaların ve kontrol sistemlerinin geliştirilmesi
- Nanometrik ve atomik boyutlardaki cisimleri ölçecek, gözleyebilecek ve 3 boyutlu görüntülerini sağlayacak yeni analitik tekniklerin oluşturulması
- Bağımsız molekülleri ve atomları tanımlayabilme, yönlendirebilme ve birbirlerine bağlayabilme becerisinin sağlanması
- Yeni malzemelerin tasarlanması ve bunların mekanik, elektriksel, manyetik, optik ve kimyasal özelliklerini önceden bilebilmek için matematik modelleme tekniklerinin geliştirilmesi
- Disiplinlerarası verimli ve hızlı bilgi alış-verişini sağlayacak bilişim teknolojilerinin geliştirilmesi ve geniş bir yelpazede kullanımı.

Bu disiplinlere paralel olarak ortaya çıkan nano ölçekte talaş kaldırma, sabit diskler, teleskop ve laser aynaları ile mercekleri, mikro-elektromekanik parçalar (MEMs) gibi yüksek hassasiyet isteyen ürünlerin imalatında kullanılmaktadır. Bu bağlamda, çok küçük boyutlarda talaş kaldırılması konusunda, gerek gevrek rejimde kırılmanın negatif etkilerinin ortadan kaldırılması ya da minimize edilmesi ve gerekse de yüksek yüzey hassasiyeti ile form doğruluğu sağlamak için, nano ölçekte talaş kaldırma proseslerine yönelik yüksek hassasiyet gösteren işleme tezgahlarının geliştirilmesi devam etmektedir.

1.1. Nanoteknoloji Uygulamaları

Nanoteknoloji uygulamaları günümüzde, 'yukarıdan aşağıya' ve 'aşağıdan yukarıya' olmak üzere iki yaklaşımda ele alınabilmektedir. Yukarıdan aşağıya nanoteknoloji uygulamaları, atomları dolaylı olarak manipüle ederek nano boyutta yapıların imalatında kullanılırlar. Örnek olarak, X ışını litografisi, karbon nano tüpleri ve nano ölçekte talaş kaldırma teknikleri verilebilir. Aşağıdan yukarıya uygulamaları – ya da moleküler nanoteknoloji – nano boyutta yapıların atom atom ya da molekül molekül oluşturulması tekniğine dayanır. Bu tekniğe dayanan uygulamalar henüz kuramsal niteliktedir ve şimdilik pratikte çok azdır. Bu yaklaşım, konvansiyonel yukarıdan aşağıya tekniklerinin standartlarına göre değerlendirildiğinde imkansız denebilecek sonuçlar doğurmaktadır. Bu uygulamalara buharlaştırma, difüzyon ya da çözünme yoluyla atomik boyutta malzeme taşınımı örnek verilebilir. Şekil 1.1'de bu tekniklerle elde edilmiş bakır üzerine demir atomlarıyla oluşturulan stadyum benzeri yapı görülebilir.



Şekil 1.1. Bakır üzerine yerleştirilmiş demir atomlarının görüntüsü [1]

Nanoteknoloji arařtırmaları, řu anda temel olarak geliřmiř malzeme yapıları, ince film tabakaları ve kaplamalar, biyomedikal ve genetik uygulamaları, nano imalat, otomotiv ve uzay sanayi uygulamaları, elektronik ve bilgisayar teknolojisi uygulamaları gibi dünya endüstrisinin önemli sektörlerine yayılmıştır. Nanometrik çözünürlüklü ve kontrollü işleme teknikleri, X ışını teleskobu aynaları gibi ‘makro’ komponentlerin ölçümünde ve imalatında kullanıldığı gibi, bütünleşik devreler ve mikro-sistem devreleri gibi çok küçük yapıların ‘mikro’ elemanlarının imalatında da kullanılmaktadırlar. Elektronik cihazlar ya da endüstride kullanılan büyükçe komponentler gibi birçok mikro elemanlı tüketici ürünlerinin performansları giderek daha fazla geometrik doğruluğa ve yüksek hassasiyete bağımlı kalmaktadırlar. Kalınlıkları 1 nm ila 5 nm arasında deęiřen ince film tabakaları ya da kaplamalar, organik ya da inorganik yapıda olabilmekte, kimyasal olarak aktiflik ya da aşınma dayanımını arttırıcı nitelikte, yoğunluk ve sertlik gibi kullanım yerine uygun olarak mükemmel özellikler gösterebilmektedirler. Bu gelişmiş malzemelerin ve ince film tabakalarının üretimi ve daha birçok nano ölçekte uygulama için geliştirilen teknikler, litografi tekniklerinden moleküler bağlama yöntemlerine kadar geniş bir yelpazede ele alınabilir. Mikro-mühendislik ve nanoteknoloji gelişmeleri, biyo-uyumlu malzemelerle oluşturulan mekanik, optik, elektronik ve akışkan bileşenler ise biyomedikal uygulamalarında önemli faydalar sağlamışlardır. Malzeme, imalat ve nanoteknolojide yaşanan bu gelişmeler otomotiv, uzay ve elektronik endüstrilerinde de kendilerine uygulama alanı bulmuşlardır. Örnek olarak otomotiv sektöründe hava yastıklarının gelişimi, uzay ve havacılık sanayiinde yüzeyi daha hassas teleskopların kullanımı ya da gelişmiş malzeme özellikleri sayesinde daha hafif ama daha dayanıklı malzemelerin kullanımı, elektronik sanayiinde de mikro işlemcilerin gelişimi ve veri saklama ünitelerinde gün geçtikçe artan kapasite artışı verilebilir.

Atomik boyuttaki herşey, çok küçük ve hafiftir. Eylemsizlik yok denilebilecek kadar azdır ve nanomekanik sistemler saniyede milyonlarca kere titreşebilirler. Bu sebeplerle, malzemelerin nanometrik boyutta işlenmesi (yukarıdan aşağıya yaklaşım) ya da parçaların atom atom ya da molekül molekül birleştirilerek imalatı (aşağıdan yukarıya yaklaşım) esnasında önemli problemler oluşabilmektedir. Bu problemlerin minimize ya da elimine edilerek nano ölçekte imalat yapılabilmesi için nanometrik ve daha düşük hassasiyette ölçme, görüntüleme ve pozisyonlama teknikleri şarttır. Bu yüzden nanoteknoloji, işleme, ölçme ve pozisyonlama tekniklerinin bütünleşik olarak ele alınmasını gerektirir. Ölçümü ve pozisyonlaması yapılacak nicelikler uzunluk, yerdeğiştirme, titreşim ve yüzey pürüzlülüğü gibi işleme etki edecek parametrelerdir.

1.2. Nano Ölçekte İmalat

İmalat prosesleri için ölçüm teknikleri genel olarak şu şekilde sınıflandırılabilir (Taniguchi, 1996);

1. proses öncesi ölçüm
2. makine-içi ölçüm (ya da kesikli-aralıklı proses ölçümü, dur-ve-ölç, yerinde ölçüm, v.b.)
3. proses-içi ölçüm (ya da gerçek zamanlı ölçüm, çevrim-içi ölçüm, işlem sırasında ölçüm, v.b.)
4. proses sonrası ölçüm

Nano ölçekte imalat için daha yüksek hassasiyetin sağlanması ve üretim verimliliğinin artırılabilmesi için makine-içi ve proses-içi ölçümlerinden gelecek bilgilerle birlikte yapılacak proses kontrol şarttır. Makine-içi ölçüm takım tezgahı ve ölçmenin geometrik birleştirimini, proses-içi ölçüm ise bunların geçici birleştirimini ve eşzamanlı çalışmalarını ifade eder. Bu teknikler yalın üretim tekniklerini geliştireceği gibi hatalı üretim sonucu ortaya çıkacak ıskarta ve düzeltme maliyetlerini de azaltırlar.

1.3. Nano Ölçekte Görüntüleme ve Metroloji

Mikronaltı görüntüleme yöntemleri, yüzeylerin incelenmesi ve tanımlanması için önemli bir teknolojidir. Malzemelerin metalurjik, topografik, tribolojik özelliklerinin ve yüzey etkileşimlerinin incelenebilmesi için gerek fiziksel, gerekse de kimyasal tekniklere başvurulmaktadır. Kimyasal tanımlamalar, çok gelişmiş spektroskopik tekniklerle yapılırken,

fiziksel tanımlamaların yapılmasında elektron ve sonda mikroskopisi teknikleri kullanılmaktadır.

Görünür ışığın dalga boyunun yaklaşık 0,5 μm olması sebebiyle, ışık mikroskoplarının, 0,5 μm 'den daha küçük yapıları görüntülemesi olası 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 iç yapılarını görüntülemek mümkündür. SEM ile inceleme yapabilmek için incelenecek cismin iletken olması ya da özel tekniklerle iletkenlik kazandırılması gereklidir. Gelişen teknolojiyle birlikte görece yeni bir tür diyebileceğimiz taramalı sondaj yapma tekniğine dayanan taramalı sonda mikroskobu teknikleri SPM de yaygın olarak kullanılmaktadır.

SPM ile görüntüleme tekniği, çok ince uçlu ve keskin bir sondanın incelenecek örnek yüzeyin düzenli aralıklarla hareket ettirilerek taranmasıyla elde edilen verilerin değerlendirilmesi ilkesine dayanır. Sonda, yüzey üzerinde hareket ederken, yüzey üzerinde bulunan topolojiyi algılar. SPM'ler, numune yüzeyi algılamada kullanılan yöntemlere göre farklı tasarlanırlar ve farklı adlar alırlar. Bunların en yaygın kullanılanları taramalı tünelleme mikroskobu, STM, ve atomik kuvvet mikroskobudur, AFM. STM yüzeye çok yakın bir uzaklıkta ve yüzey üzerine tungsten sondayla dokunmadan tarama yaparken, AFM hem dokunarak hem de dokunmadan yüzey taraması yapar. STM'lerde sadece iletken ya da iletken hale getirilmiş malzeme örnekleri incelenebilirken, AFM'ler yalıtkan malzemelerin incelenmesine de olanak tanırırlar. Çizelge 1.1'de takım tezgahları ve takım pozisyonlama ekipmanları ile birlikte ölçüm cihazları ve pozisyonlama hassasiyetleri görülmektedir.

Çizelge 1.1. Takım Tezgahları ve Takım Pozisyonlama Ekipmanları ile Ölçüm Cihazlarının ve Veri İşleme Ekipmanlarının Çözünürlüğü ya da Pozisyonlama Hassasiyeti

(Taniguchi, 1996)

Ölçüm Çözünürlüğü ya da Pozisyonlama Hassasiyeti	Takım Tezgahları ve Takım Pozisyonlama Ekipmanları	Ölçüm Cihazları ve Veri İşleme Ekipmanları
	Geleneksel Torna ve Freze Tezgahları	Kumpas
10 μm	Hassas Torna, Taşlama Tezgahı, Lepleme ve Honlama Tezgahı	Mekanik Komparatör, Mikrometre, Kadranlı Gösterge
1 μm	Aparat Delik İşleme Tezgahı, Aparat, Taşlama Tezgahı, Superfiniş Tezgahı	Elektrikli ya da Pnömatik Mikrometre, Optik Komparatör
0,1 μm	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
0,01 μm	Optik Mercek Finiş Taşlama, Alıştırma Tezgahı, Elmas Taşlı Hassas Taşlama Tezgahı	Laserli Ölçme Araçları, Optik Fiber Sistemleri, (Talysurf, Talyron)
0,001 μm 1 nm	Yüksek Hassasiyette Taşlama, Lepleme ve Parlatma Tezgahı, Tek Kesen Ağızlı Elmas Takım İle Tormalama (SPDT)	Yüksek Hassasiyette Laserle Ölçme Enstrümanları (Doppler ve Hiposs), Çoklu Yansıtımlı Laser Araçları, Heterodin Pürüzlülük Ölçme Araçları (Zygo, Wypo)
	Nano-servo Pozisyonlama Sistemi, Atom ya da Moleküler ve İyon Işınlı İşleme Aparatı	SEM, TEM, X Işını Mikroskobu (2 nm), STM, AFM, Auger Analyser, X Işını Mikroanalizör

2. NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA

Atomik boyutta işlem yaparken önemli bir sorun ortaya çıkar. İş parçası üzerinden malzeme kaldırmak için gereken enerji atomik bağ enerjisine eşit 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 fotoresptörlerin 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.

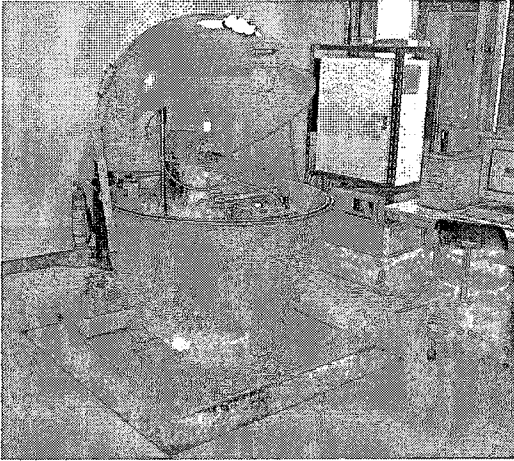
Günümüzün daha gelişmiş takım tezgahları teknolojileriyle, özellikle silisyum kristal yapılı parçalar, tek kesen ağızlı elmas takımlarla son derece verimli bir şekilde işlenebilmektedirler. Bunun yanı sıra, geliştirilen taşlama teknolojileriyle, parlatma yapmaya gerek kalmadan son derece iyi yüzey kalitesine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

Yüksek hassasiyette işleme, mikro ve nano ölçekte işleme olarak iki gruba ayrılabilir. Fakat, bu iki gruptaki uygulamaları birbirinden tam olarak ayıran bir sınıflandırma henüz yoktur. Şu

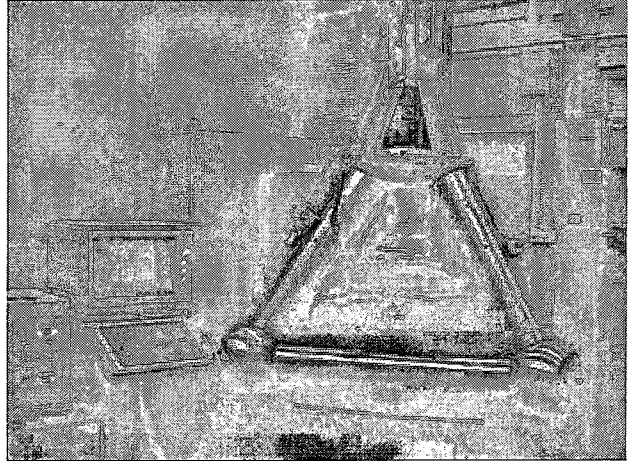
anda mikro ve nano ölçekte işleme tanımları, tezgahın ya da işmerkezinin kapasitesine bağlı görece bir biçimde ele alınabilirler. Bu sebeple, nano ölçekte işleme tekniklerinin geliştirilmesi için mikro ölçekte işleme mekanizmalarının da göz önünde bulundurulması gereklidir.

Konvansiyonel ve nümerik kontrollü takım tazgahları, 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.a’da görülen Ito v.d. tasarladığı çevresel şartların kontrol edilebildiği yüksek hassasiyette torna tezgahı ‘Capsule’, 2-3 nm ortalama yüzey pürüzlülüğü sağlamaktadır. Şekil 2.1.b’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.



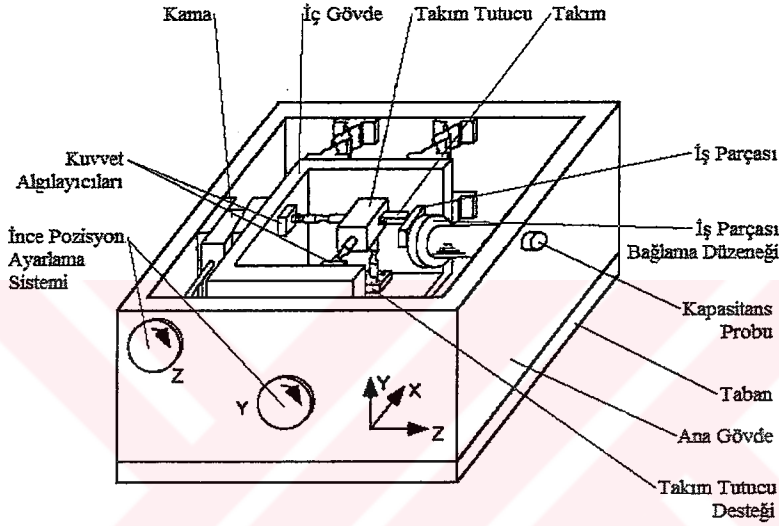
(a)



(b)

Şekil 2.1. Yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları. a) Ito v.d. tarafından geliştirilen yüksek hassasiyette elmas takımlı torna tezgahı “Capsule” [2], b) Cranfield Üniversitesi’nde geliştirilen “Tetraform C” [3]

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 2.2'de, Hocken, Wei Gao v.d. deneylerinde kullandıkları deneysel tezgahın bir şeması görülmektedir.



Şekil 2.2. Hocken, Wei Gao v.d. nano ölçekte talaş kaldırma için tasarladıkları deneysel nano ölçekte talaş kaldırma tezgahı (Hocken, 2000)

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.

2.1. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Mekanığı

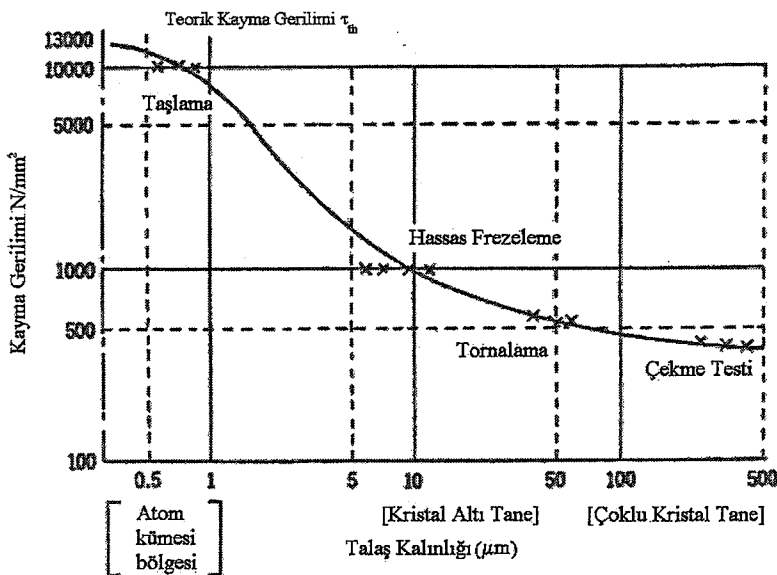
Çok yüksek hassasiyette ve ince işlenmiş parçaları nanometrik doğrulukta elde etmek için atomik boyutta ya da atom kümesi boyutunda işlemek gereklidir. Atomik boyutta işleme, malzemenin atom-atom işlenmesiyle elde edilebilir, böylece nanometre altı çözünürlük gerektirir, buna karşılık atom kümesi boyutunda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

Fakat, 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 $10^4 - 10^6 \text{ J.cm}^{-3}$ iken, atomik kümelerin işlenmesi için $10^3 - 10^4 \text{ J.cm}^{-3}$ dolaylarındadır. $0,1 \mu\text{m} - 10 \mu\text{m}$ 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 $10^1 - 10^3 \text{ J.cm}^{-3}$ 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, işparçasından talaş kaldırılabilmesi için kaymada kopma gerilimini aşmak gerekir, böylece ek özel talaş kaldırma enerjisi $\omega = 0,1 - 1 \text{ J.cm}^{-3}$ önem kazanır.

Nanometrik ölçekte işlem yapıldığında, yani, talaş kalınlığı $1 \mu\text{m}$ 'den az olduğunda, kayma dayanımı gerilimi, τ_s (N.mm^{-2}), ya da özgül kesme enerjisi, δ_s (J. cm^{-3}), hızla yükselir ve çok büyük olur. Şekil 2.3'te alaşımsız çeliklerde talaş kalınlığına bağlı kayma gerilimi görülebilir.



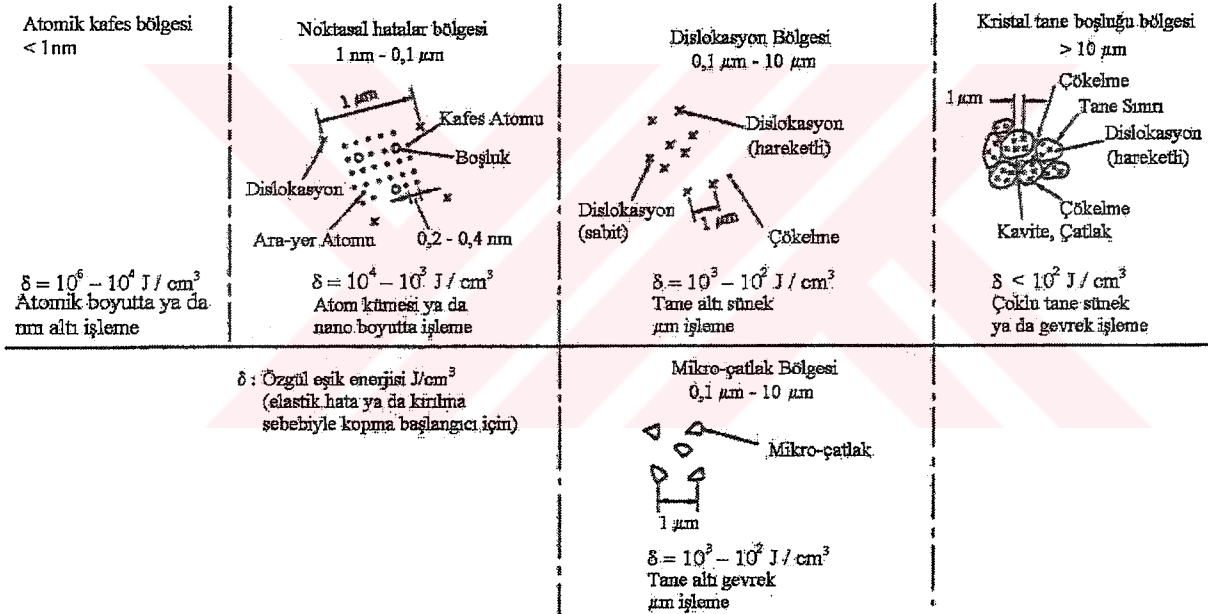
Şekil 2.3. Alaşımsız çeliklerde talaş kalınlığı - kayma gerilimi ilişkisi (Taniguchi, 1996)

Eğriden görüldüğü gibi 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 alaşımsız çeliğin atomik bağlanma dayanımına yaklaşır;

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

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

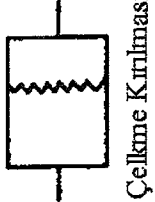
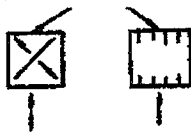
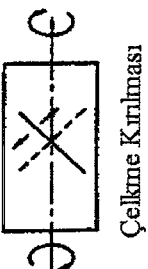



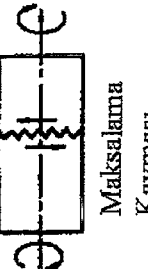

Bunun nedeni, $1 \mu\text{m}$ 'den daha küçük kesme derinliklerinde, metal kristalleri içerisinde hareket eden dislokasyonların dağılımlarının sifıra yaklaşması ve kesme kuvvetlerinin kristalin içindeki çok büyük atomik bağ kuvvetlerini yenmek zorunda olmalarıdır. Şekil 2.4'te çalışma bölgelerinin büyüklüğüne göre malzeme hatalarının dağılımları görülebilir.



Şekil 2.4. Malzemelerde hata dağılımları ve işleme bölgeleri (Taniguchi, 1996)

2.1.1. Malzeme İçindeki Kusurlara ya da Hatalara Bağlı İşleme Mekanizması

Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları şekil 2.5'te 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.

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

Şekil 2.5. Eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmaları (Oda sıcaklığında) (Taniguchi, 1996)

Fakat, bölgesel yük altındaki malzemelerin bozulmaları, eş yükleme altındaki malzemelerin bozulmalarından oldukça farklıdır. Bu tip bozulmaları gösteren şema şekil 2.6'da görülmektedir. Dalıcı takım kullanılarak yapılan lokalize yükleme için, seramik ve amorf camların bozulma ve kırılma davranışı, dalma bölgesinin boyutuna göre oldukça geniş bir çeşitlilik gösterir. Birkaç milimetrelik bir uç yarıçapına sahip bir dalıcı kullanımında ise maksimum çekme geriliminin etkidiği dalma temas bölgesinin çevresinde çevresel kırılma oluşur. Birkaç mikrometrelik bir uç yarıçapına sahip bir dalıcı kullanımında ise işparçası ile temas eden bölgede plastik deformasyon sebebiyle çok küçük bir dalma izi ya da bir dejenere bölge oluşur.

Eğer seramik ve cam malzemeler birkaç dekanewtonluk bir yükte çizilirse, görece büyük uç yarıçaplı bir dalıcı takım kullanımında, sürme (ploughing) kırılması oluşur. Fakat birkaç mikrometrelik 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. Fakat, malzemelerde gerek dalma gerekse de çizme işlemlerinde olsun, plastik deformasyon mutlaka oluşacaktır. Bu durum şekil 2.6'da görülebilir.

Böyle karmaşık durumların ortaya çıkmasının sebebi, malzemelerin uniform olmayıp noktasal hatalar, sınır çatlakları, kristal taneleri çevreleyen katmanlar gibi kırılmayı ya da bozulmayı başlatan değişik hatalar içermeleridir. Ayrıca, işparçasındaki 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.

Malzemeler farklı ölçeklerde farklı davranışlar sergilemektedirler. Malzemelerin işlenme ölçeklerine bağlı mekanizmaları şu başlıklar altında incelenebilir: Hatadan bağımsız atomik boyutta işlenmesine bağlı mekanizmalar, atom kümelerinin noktasal hatalara bağlı işlenmesine bağlı mekanizmalar, tane-altı yapıların işlenmesine bağlı mekanizmalar ve çok taneli yapıların işlenmesine bağlı mekanizmalar. Yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları için atom kümelerinin ve kristal altı yapıların mekanizmaları önem kazanmaktadır.

2.1.2. Hatasız Kristal Yapıların Teorik Kayma Dayanımı

Sünek malzemenin teorik kayma dayanımı şekil 2.7'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;

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

eğer x / b küçükse;

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

Dahis Yarığı	Cam Seramikleri (MgO, SiO_2, Al_2O_3)	Si, Ge, Elmas (Tük Kriyal Yapıda)	Metaller, Plastikler	Kumpak
Mod	Mikrodama Kayması (mekanik hata) için Gevrek Kırılma (mikro- çatlak)	Mikrodama Kayması (mekanik hata) için Gevrek Kırılma (mikro- çatlak)	Plastik Deformasyon (Dönüşümlü)	Elastik Deformasyon
Dahis II (daha ağır yük)				
Dahis I (daha hafif yük)				
Çizme II (daha ağır yük)				
Çizme I (daha hafif yük)				

Şekil 2.6. 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: Makaslı Kayması (noktasak hata kaynaklı) Yükleme: H, ağır (> 10 N); M, orta (1 N); hafif (~ 0,1 N); EL, çok hafif (~0,01 N) (Taniguchi, 1996)

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

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

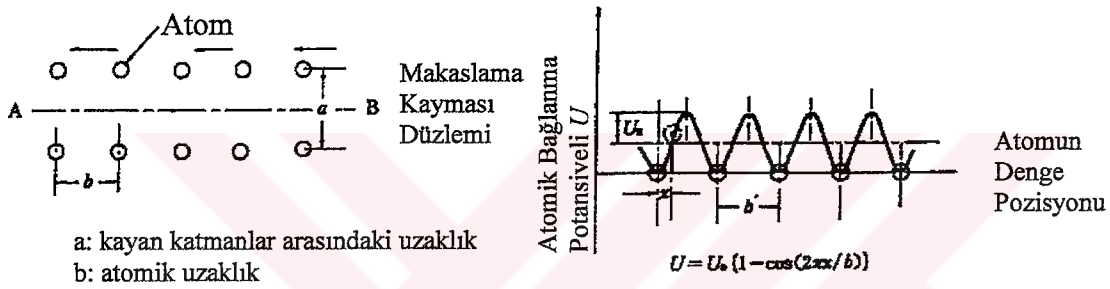
elde edilir. Burada d , kayan katmanlar arasındaki uzaklıktır. Böylece,

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

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

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

(2.1) denklemi elde edilir.



Şekil 2.7. Atomik makaslama kayması ve kayma için atomik bağlanma potansiyeli (Taniguchi, 1996)

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.

Yukarıda 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,

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

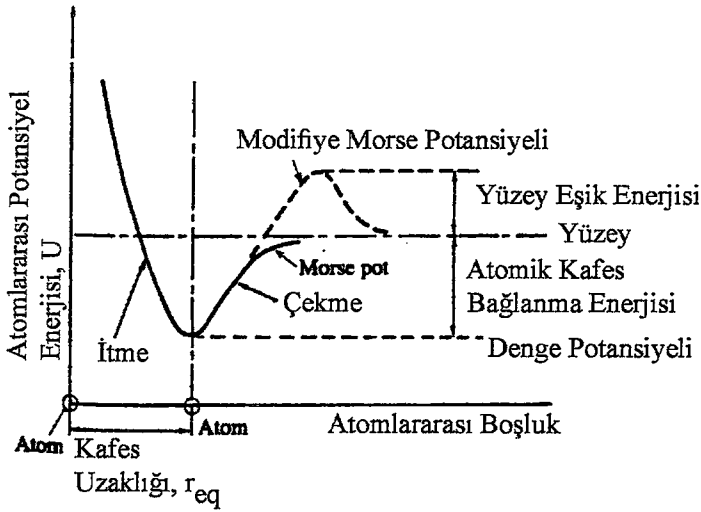
şeklinde yazılabilir.

2.1.3. Hatasız Kristal Yapıların Atomik Boyutta İşlenmesi

Genel olarak, atomik katman mesafesi ya da kristallerde etkin yarıçap 0,1 nm - 1 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 2.8'de 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.

Makroskopik olarak termal buharlaştırma işleminde, malzemeyi atomik boyutta ayırmak için gerekli enerji 6 - 25 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 enerji ışınma tekniğine göre değişiklik gösterir. Atomik boyutta birleştirme işlemleri buharlaştırma ile birikme, iyon püskürtme ile biriktirme, elektrokimyasal biriktirme ve direkt iyon biriktirmesi olarak sıralanabilir. Atomik boyutta birleştirme için gerekli enerji yaklaşık yüzey bariyeri potansiyel enerjisi kadardır.



Şekil 2.8. Katı yüzey etkisi göz önünde bulundurularak elde edilmiş iki atomun arasındaki modifiye Morse serbest potansiyel enerjisi (Taniguchi, 1996)

Atomik boyutta yer değiştirme için gerekli minimum enerji, atomik boyutta ayırma için gerekli enerjiden 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 1nm - 0,1 μm aralıkta dağılmış noktasal hatalara bağlıdır. Noktasal hatalara bağlı olarak kırılma ve bozulmalar ortaya çıkar. Yine de, amorf camdaki mikrofaz 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 2.9.a ve şekil 2.9.b'de dalmış düz takımdaki gerilim dağılımı görülmektedir.

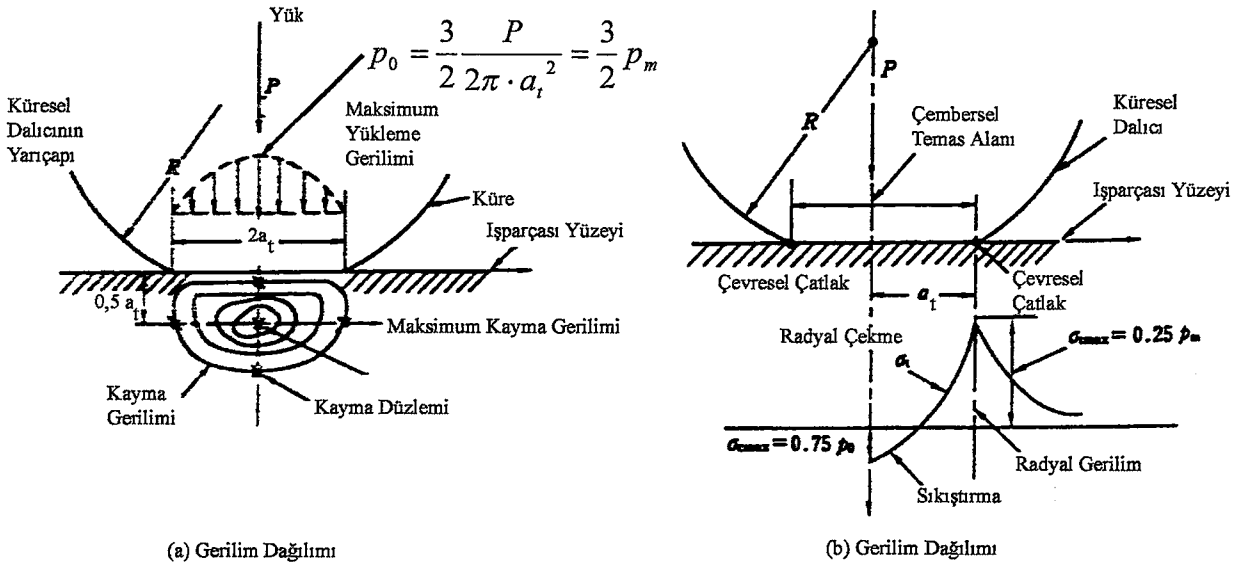
τ_{max} maksimum kesme gerilimi (N.m^{-2}) düz yüzeyin $0,5 a_t$ altında oluşmaktadır,

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

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

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

burada ν Poisson oranıdır.



Şekil 2.9. Küre ve işparçasının 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_t : temas alanındaki çekme gerilimi, σ_c : temas alanındaki sıkıştırma gerilimi (Taniguchi, 1996)

Bunun anlamı, τ_{max} maksimum kayma gerilimi, elastik kayma bozulum 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 oluştuğu 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 2.9.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;

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

bulunur. Bu sebeple $P_a > P_f$ 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 2.6'da 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.

İşparçasına bir yük uygulandığında ve kayması oluştuğunda, 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;

$$\tau_c = [2\mu / (1 - 2\nu)]. \exp (-2\pi \omega_e / b) \quad (2.10)$$

burada μ elastik kesme modülü, ν Poisson oranı, b belirli bir kayma yönündeki atomların arasındaki uzaklığa denk 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.

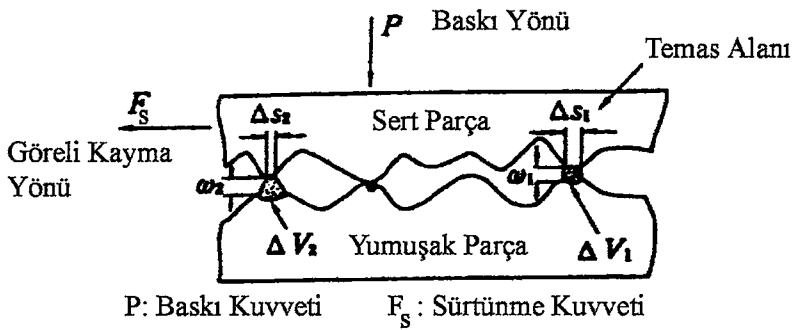
2.1.6. Sürtünme Yoluyla Abrazif Aşınma İle Talaş Kaldırma

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 2.10'da görüldüğü gibi, aşınma sürtünmesi kavramına dayanan statik sürtünmenin mekanizması Bowden ve Tabor tarafından tartışılmıştır (Tabor, 1951). Sürtünmeye bağlı yapışık kayma hareketi bu kavram ile açıklanabilmektedir. Tabor'un sürtünme kavramı şu şekildedir: iki parça yüzyüze 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;

$$S = kP/H_v \quad (2.11)$$

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 2.10. Statik sürtünmenin sürtünme ve aşınmaya dayalı mekanizması (Taniguchi, 1996)

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

$$F_s = \tau_a \cdot S \quad (2.12)$$

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

$$\mu_s = F_s / P = k \tau_a / H_v \quad (2.13)$$

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

$$V_w = \omega_c \cdot S = \omega_c \cdot kP / H_v \quad (2.14)$$

burada, ω_c kopan talaşın ortalama kalınlığıdır. Fakat, kaba yüzeylerdeki çıkıntuların 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 2.10'a göre, şu ilişki yazılabilir;

$$\mu_s P \times S^{1/2} = V_w \times \delta \quad (2.15)$$

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;

$$\begin{aligned} V &= (\tau_a / \delta) \cdot S^{1/2} = (\tau_a / \delta) \cdot (kP / H_v)^{3/2} \\ &= k_v \cdot P^{3/2} \end{aligned} \quad (2.16)$$

$k_v = (\tau_a / \delta) \cdot (k / H_v)^{3/2}$, yapışkan aşınma hacmi katsayısı, malzeme özelliklerine bağlı bir sabittir. Bu sebeple, aşınma hacmi V_w , P 'nin 3/2. kuvveti ile orantılıdır. Denklem (2.14)'te ise bu durum yoktur.

Gerçek sürtünme olgusunda, ayrılmış parçaların tekrar bağlanmalarına bağlı çizme aşınması rastlantısal oluşur. Bu sebeple denklem (2.16) ile verilen V aşınma hacmi sürtünme aşınması için temel bir niteliklidir.

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 dağılmıştır. 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 $\tau_c > 10$ GPa ($G = 900$ GPa) ve silisyum kristali için $\tau_c = 5-6$ GPa ($G = 125$ 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;

1. atomik yapıları güçlü kovalent bağlardan oluşur
2. 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.

SiO_2 gibi seramiklerde, farklı atomlar arasındaki güçlü bağlanma kuvvetlerinden oluşan 'elmas' benzeri yapılar bulunur. Bu yüzden, Al_2O_3 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 aşılır. Örneğin, 1800 °C'de makaslama kayması 50 MPa gerilimde ortaya çıkar. Bu sıcaklık etkisi, elmas işparçasının kızıl ısıya ulaştığı, elmasın atomik boyutta ve atomik kümede parlatılmasında ortaya çıkar.

Gevrek malzemelerin, mikro-çatlaklara bağlı gevrek kırılma mekanizmalarına bağlı olmaksızın işlenmesi mümkündür. Bu konu bölüm 2.2.1'de ele alınacaktır.

2.1.8. Organik Polimerlerin Moleküler Sınır Hatalarına Bağlı Tane Altı İşlemleri

Organik yüksek yapılı polimerlerin yapısı, büyük bağlı moleküllerden oluşur. Polimer atomlarının arasındaki bağlar iyonik ya da kovalent olsun, Van der Waals kuvvetiyle oluştuğundan oldukça zayıftır. Ayrıca, polimerlerin moleküllerarası deformasyonu, Van der Waals bağlanma kuvvetine karşı oluşan, büyük molekül grupları arasındaki viskoz kaymaya bağlıdır. Fakat, mikrometre altı bölgede çok ince talaş kaldırma yapıldığında, konvansiyonel kesici takımlar kullanılamazlar, çünkü atomları polimer molekülünden ayırmak için, iyonik ya da kovalent bağlanma kuvvetlerini aşacak yüksek enerji yoğunluklu atomik boyutta işlemler gereklidir. Bu yüzden, yüksek yapılı polimerlerden çok ince talaş kaldırmak için, sinterlenmiş karbürden, elmas talaşından yapılmış 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. Bunun sebebi, viskoz akışa direnç gösteren kuvvetin, deformasyon hızıyla orantılı olarak artmasıdır.

2.2. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Yöntemleri

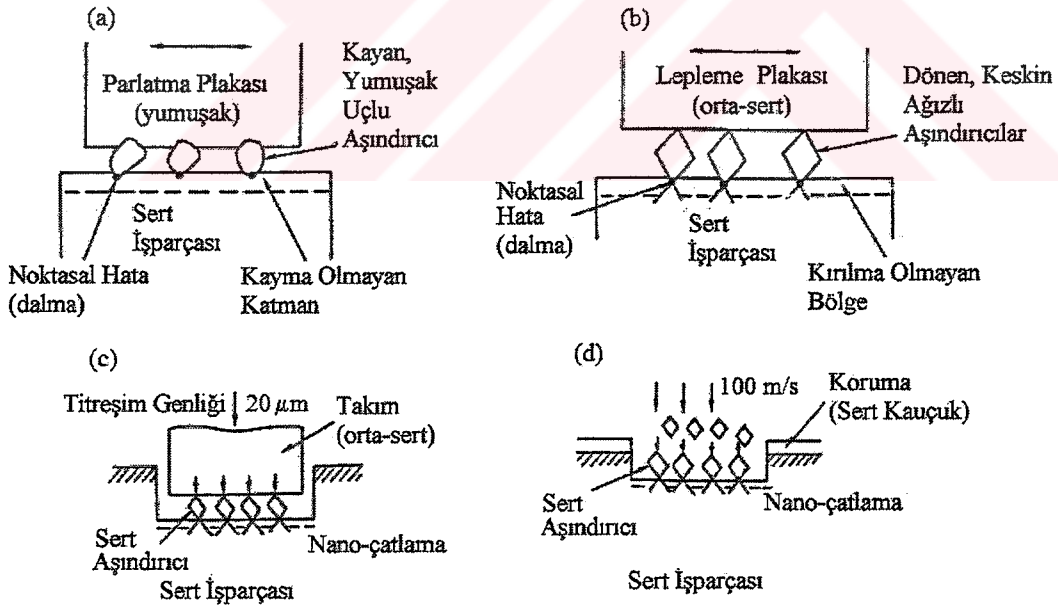
Nano ölçekte talaş kaldırma, tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma, çok kesen ağızlı takımlarla nano ölçekte taşlama ve honlama, lepleme ve parlatma gibi yöntemlerle yapılır. Bu yöntemlerde işleme birkaç on nanometreden ibarettir, bu yüzden atom kümesi bölgesinde dalma ve çizme hareketleri, 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 takımı 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 sınırlanmıştır. 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 kırılman 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 lepleyici ve ayna parlatmada yeniden kullanılabilir ince taneli serbest aşındırıcılar kullanılır, fakat bu iki yöntemin mekanizmaları, şekil 2.11’de gösterildiği gibi oldukça farklıdır.



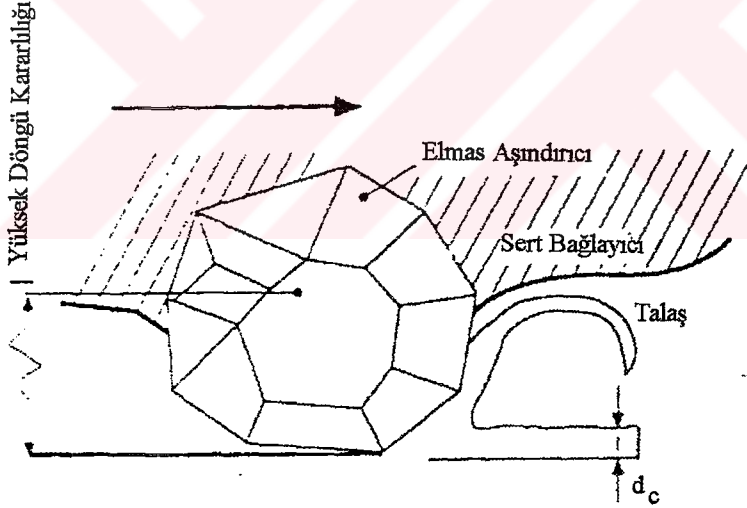
Şekil 2.11. Cam, Seramik, Gibi Gevrek Malzemelerin Düzlem Lepleyici ve Parlatılması.
(a) Ayna Parlatma, (b) Düzlem Lepleyici, (c) Ultrasonik İşleme, (d) Darbeli İşleme
(Taniguchi, 1996)

Ayna parlatma, Şekil 2.11.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 2.11.b'de gösterildiği gibi, elmas, CBN, SiC, SiO₂ veya B₄C gibi sert ve aynı zamanda kırılğan, keskin ağızlı, ince taneli aşındırıcılarla talaş kaldırma işlemini gerçekleştirmek için orta-sertlikte bir lepleme plakası kullanılır. Düzlem lepleme yönteminde, şekil 2.11.c ve 2.11.d'de gösterildiği gibi, çok ince taneli aşındırıcılar ile ultrasonik etkiyle veya darbeli olarak gerçekleştirilen teknikler de uygulanmaktadır.

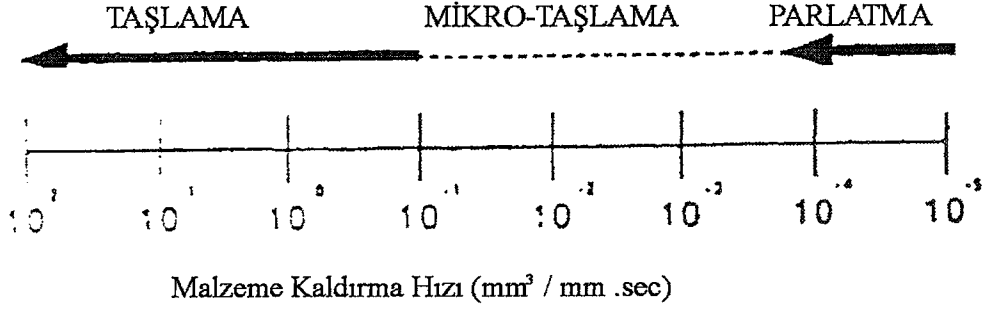
2.2.1. Gevrek Malzemelerin Kayma Mekanizmaları İle Sünek Rejimde İşlenmesi

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 elmas takımlar ya da çok kesen ağızlı elmas taneli taşlama taşlarıyla plastik akış yoluyla işlenmesi mümkündür. Şekil 2.12'de bu durum görülmektedir. Bu işlem sünek rejimde işleme olarak adlandırılır.



Şekil 2.12. Elmas aşındırıcı taneyle gevrek iş parçasının sünek rejimde işlenmesi (Sreejith, 2001)

Sünek rejimde işleme, deformasyon çok küçük olduğunda her malzemenin plastik deformasyona uğrayacağı ilkesine dayanır. Şekil 2.13'te görüldüğü üzere taşlama ve parlatma prosesleri arasında malzeme kaldırma hızı farkı çok fazladır. Bu boşluk, seramik, cam ve yarıiletken gibi malzemelerin işlenebildiği sünek rejimde işleme tekniğine dayanan mikro-taşlama tekniği ile doldurulabilmektedir.



Şekil 2.13. Çok kesen ağızlı kesici takımlarla malzeme kaldırma hızı karşılaştırması (Sreejith, 2001)

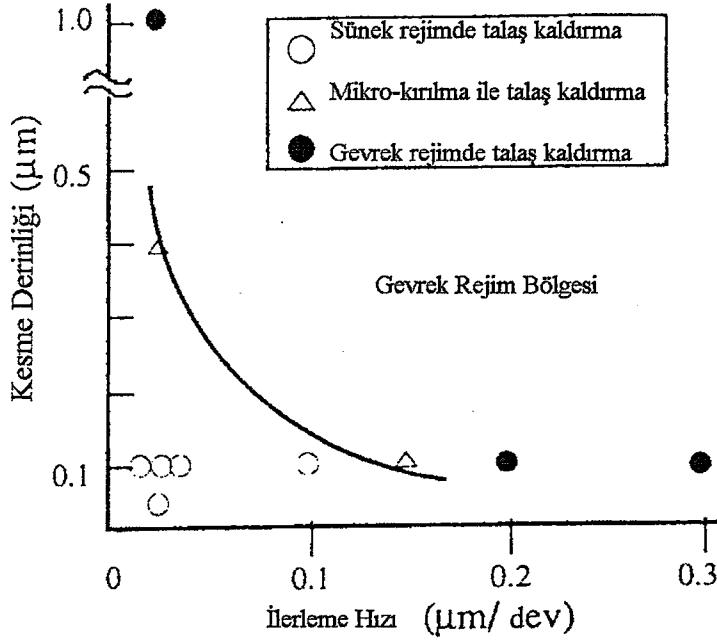
Gevrek malzemelerde, gevrek rejimden sünek rejime geçiş, gerilme enerjisi ve yüzey enerjisindeki enerji dengesi yoluyla açıklanabilir. Yükün uygulanmasında oluşan lokalize kırılmalar gevrek malzemelerin işlenmesinde önemlidir. İşleme, dalma çatlaklarının oluştuğu bir dalma işlemi olarak görülebilir ve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

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

$$d_{cc} = c \cdot (K_c / H)^2 \cdot (\mu / H) \quad (2.17)$$

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.

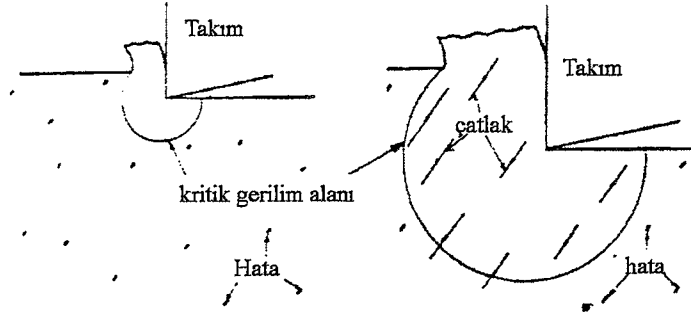
Gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenebilirliğini etkileyen bir diğer faktör de ilerleme hızıdır. Şekil 2.14'de görüldüğü üzere, ilerleme hızı arttıkça gevrek malzemenin sünek rejimde işlenmesi için gerekli kritik nüfuz derinliği azalmaktadır.



Şekil 2.14. İlerleme hızının sünek rejimde işleme için kritik nüfuz derinliğine etkisi (Takeuchi, 1996)

Denklem (2.17)'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 (Patten, 2001) -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 $1 \mu\text{m}$, tek kristal silisyumda yaklaşık 1 cm 'dir. Gevrek malzemelerde hataların yoğunluğunun çok büyük olmaması sebebiyle, kırılmanın kritik değeri gerinim alanının büyüklüğüne bağlıdır. Şekil 2.15'de 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 2.15. Boyut etkisine bağlı talaş kaldırma modeli (Ikawa, 1990)

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.

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 imatları mümkündür. Bu tür işleme, parçaların performanslarını ve dayanımlarını farkedilir derecede artırır ve sonradan parlatma ihtiyacını ortadan kaldırır veya minimize eder. 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.

2.2.3. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşlemleri İçin Tezgah Özellikleri

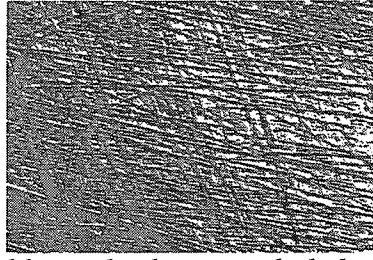
Yüksek hassasiyet ve pozisyon doğruluğu isteyen nano ölçekte talaş kaldırma operasyonlarında kullanılacak tezgahlar için şu özellikler aranır:

- yüksek hassasiyette, titreşimden arınmış, rijit bir yapı
- rijit işparçası bağlama düzeneği
- yüksek çözünürlükte hareket kontrolü
- ısı 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 (Corbett, 2000), elde edilen son ürünün (yüzey pürüzlülüğü, vs.) ya da proses parametrelerinin (kesme derinliği, ilerleme uzaklığı, vs.) nano ölçekte olması durumunda da çalışma nano ölçekte talaş kaldırma olarak değerlendirilmiştir.

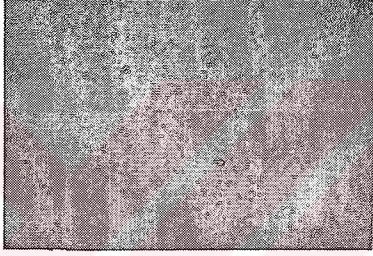
Okamura v.d. yapmış olduğu çalışmalarda (Okamura, 1978), çok ince bitirme işlemlerinin mekanizmaları üzerinde durulmuş ve tek kristal yapıya sahip safir malzemenin çok ince parlatılmasında kristalografik mükemmelliğe sahip 10° A R_z pürüzlülükte yüzeyler elde edilmiştir. Okamura v.d. göre, malzeme kaldırma miktarı/hızı parlatma sıvısındaki partiküllerin malzemesine, büyüklüğüne, sıvı içindeki yoğunluğuna, uygulanan yüke, partiküllerin dağılımına ve bitirme yapılacak yüzeyin kristal yapısına bağlıdır. Şekil 2.16'da Okamura v.d. elde etmiş olduğu yüzeyler görülebilir.



(a) 3 μ m büyüklüğünde elmas tanelerle leplenmiş yüzey



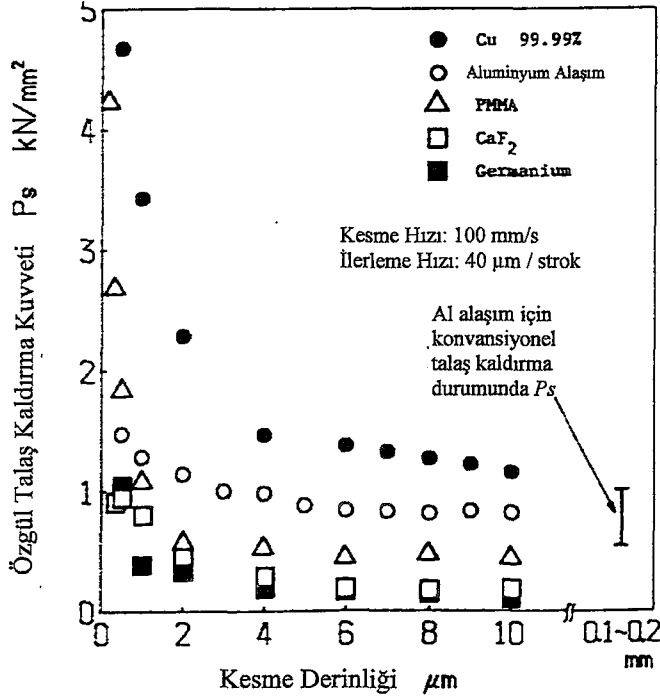
(b) Cr₂O₃ taneleriyle leplenmiş yüzey



(c) MgO tozuyla yüksek hassasiyette bitirme yapılmış yüzey

Şekil 2.16. Mn-Zn ferrit tek kristal malzemenin yüzeyinin optik mikrografileri (Namba, 1978)

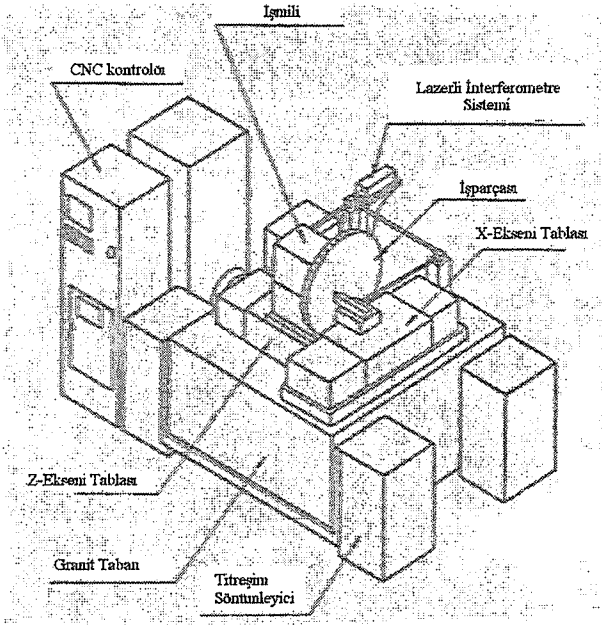
Furukawa ve Moronuki'nin yapmış olduğu çalışmalarda (Furukawa, 1988), alüminyum alaşım, bakır, çok kristal yapılu germanyum, florit (CaF₂), amorf yapılu akrilik reçine (PMMA) malzemelerinde yüksek hassasiyette talaş kaldırma deneyleri yapılmıştır. Şekil 2.17'de görüldüğü üzere kesme derinliği azaldıkça (özellikle bakır için), özgül kesme kuvveti P_s şiddetli bir biçimde artmaktadır.



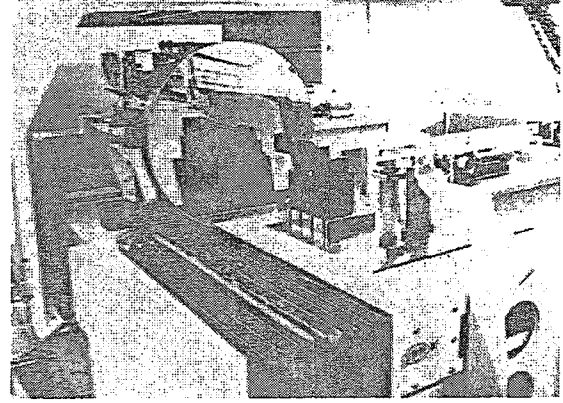
Şekil 3.17. UPM ile özgül talaş kaldırma kuvvetinin kesme derinliğine göre değişimi (Furukawa, 1988)

Moriwaki, v.d. yaptığı deneylerde (Moriwaki, 1990), elmas kesici takım ile yüksek hassasiyette tornalama işlemi için sıcaklık artışı ve kesici takımın ısıl deformasyonu hem deneysel, hem de sonlu elemanlar yöntemi (FEM) ile incelenmiştir. Moriwaki, v.d. göre alüminyum malzemenin alın tornalanmasında 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 seviyesine ulaşır ve aşamalı olarak azalır. Takım ters yönde hareket ettiği zaman, sıcak aşamalı olarak talaş kaldırmanın sonuna kadar artar. Ayrıca, takım aşındığında sıcaklık artışı ve işleme hatası artmaktadır.

Ueda, v.d. yapmış olduğu deneylerde (Ueda, 1991), 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 2.18'de Ueda v.d. kullanmış oldukları yüksek hassasiyette CNC tezgahının şeması ve 600 mm çaplı konkav küresel alüminyum test parçasının işlenmesinin resimleri görülebilir.



(a)

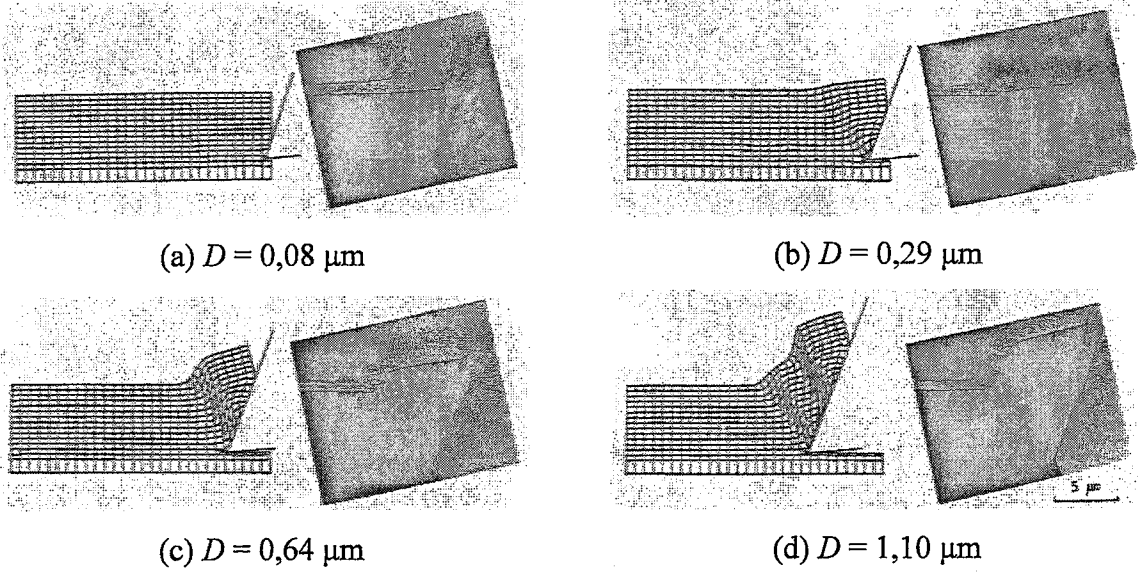


(b)

Şekil 2.18. Ueda v.d. kullandıkları UPM a) tezgah şeması, b) 600 mm çaplı konkav küresel alüminyum test parçasının işlenmesi (Ueda, 1991)

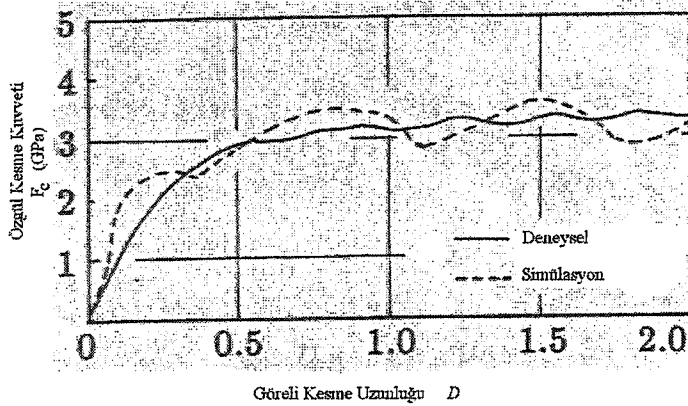
Moriwaki ve Shamoto'nun yaptığı çalışmalarda (Moriwaki, 1991), paslanmaz çelik malzemenin ultrasonik titreşim uygulanarak yüksek hassasiyette işlenmesi çalışmalarda, $0,026 \mu\text{m}$ R_{max} yüzey pürüzlülüğünde ayna yüzeyleri elde edilebilmektedir.

Ueda ve Manabe'nin yaptığı deneylerde (Ueda, 1992) amorf metallerin mikro talaş kaldırılmasında talaş oluşumu mekanizmaları incelenmiştir. Bunun için deneysel çalışmalar ve sonlu elemanlar yöntemi ile bilgisayar ortamında analiz yapılmıştır. in-situ SEM gözleminde görülmektedir ki, 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 $0,03 \mu\text{m}$ '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 2.19'da Ueda v.d. yapmış olduğu çalışmalarda elde edilen talaş oluşumunun deneysel ve SEY analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları ve şekil 2.20'de D görelisi talaş kaldırma uzunluğuna bağlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması grafiği görülmektedir.



Şekil 2.19. Talaş oluşumunun deneysel ve FEM analizi ile elde edilen görüntülerinin karşılaştırmaları $D = (\text{talaş kaldırma uzunluğu} / \text{kesme derinliği})$ (Ueda, 1992)

Lucca v.d. yaptıkları deneylerde (Lucca, 1993), Te-Cu alaşım malzemenin elmas malzemeli tek kesen ağızlı döner kesici takımla yüksek hassasiyette talaş kaldırma yapılmış ve takım geometrisinin talaş kaldırma kuvvetlerine etkisi incelenmiştir. Takım kesici kenar geometrisinin belirlenmesi için AFM kullanılmıştır. $20 \mu\text{m} - 10 \text{nm}$ kesme derinlikleri arasında yapılan deneylerde gerek nominal talaş açısının gerekse de takım kesici kenar profilinin (efektif talaş açısı) 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. Fakat, kesme derinliği, kesici kenar yarıçapı değerine yaklaştığında açığa çıkan kuvvetler, efektif talaş açısı tarafından belirlenmektedir.



Şekil 2.20. Görel kesme uzunluğuna bağlı özgül kesme kuvvetleri değişimi karşılaştırması (Ueda, 1992)

Donaldson v.d. yaptıkları deneylerde (Donaldson, 1994), 0,01 - 10 μm kesme derinliğinde Cu malzemenin yüksek hassasiyette ortogonal işlenmesi sonucu oluşan yüzeydeki plastik deformasyona uğramış katmanın 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 (Sata, 1996), camın 3 boyutlu olarak yüksek hassasiyette işlenmesi incelenmiştir. Sata ve Takeuchi'ye göre, sünek rejimde işleme ile yüzeydeki çatlak oluşumundan arınmak mümkündür. Şekil 2.21'de Sata ve Takeuchi'nin çalışmalarında elde edilmiş bitirmeden önceki ve sonraki yüzey görünümü resmi görülmektedir.



(a) Bitirmeden Önceki Yüzey Görünümü

(b) Bitirmeden Sonraki Yüzey Görünümü

Şekil 2.21. Cam işparçasında çatlak oluşumsuz bitirme işlemiyle elde edilen yüzey (Sata, 1996)

To v.d. yaptığı çalışmada (To, 1997), alüminyum malzemenin elmas kesici takımla yüksek hassasiyette tormalanması incelenmiştir. To v.d. göre, elmas kesici takımla yüksek hassasiyette tormalama ile elde edilen yüzey pürüzlülüğü, talaş kaldırılan yüzeyin pürüzlülüğünden etkilenmektedir.

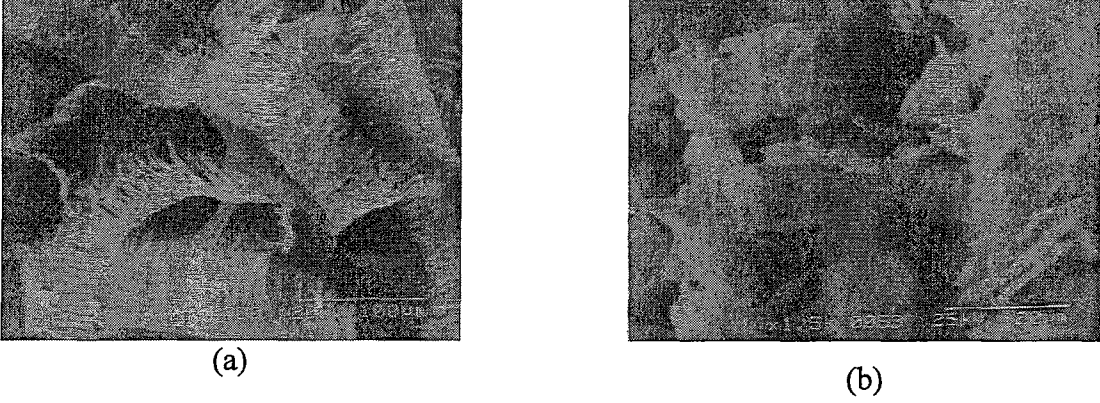
Fang'ın yapmış olduğu çalışmada (Fang, 1998), tek kristal silisyum malzemenin yüksek hassasiyette tormalanması incelenmiştir. Fang'a göre, keskin kesici kenarlı takım

kullanıldığında, mikto-çatlaklar görülmeyecek kadar küçülmektedir. Ayrıca, talaş açısı azaldıkça, yüzey-altı deformasyon kalınlığı artmaktadır. Yine, görülmektedir ki, uç yarıçapı arttıkça, yüzey pürüzlülüğü de artmaktadır. Ayrıca bu çalışmada, sünek malzemelerde elde edilen 1 nm yüzey pürüzlülüğü eşik değeri, silisyum gibi gevrek bir malzemede elde edilmiştir.

Hocken v.d. yaptığı deneylerde, (Hocken, 1998), 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 artış gözlenmektedir.

Hocken, Wei Gao v.d. yaptığı nano ölçekte talaş kaldırma tezgahında (Hocken, 2000; Wei Gao, 2000), gevrek işparçasının 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 2.2'de yapılan tezgahın bir şeması görülebilir.

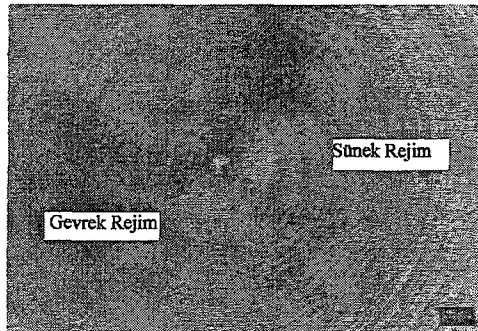
Yan v.d. yaptığı çalışmada (Yan, 2002), gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi için düz uçlu elmas kesici takım kullanarak yeni bir yöntem önerilmektedir. Küçük talaş açıları kullanarak, deforme olmuş talaş kalınlığı nanometrik seviyede tutulmuş ve aynı zamanda düzgün gerinim şartları elde edilmiştir. 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 2.22'de Yan v.d. sünek rejimde işleme sonucu elde ettikleri sürekli talaş oluşumunun görüntüsü görülebilir



Şekil 2.22. UPM ile elde edilen talaşların SEM görüntüleri a) Sünek rejimde işleme, b) gevrek rejimde işleme (Yan, 2002)

Chao v.d. yaptığı çalışmada (Chao, 2002), tek kristal silisyumun tek kesen ağızlı elmas takımla sünek rejimde tormalanması incelenmiştir. Görülmektedir ki, yuvarlak uçlu bir takım kullanıldığında kritik kesme derinliği (d_{cc}) Si(100) için kırılmanın kolay olduğu kesme yönlerinde $0,2 \mu\text{m} < d_{cc} < 0,9 \mu\text{m}$, diğer yönlerde $d_{cc} \sim 1 \mu\text{m}$, Si(111) için kırılmanın kolay olduğu kesme yönlerinde $0,25 \mu\text{m} < d_{cc} < 0,6 \mu\text{m}$ ve diğer yönlerde $d_{cc} \sim 0,9 \mu\text{m}$ elde edilmektedir.

Cheung'un yaptığı çalışmada (Cheung, 2003), 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 2.23'de Cheung tarafından elde edilmiş (111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişimi görülebilir.



Şekil 2.23. (111) tek kristal silisyumun sünek-gevrek geçişimi (Cheung, 2003)

Fang, Liu ve Lee'nin yaptığı derlemede (Fang, 2003), cam malzemenin yüksek hassasiyette elmas kesici takımla talaş kaldırılması incelenmiştir. Cam malzemenin sünek rejimde işlenmesi için üç teknik ele alınmıştır: konik kanal açma, dalma ve tek kesen ağızlı takımla çizme. Atomik boyutta işlemede oluşan kuvvetler sebebiyle oluşan takımın çabuk aşınmasını önlemek için, ultrasonik titreşimli talaş kaldırma ve ısı yardımıyla talaş kaldırma teknikleri ele alınmıştır.

Rentsch v.d. yaptığı çalışmada (Rentsch, 1996), malzemenin mikro-işleme işlemi üzerindeki etkileri ele alınmıştır. Bunun için elmas kesici takımla bakır ve nikel kaplama üzerinde deneyler yapılmıştır. Daha sonra moleküler dinamik modelleme teknikleri kullanılarak teorik yaklaşımlarda bulunulmuştur. Elde edilen sonuçlara ileride değinilecektir.

Shimizu v.d. yaptığı çalışmada (Shimizu, 2002), sünek malzemelerin çok hızlı taşlama ile işlenmesi ele alınmıştır. İncelemeler için hem deneysel verilerden, hemde moleküler dinamik modellerden faydalanılmıştır. Elde edilen sonuçlara ileride değinilecektir.

Cheng v.d. yapmış oldukları deneylerde (Cheng, 2003), nano ölçekte talaş kaldırma mekaniği hem moleküler dinamik modelleme, hem de deneysel verilerle incelenmiştir. Elde edilen sonuçlara ileride değinilecektir.

3. MOLEKÜLER DİNAMİK MODELLEME

3.1. Moleküler Dinamik Modellemenin Temelleri

3.1.1. 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 bir sistemde çevresiyle kütle ya da enerji alış-verişinde 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 de 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 yazabiliriz: “faz uzayı yörüngesini hesaplamak”. Yörünge, Newton'un ikinci yasasını (1) ya da Hamilton'un hareket denklemlerini nümerik olarak çözerek elde edilir.

Faz uzayı yörüngesine basit bir örneği tek boyutlu harmonik osilatör, ODHO, verir. Eğer ODHO'yu, şekil 3.1'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 yerdeğiştirmeye uğradığında, kütle r_0 denge pozisyonundan $x = r - r_0$ uzakta ve sistemin potansiyel enerjisi;

$$u(x) = \frac{1}{2} \gamma x^2 \quad (3.1)$$

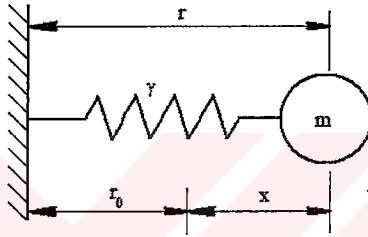
olur. İzole edilmiş bir sistemde Newton'un yasaları geçerlidir, böylelikle hareket denklemleri;

$$F(x) = \dot{p} = m \cdot \ddot{x} = -\frac{du(x)}{dx} \quad (3.2)$$

Buradan da,

$$m \ddot{x} = -\gamma x \quad (3.3)$$

elde edilir.



Şekil 3.1. Bir Boyutlu ODHO'nun hareketi, $x = r - r_0$ (Haile, 1991)

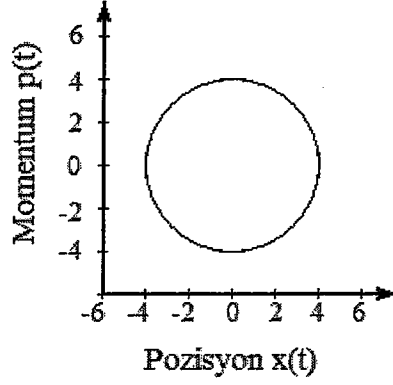
Bu sebeple, kütleye etki eden $F(x)$ kuvveti, deplasman boyunca lineerdir. Başlangıç koşullarından $\{x(0), p(0)\}$, zamana bağlı $x(t)$ ve momentum $p(t)$ (3.3) çözümlenerek elde edilebilir. Yine de, bu basit durumda faz uzayını bulmak için (3.3)'ü çözmemiz gerekmez. Sistem izole edilmiş olduğu için, toplam enerji E , hareketin bir sabiti olmalıdır.

$$E_T = E_k + U \quad (3.4)$$

Burada E_k ve U , sırasıyla kinetik ve potansiyel enerjidir.

$$E_T = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} \gamma x^2 \quad (3.5)$$

Bu durum için faz uzayı iki boyutludur: bir pozisyon koordinatı x ve bir momentum koordinatı p . Bu düzlemde, (3.5)'e göre, faz noktası $(2mE_T)^{1/2}$ ve $(2E_T/\gamma)^{1/2}$ yarı eksenlerine sahip bir elipsi verir. Şekil 3.2'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 3.2. $(2mE)^{1/2}$ ve $(2E/\gamma)^{1/2}$ yarı eksenlerine sahip faz uzayı yörüngesi (Haile, 1991)

(3.5)'i daha formal olarak momentumun tanımı ve ikinci yasanın iki formu, (3.2) ve (3.3), kombinasyonu olarak geliştirebiliriz;

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \text{ ve } \dot{p} = \gamma x \quad (3.6)$$

Faz uzayı yörüngesini elde etmek için, (3.6)'daki iki eşitliği birleştirip, zamanı elimine edersek;

$$\frac{dx}{dp} = \frac{p}{m} \left(\frac{-1}{\gamma x} \right) \quad (3.7)$$

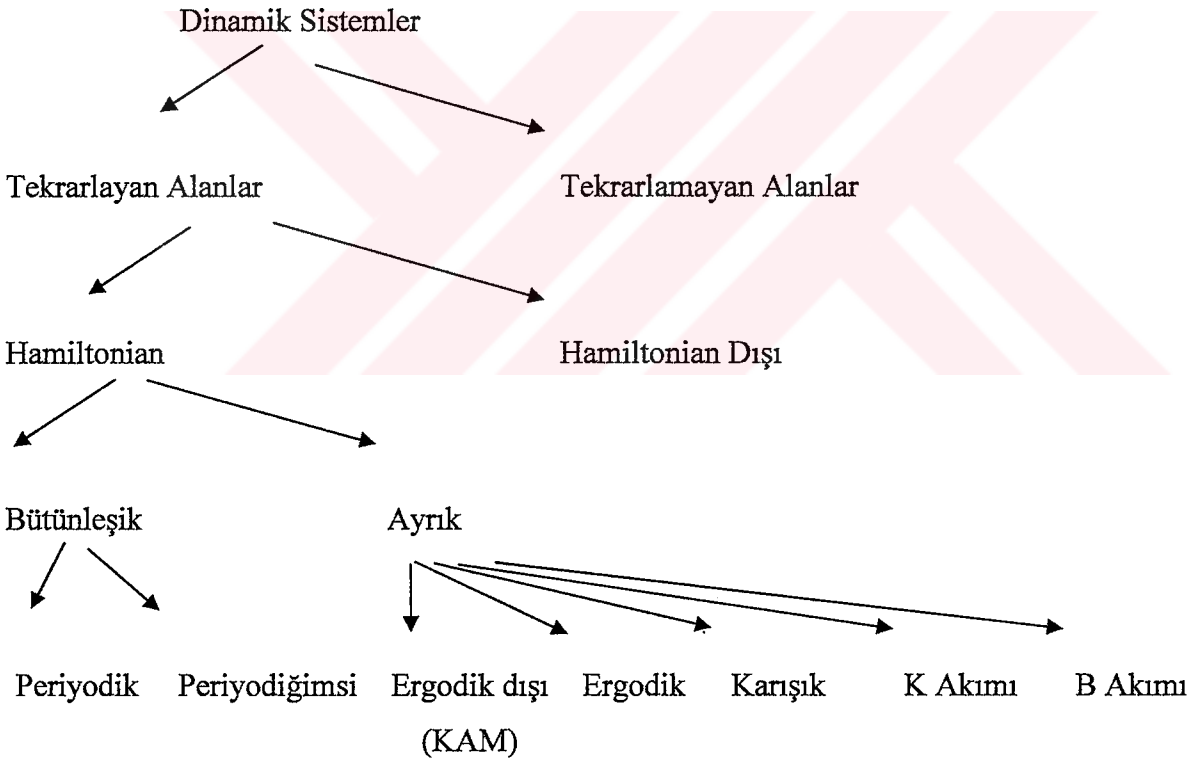
olur. Bu eşitlik, değişkenleri ayrılarak integre edildiğinde, (3.5) elde edilir. Faz uzayı için ikinci bir örnek olarak, N moleküllü izole edilmiş ideal gaz sistemi verilebilir. Bu sistem için faz uzayı $6N$ boyutludur. Sistemin izole edilmiş olması sebebiyle, toplam enerji E korunmaktadır, fakat sistem ideal gaz olduğu için, moleküller arası potansiyel enerji yoktur, toplam enerji atomların kinetik enerjilerinden ibarettir.

$$E_T = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i = \text{sabit} \quad (3.8)$$

Bu sebeple konsigürasyon uzayında faz noktası herhangi bir yerde olabilir, fakat momentum uzayında $3N$ boyutlu, $(2mE)^{1/2}$ yarıçaplı bir hiper-kürenin yüzeyiyle sınırlıdır. Her iki örnekte de sisteme etkiyen dış etkenler, faz uzayını faz noktası olarak sınırlarlar.

3.1.2. Dinamik Sistemlerin Sınıflandırılması

Faz uzayı yörüngelerinin unsurları, dinamik sistemlerde nesnelere hareketlerinin sınıflandırılmasında kullanılabilir. Şekil 3.3'te görülebileceği üzere, bu sınıflandırma hiyerarşik bir formdadır. Hiyerarşinin ilk seviyesinde, "tekrarlanan yörüngeler"e sahip sistemler, "tekrarlanmayan yörüngeler"e sahip sistemlerden ayrılır. Tekrarlanmayan yörüngelere örnek olarak birçok kuyruklu yıldızın hareketleri verilebilir. Halley Kuyruklu Yıldızı gibi, tekrarlayan bir yörüngeyi takip eden kuyruklu yıldızlar istisnadırlar. 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.



Şekil 3.3. Dinamik sistemlerin sınıflandırılması ve faz uzayında hareket hiyerarşisi (Haile, 1991)

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 'un 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 sayılarına eşittir. Çoğu durumda, korunan nicelikler küçüktür, hareket denklemleri non-lineer terimler içerir, bu sebeple sistemler, çok az nesne içerse bile, genellikle ayrıktır. Örneğin, astronominin üç cisim problemi analitik olarak çözülemez.

3.1.2.1. Bütünleşik Sistemler

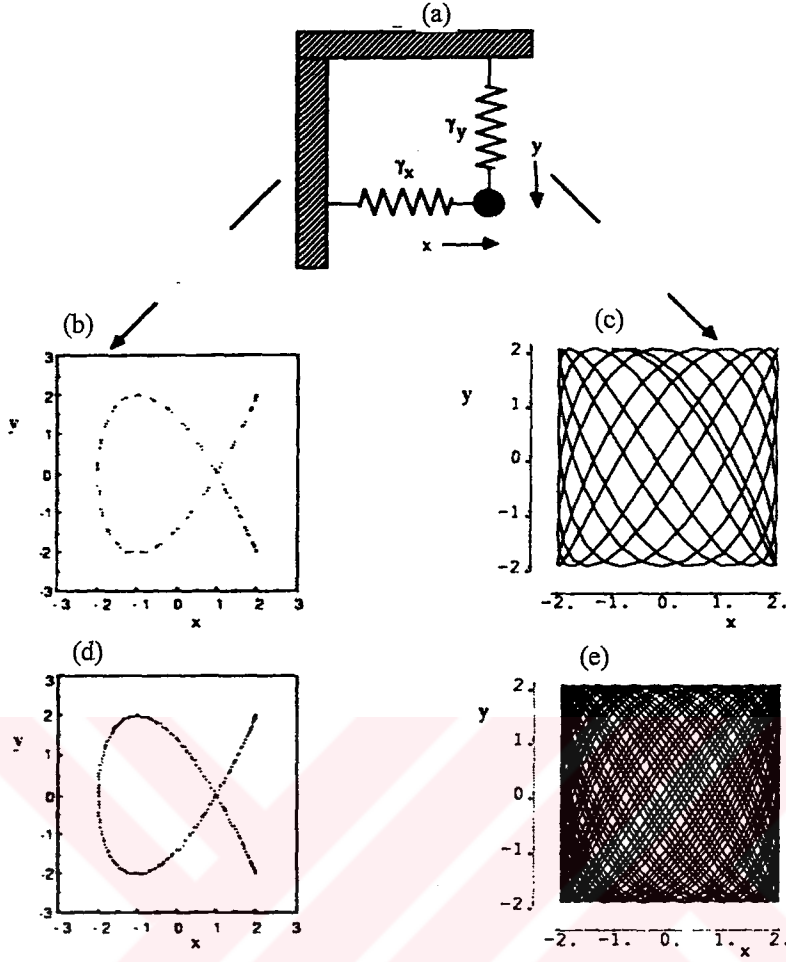
Bütünleşik sistemler, periyodik hareket eden ve periyodığimsi hareket eden sistemler olmak üzere ikiye ayrılırlar. Periyodik hareketin anlamı, sonlu bir zaman süresince faz yörüngesi kendini tekrar edecek demektir. Faz noktasının hareketinin tamamen diferansiyel denklemlerle belirlenmesi sebebiyle, bir kere faz noktası kendi alanını oluşturdu mu, bu alan sonsuza dek tekrarlanacaktır. Tek serbestlik derecesine sahip Hamiltonian sistemler bütünleşik ve periyodiktir.

Periyodığimsi hareket, periyodik olmayan bütünleşik Hamiltonian sistemler tarafından oluşturulurlar. Bu tür sistemlerde, faz uzayı yörüngesi bir torusun yüzeyi olarak ortaya çıkar.

Şekil 3.4.a'da görüldüğü üzere, periyodığimsi 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. (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. (d) ve (e)'de $\gamma_x / \gamma_y = 4/10$ olursa, hareket periyodığimsidir ve kütle bir alanı tarar. Yayların bağlı olmamaları sebebiyle, herbirinin enerjisi zaman içerisinde sabittir;

$$E_x = \frac{1}{2m} \cdot p_x^2 + \frac{1}{2} \gamma_x^2 = c_1 \quad (3.9)$$

$$E_y = \frac{1}{2m} \cdot p_y^2 + \frac{1}{2} \gamma_y^2 = c_1 \quad (3.10)$$



Şekil 3.4. 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 oranı irrasyonel ise periyodikimsi faz uzayının 1000 adım sonraki görüntüsü (Haile, 1991)

Bu iki denklem, dört boyutlu faz uzayında bir torusun iki boyutlu yüzeyini belirlerler. Sistemin izole olması sebebiyle, Hamiltonian toplam enerjidir;

$$E_T = E_x + E_y = \text{sabit} \quad (3.11)$$

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 4 (b) ve (c)'de görüldüğü gibi, sürekli olarak reel x-y düzleminde belirli bir yolda ileri geri hareket eder. Bu faz yörüngesinde (3.9) ve (3.10)'da 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 5 (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.

3.1.2.2. Ayrık Sistemler

Ayrık sistemler beş alt sisteme ayrılır: non-ergodik, ergodik, karşık, K akımı ve B akımı. Bu beş alt sistemin aralarındaki fark kararlılık fikrini temel alır; yani yörüngenin şekil 5'te 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;

$$H = H_o + H_p \quad (3.12)$$

Burada H_o bütünleşik bir Hamiltonian ve H_p küçük bir sapmadır. İki boyutlu harmonik osilatör örneğinde (şekil 3.4) x ve y yönleri arasında non-lineer bir bağlam ile sisteme küçük bir sapma eklediğimizi varsayalım. Bunun gibi sistemlerde, ayrık 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.

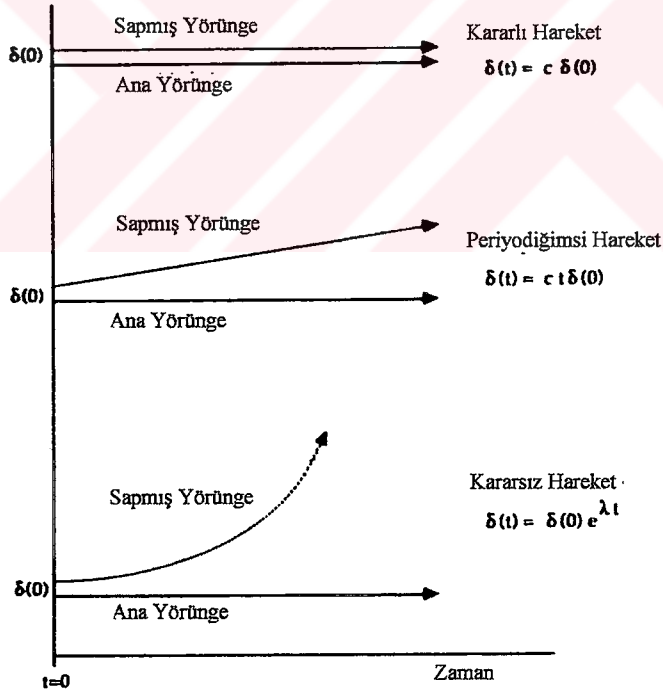
Ergodisiteye atfedilmiş birçok anlam mevcuttur. Boltzmann'a ithaf edilen anlam şöyledir;

“yeterince uzun bir zaman sonra faz noktası sabit Hamiltonian yüzey üzerindeki tüm konfigürasyonlardan geçer.”

Bununla ilişkili bir kavram olarak da periyodikimsi 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. Herbirine sıfır anında $d(0)$ yerdeğişimi (sapma) uygulanmıştır; kararsızlığın seviyesi sapmış yörüngenin esas alandan farklılaşma hızına göre belirlenir. Bu sebeple, kararlı bir yörünge boyunca yerdeğişim sabittir (en üstte), periyodikimsi bir yörünge boyunca yerdeğişim yavaşça artar (ortada), fakat kararsız bir yörüngede yerdeğişim eksponansiyel olarak artar. Periyodikimsi harekette değişimin artışı, burada görüldüğü gibi, lineer olmaz zorunda değildir, fakat artışın formu ne olursa olsun, kararsız hareketin eksponansiyel artışıyla karşılaştırıldığında, hız yavaştır. Şekil 3.5'te, kararlı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları görülmektedir.



Şekil 3.5. Kararlı ve kararsız yörüngelerin bir sapma verildiği zamanki davranışları (Haile, 1991)

Bu orijinal tanımlamalara göre, üç boyuttaki dinamik sistemler ne ergodiktir ne de periyodikimsidir. Non-ergodisitenin ispatı set teorisinden ve ölçüm teorisinden matematik etmenler içerir. Kısaca değinmek gerekirse, “olası her noktadan (ya da yaklaşık olarak her

noktadan) geçen sabit Hamiltonian yüzeydeki yörünge için, alan ergeç kendiyle kesişecektir. Kesişme noktasında hareket ister istemez periyodik olacaktır.

Bunun ışığında, modern istatistik mekanikçiler, 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 birşey 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” ta 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 determinizmine rağmen, rastgele oluşur.

Denge dışı durumdan denge durumuna evrimleşecek bir sistem için, iki koşul sağlanmalıdır. Birincisi, tüm sabit-Hamiltonian yüzeye erişim sağlamalıdır. 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 uzayaltına sınırlandırılmıştır.

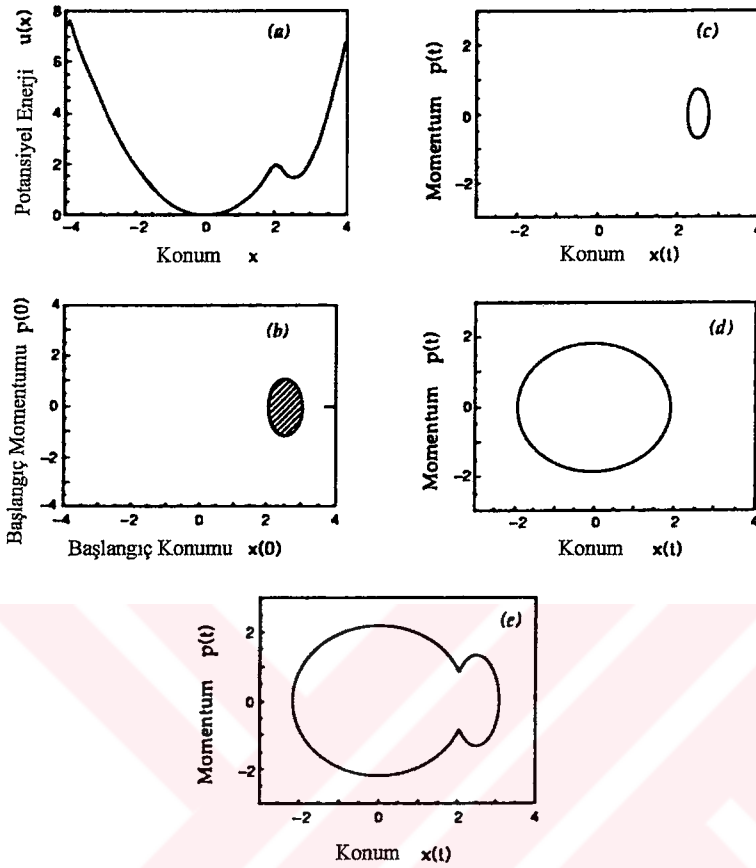
Alanlar periyodik ya da periyodigimsi olsalar bile, hesaplanan yörüngenin simülasyondaki sonlu zaman esnasında, H yüzeyini verdiğinden emin olmayız; alan yüzeyin bir bölgesinde sıkışabilir. Bu tür durumlar “yarıkararlı (metastable)” olarak adlandırılır. Potansiyel fonksiyonu;

$$U(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}\gamma_1 x^2 & x < x_1 \\ \frac{3}{4}\left(\frac{1}{2}\gamma_1 x_1^2\right) + \frac{1}{2}\gamma_2(x - x_2)^2 & x \geq x_1 \end{cases} \quad (3.13)$$

formuna uyan bir boyutlu osilatör göz önüne alınırsa; bu fonksiyonun formu şekil 6'da görülmektedir. Bu potansiyeldeki olası güçlük, x_1 bariyeriyle birincil minimum noktasından ayrılan ikincil minimum noktasıdır. Bu sistemin enerji korunum denklemi;

$$E_T = \begin{cases} \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} + \frac{1}{2}\gamma_1 x^2 & x < x_1 \\ \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} + \frac{3}{4}\left(\frac{1}{2}\gamma_1 x_1^2\right) + \frac{1}{2}\gamma_2(x^2 - x_2^2) & x \geq x_1 \end{cases} \quad (3.14)$$

olacaktır. $m = 1$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 5$, $x_1 = 2$ ve $x_2 = 5$ (tümü keyfi birimlerde) olduğu varsayılırsa, şekil 3.6.a'daki yörünge elde edilecektir. Şekil 3.6.b'deki herhangi bir başlangıç pozisyonu ve başlangıç momentumu, alanın ikinci minimum için bölgesini belirler, sonuçta 3.6.c'deki gibi faz uzayı yörüngelerini oluşturur. Tezat olarak, diğer başlangıç koşulları, şekil 3.6.d'deki gibi faz uzayı izlerini oluşturacak şekilde birincil minimum için olan bölgeyi verecektir. Dikkat edilmelidir ki, şekil 3.6.c ve 3.6.d'deki yörüngeler aynı toplam enerjiye sahiptirler. Her ikisi de aynı sabit enerji yüzeyinin parçalarıdır. Yine de, şekil 3.6.c'deki yörünge, şekil 3.6.d'deki yörüngede hesaplanmış özelliklerden farklı ortalama özellikler verirler. Bu basit örnek göstermektedir ki, bazı sistemler için, yörünge'nin dengesiz hareket derecesinden bir başkasına geçebileceği kritik enerjiler olabilir.



Şekil 3.6. Faz uzayı içine sıkışmış faz noktası örneği. a) $x = 2,5$ 'ta 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) (Haile, 1991)

Şekil 3.3'te görülen Hamiltonian dinamiğin yedi sınıfı (periyodikten B akımına) tam olarak birbirinden ayrık değildirler, öneğin 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. MD simülasyonlarında, hareket denklemleri ayrıktır, hesaplanan alanlar yinelenir, Hamiltonian en az karışık, tercihen K akımıdır.

3.1.3. Periyodik Sınır Şartları (PBC)

Makroskopik boyutlardaki sistemlerde, yan çepherlerle etkileşerek çevresel sapsmalara uğrayabilecek atomların sayısı görece azdır. $N = 10^{21}$ adet atom içeren sıvı halde üç boyutlu bir sistem göz önüne aldığımızda, yan çepherlerin yakınlarındaki atomların 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.

PBC'ni simülasyonda kullanabilmek için, V hacminde sınırlı N adet atoma sahip olmamız gerekir. V hacmindeki atomların yığının bir parçası olduğunu göz önünde bulundurursak; V hacmi "esas hücre" olarak adlandırılır, ki bu hücre ve çevresindeki 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 makroskopik bir örneğini oluşturuyormuş gibi davranır. Bu periyodiklik, imaj hücrelerindeki imajların pozisyonlarına ve momentumlarına etki eder.

3.1.4. 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, PBC'nın kullanımını simetrisi bozabilir ve bu değerlerin korunumunu engelleyebilir. Bu bölümde periyodik sınırların korunum ilkelerine etkileri ele alınacaktır.

3.1.4.1. 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 yüzden bir imaj atomu girer.

3.1.4.2. 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 enerji de korunur.

3.1.4.3. 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 etilememektedir. Bu durum $N < 100$ olan sistemlerde bir düzeltme yapılmasını gerektirir fakat $N > 100$ olan sistemlerde bu düzeltme ihmal edilebilir.

3.1.4.4. Açısal Momentum

Uzaysal rotasyon altındaki değişmezlik, açısal momentumun korunumunu sağlar. Sisteme izole olması sebebiyle dışarıdan bir tork etkisi olmayacağından;

$$B = \sum_i^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i = \text{sabit} \quad (3.15)$$

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;

$$B(t) = \sum_i^N \{[\mathbf{r}_i(t) \times \mathbf{p}_i(t)] + \mathbf{r}_m(t) \times \mathbf{p}_m(t)\} \quad (3.16)$$

fakat $t + \Delta t$ 'de m atomu, $\mathbf{r}_m + \alpha.L$ pozisyonuna sahip imajıyla esas hücrede yer değiştirirse, bu durumda toplam açısal momentum;

$$B(t) = \sum_i^N [(r_i(t) \times p_i(t)) + (r_m + \alpha.L) \times p_m] \quad (3.17)$$

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.

3.2. Sonlu Fark Yöntemleri

Moleküler dinamik algoritmaları iki sınıfa ayrılır; moleküller arası kuvvetlerin moleküller arası mesafenin sürekli fonksiyonu olduğu yumuşak yapılar ve kuvvetlerin süresiz olduğu sert yapılar. Sert yapılar için kuvvetlerdeki süresizlik moleküller arası potansiyellere de yansır. r yarıçaplı sert küreler aşağıdaki potansiyel enerji fonksiyonuyla etkileşirler;

$$u(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ 0 & r > \sigma \end{cases} \quad (3.18)$$

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 hesaplaması 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 çözmemiz 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 hızlar sabit değildir. Çarpışma, sert kürelerde olduğu gibi kesin değildir. Yumuşak yapılar arasındaki çarpışmalar anlık gerçekleşmez; daha çok, sonlu bir sürede açığa çıkan güçlü tepki etkileşimleri vardır. 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.

3.2.1. Bir Prototip: Euler'in Metodu

En basit sonlu fark yöntemlerinden biri Euler'inkidir.

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \dot{u}(t) \cdot \Delta t \quad (3.19)$$

Bu formu ODHO'ya uygularsak, osilatörün pozisyonu x ve hızı v ;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \dot{x}(t) \cdot \Delta t \quad (3.20)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \dot{v}(t) \cdot \Delta t \quad (3.21)$$

olur. Bu durumda, (3.6)'ya göre ODHO;

$$\dot{x}(t) = v(t) \quad (3.22)$$

$$\dot{v}(t) = \ddot{x}(t) = -\frac{\gamma}{m} \cdot x(t) = -\omega^2 \cdot x(t) \quad (3.23)$$

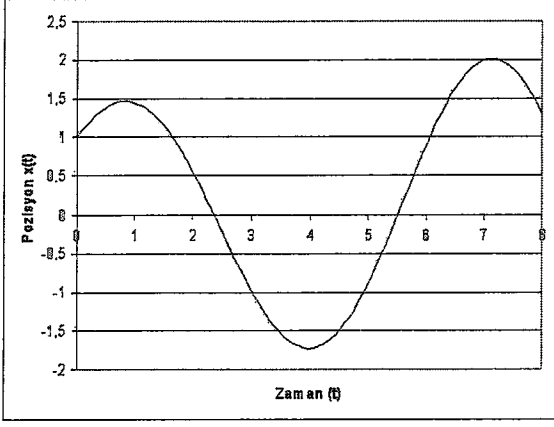
eşitliklerine sahiptir. Burada ω salınım frekansıdır. Bu sebeple (3.20) ve (3.21)'teki ifadeleri kullanarak, ODHO için Euler'in yöntemi şu hali alır;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t) \cdot \Delta t \quad (3.24)$$

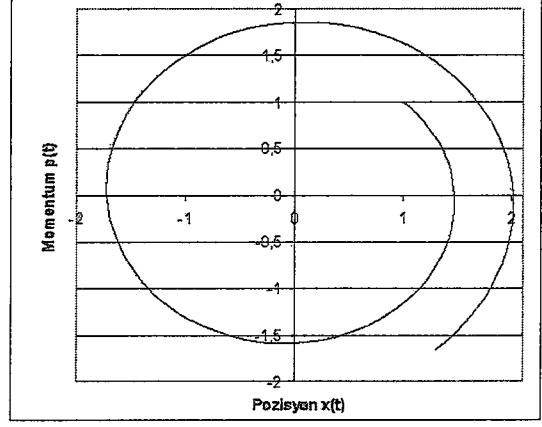
$$v(t + \Delta t) = v(t) - \omega^2 x(t) \cdot \Delta t \quad (3.25)$$

Kütle m , yay sabiti γ ve başlangıç şartları $x(t_0)$ ve $v(t_0)$ 'ın belirli değerleri için (3.24) ve (3.25) 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 (3.24) ve (3.25) sonlu fark yöntemiyle çalıştırsak şekil 3.7'deki gibi bir durum elde etmiş oluruz. Şekil 3.7'den 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 bir spiral vermektedir. Basit anlamda bu durum, nümerik olarak hesaplanan yörüngelerin bir takım hatalar içerdiğini göstermektedir.



(a)



(b)

Şekil 3.7. ODHO için Euler yönteminin kullanılması. (a) Parçacığın zaman içerisindeki yer değişimi (b) Faz uzayı yörüngesi

3.2.2. Hatalar

Bir sonlu fark yönteminde iki tip hata bulunur. 1. kesme hatası, 2. yuvarlama hatası. 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;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + \dots \quad (3.26)$$

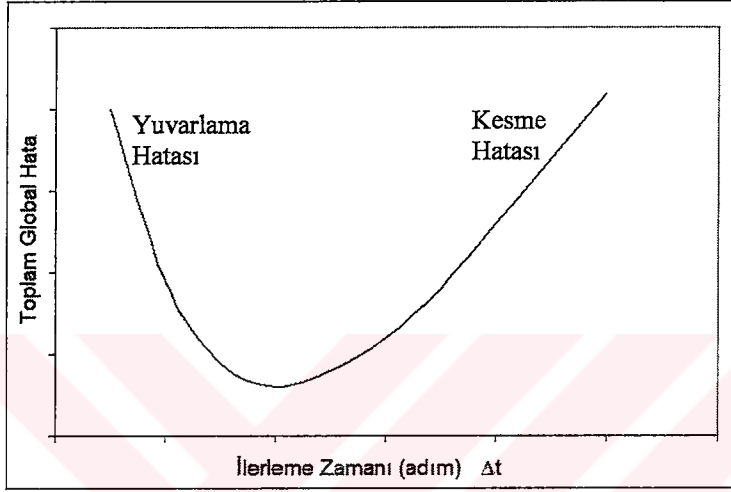
halini alır. (3.41)'i bu seriyle karşılaştırdığımız zaman Euler yöntemindeki kesme hatası (KH);

$$KH = \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + \dots \quad (3.27)$$

olur. KH'sı 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 algoritmasının içinde resmen vardır, değeri yapılan hesaplamaların hassasiyetinden bağımsızdır.

Bunun aksine yuvarlama hatası, sonlu fark algoritmasının uygulanmasından ortaya çıkan yüm 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 3.8’de yuvarlama ve kesme hatalarının Δt değeriyle toplam global hataya etkisi görülebilir.



Şekil 3.8. Kesme ve yuvarlama hatalarının sonlu fark algoritmasına etkisi (Haile, 1991)

Global kesme hatası da, global yuvarlama hatası da şekil 3.8’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 arttırır. Bu durumda Δt ’yi azaltmak, şekil 3.8’den de görüleceği üzere, daha hassas sonuçlar elde etmemizi 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.

3.2.3. 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 kararlıdırlar, fakat kritik bir değer sonra kararsızlaşırlar.

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;

$$e_x(t) = x^*(t) - x(t) \quad (3.28)$$

$$e_v(t) = v^*(t) - v(t) \quad (3.29)$$

e_x pozisyon için toplam lokal hata ve e_v hız için toplam lokal hata olur. Euler yönteminde hatalı değerleri kullandığımızda ODHO için,

$$e_x(t + \Delta t) = e_x(t) - e_v(t) \cdot \Delta t \quad (3.30)$$

$$e_v(t + \Delta t) = e_v(t) - \omega^2 e_x(t) \cdot \Delta t \quad (3.31)$$

olur. bu iki denklem vektör formunda yazılabilir;

$$e(t + \Delta t) = \mathbf{A} \cdot e(t) \quad (3.32)$$

Burada $e = (e_x, e_v)^T$ hataların kolon vektörü ve \mathbf{A} da kararlılık matrisidir.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \Delta t \\ -\omega^2 \Delta t & 1 \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

Şimdi, eğer \mathbf{A} birim vektörün dışında ($\lambda > 1$) gibi bir özdeğere sahipse, \mathbf{A} hataları büyütmemektedir ve algoritma kararsızdır. Özdeğer,

$$|\mathbf{A} - \lambda \cdot \mathbf{I}| = 0 \quad (3.34)$$

karakteristik denklemini sağlar. Burada I birim matristir. (3.34)'deki A için denklem;

$$(1 - \lambda)^2 + \omega^2(\Delta t)^2 = 0 \quad (3.35)$$

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 limiti ($\Delta t = 2$)'nin altındadır. Fakat Δt küçüldükçe yörünge gerçek çözüme yaklaşmakta, yani hassaslaşmaktadır.

3.2.4. Moleküler Dinamik İçin Algoritmalar

Moleküler dinamik için kullanılan sonlu fark yöntemlerinin temeli Taylor serilerine dayanır. Yüksek dereceli Runge-Kutta yöntemi ve Gear'ın Kestirimci-Düzeltici tekniğinin yanısıra, uygulamalarda çoklukla Verlet algoritması kullanılmaktadır.

3.2.4.1. 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;

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.36)$$

İkinci seri t anından Δt önceki pozisyonu için;

$$x(t + \Delta t) = x(t) - \frac{dx(t)}{dt} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 - \frac{1}{3!} \cdot \frac{d^3x(t)}{dt^3} \cdot \Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad (3.37)$$

şeklinde yazılabilir. Bu iki açılımı tek bir denklemde toplarsak;

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \frac{d^2x(t)}{dt^2} \cdot \Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (3.38)$$

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 atomlararası kuvvetlerden ve Newton'un ikinci yasasından elde edilmektedir. Hızları hesaplayabilmek için uygulamacılar bazı formüller geliştirmişlerdir. Bunlara örnek olarak yarım adımdaki hızların bulunabildiği;

$$v(t + \frac{1}{2}\Delta t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (3.39)$$

formülü ile Verlet'in kendisinin kullandığı birinci derece bir yaklaşım veren;

$$v(t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(-\Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.40)$$

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.

3.2.4.2. 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 öngörülenleri düzeltme

Basit bir örnek olarak, Euler'in yönteminin ODHO'ya uygulanmış kestirimci-düzeltilici temelli çözümü verilebilir.

Euler'in yöntemi ile (3.24) ve (3.25) kullanılarak $x(t + \Delta t)$ ve $v(t + \Delta t)$ öngörme:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) - w^2 x(t)\Delta t$$

$t + \Delta t$ 'deki deęerleri *hesaplama*:

$$\frac{f(t + \Delta t)}{m} = \frac{dv}{dt} = -\omega^2 x(t + \Delta t) \quad (3.41)$$

Öngörülerini *düzeltilme*: burada Euler yönteminin aynı formu kullanılır, fakat eğimler basamağın başında değil sonunda hesaplanır.

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t + \Delta t)\Delta t \quad (3.42)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) - \omega^2 x(t + \Delta t)\Delta t \quad (3.43)$$

Bu yöntem için algoritmik kararlılık incelenirse, Δt ve ω 'nın belirli halleri için $|\lambda| < 1$ olduğu görülebilir.

Öngürümcü, düzeltici yöntemler hem öngörme, hem de düzeltme basamaklarının sağladığı seçenekler sayesinde çok büyük bir esneklik sağlarlar. Bu basamaklar, tek bir basamak olabileceği gibi, ki bu durumda kendi kendilerini başlatırlar, çoklu basamaklardan da oluşabilirler, ki bu durumda hesaplamaya başlanması için özel bir işlem yapılmalıdır. Öngürümcü ve düzeltici basamakların mantıklı kombinasyonlarıyla çok iyi kararlılık elde edilmesi mümkündür, çünkü düzeltici basamak, öngürümcü basamakta ortaya çıkabilecek kararsızlıkları azaltıcı bir geri besleme mekanizması görevini görür.

Verilen herhangi bir öngürümcü-düzeltilci algoritma, hesaplama ve düzeltme basamaklarının tekrar ettirilmesiyle daha karmaşık ve daha yüksek dereceli hale getirilebilir. P , öngörüm, E hesaplama, C de düzeltme olarak tanımlanırsa, yukarıda anlatılan bu prosedür PEC olarak gösterilebilir. Eğer düzeltilmiş pozisyonlar ve hızlar ikinci bir öngörüm olarak kullanılırsa, bu durumda algoritma, $PEC(EC) = P(EC)^2$ halini alır. Açıkça E ve C basamakları istenildiği 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.

3.2.4.3. Gear PEC Algoritması

Öngürümcü-düzeltilci algoritmalar moleküler dinamikte ilk defa Rahman tarafından kullanılmışlardır (Rahman, 1964). Fakat, moleküler dinamikte yaygın olarak kullanılan

algoritmalar Gear tarafından tasarlanmıştır (Gear, 1971). Gear'ın önerdiği öngörücü-düzeltilici algoritma şu şekildedir;

Öngörme: pozisyonlara ve t zamanına göre türevlerine bağlı besinci derecen Taylor serileri kullanılarak $t+\Delta t$ anındaki r_i moleküler pozisyonlarını öngörme. Böylece, her bir basamakta r_i , \dot{r}_i , $r_i^{(iii)}$, $r_i^{(iv)}$ ve $r_i^{(v)}$ türevleri gerekecektir, bunlar da t anındaki Taylor açılımı yardımıyla $t+\Delta t$ anında öngörülür:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + r_i^{(i)}(t)(\Delta t) + r_i^{(ii)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(iii)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^4}{4!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^5}{5!} \quad (3.44)$$

$$r_i^{(i)}(t + \Delta t) = r_i^{(i)}(t) + r_i^{(ii)}(t)(\Delta t) + r_i^{(iii)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^4}{4!} \quad (3.45)$$

$$r_i^{(ii)}(t + \Delta t) = r_i^{(ii)}(t) + r_i^{(iii)}(t)(\Delta t) + r_i^{(iv)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^3}{3!} \quad (3.46)$$

$$r_i^{(iii)}(t + \Delta t) = r_i^{(iii)}(t) + r_i^{(iv)}(t)(\Delta t) + r_i^{(v)}(t)\frac{(\Delta t)^2}{2!} \quad (3.47)$$

$$r_i^{(iv)}(t + \Delta t) = r_i^{(iv)}(t) + r_i^{(v)}(t)(\Delta t) \quad (3.48)$$

$$r_i^{(v)}(t + \Delta t) = r_i^{(v)}(t) \quad (3.49)$$

Hesaplama: öngörölmüş pozisyonları kullanarak $t+\Delta t$ anında her bir atom üzerine etkiyen atomlararası kuvvet F_i 'yi hesaplama. i ve j atomları arasında etkiyen $u(r_{ij})$ sürekli potansiyel enerji fonksiyonu için, her bir atoma etkiyen kuvvet:

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \hat{r}_{ij} \quad (3.50)$$

burada, \hat{r}_{ij} , r_{ij} yönündeki birim vektördür. Kuvvetlerin hesaplanması zaman alıcı bir işlemdir çünkü (3.50) sistem içindeki her i molekülü için kullanılmalıdır. Yine de, zaman kazanmak için bazı yollar mevcuttur. Bunlardan biri olan Newton'un üçüncü yasası;

$$F_i(r_{ij}) = -F_j(r_{ij}) \quad (3.51)$$

kullanılırsa, hesaplama zamanı yarı yarıya azalacaktır.

Düzeltilme: öngörülen ivme ve hesaplanan kuvvet F_i arasındaki fark, $\Delta \dot{r}_i$ kullanarak öngörülen pozisyonları ve türevlerini düzeltme. (3.50)'de 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;

$$\Delta \ddot{r}_i = [\ddot{r}_i(t+\Delta t) - \ddot{r}_i^P(t+\Delta t)] \quad (3.52)$$

Gear'ın önerdiği algoritmada ikinci derece diferansiyel denklemler için, bu fark tüm öngörölmüş pozisyonları ve türevlerini bulmak için kullanılabilir. Böylece;

$$r_i = r_i^P + \alpha_0 \cdot \Delta R_2 \quad (3.53)$$

$$r_i^{(i)} \cdot \Delta t = r_i^{(i)P} \cdot \Delta t + \alpha_1 \cdot \Delta R_2 \quad (3.54)$$

$$\frac{r_i^{(ii)} \cdot \Delta t}{2!} = \frac{r_i^{(ii)P} \cdot (\Delta t)^2}{2!} + \alpha_2 \cdot \Delta R_2 \quad (3.55)$$

$$\frac{r_i^{(iii)} \cdot \Delta t}{3!} = \frac{r_i^{(iii)P} \cdot (\Delta t)^3}{3!} + \alpha_3 \cdot \Delta R_2 \quad (3.56)$$

$$\frac{r_i^{(iv)} \cdot \Delta t}{4!} = \frac{r_i^{(iv)P} \cdot (\Delta t)^4}{4!} + \alpha_4 \cdot \Delta R_2 \quad (3.57)$$

$$\frac{r_i^{(v)} \cdot \Delta t}{5!} = \frac{r_i^{(v)P} \cdot (\Delta t)^5}{5!} + \alpha_5 \cdot \Delta R_2 \quad (3.58)$$

burada

$$\Delta R_2 = \frac{\Delta r_i^{(ii)} (\Delta t)^2}{2!} \quad (3.59)$$

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.

3.2.5. Enerji Korunumu

Moleküler dinamik algoritmaları genellikle enerjinin korunumunu sağlama becerilerine göre değerlendirilirler. Yapılan incelemelerde, (Haile, 1991), 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.

3.2.6. Hesaplanan Yörüngelerin Güvenilirliği

Yapılan denemelerde, (Haile, 1991), 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, tolere edilebilirlik seviyesinin içindedir.

3.3. 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. Tüm bağlanmalar, çekirdekler ve Schrödinger denkleminin uyan elektronlar arasındaki elektrostatik etkileşmenin bir sonucudur.

Van der Waals bağlanmalarının en basit türleri asal gazlarda görülür. Yalıtılmış asal gaz atomlarının küresel simetrik olan dolu-kabuk elektron şekillenimleri 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 3.9'daki potansiyel eğrisi ile temsil edilir. Atomlar arasındaki kuvvet bu eğrinin eğiminin negatif işaretlisidir. Bu konuya bölüm 3.3.1.'de değinilecektir.

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. Atomlar arasındaki 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 çok büyük ölçüde değişikliğe uğratar ve enerji, bir atomun birden fazla oluşturduğu yerde, bu bağların bağlı yönlendirilmesine 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 yapıdır.

Kristalin, durgun atomların düzenli bir sıralanması olarak verilen tanımı, tümüyle doğru değildir. Bu durum, Heisenberg'in, bir parçacığın konumu ve momentumunun aynı anda ve tam olarak bilinmesinin mümkün olmadığını vurgulayan belirsizlik ilkesiyle çelişir. Böylece, mutlak sıfır sıcaklığında, kristaldeki atomlar kendi denge konumları etrafında titreşmek zorundadırlar. Bu, "sıfır noktası hareketi"nin bir sonucu olarak, atomların sahip oldukları enerji "sıfır noktası enerjisi" olarak bilinir. Daha yüksek sıcaklıklarda, bu hareketin genliği, atom ısısal enerji kazandıkça artar. Bu atomik hareketlere "örgü titreşimleri" adı verilir.

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 seçmemiz 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;

$$U(r^N) = \sum_{i < j} \sum u(r_{ij}) \quad (3.60)$$

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.

3.3.1. İki-cisim Potansiyelleri

1924 yılında Lennard-Jones iki-cisim potansiyelleri için kullanışlı bir model ortaya koymuştur;

$$u(r) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right] \quad (3.61)$$

burada,

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (3.62)$$

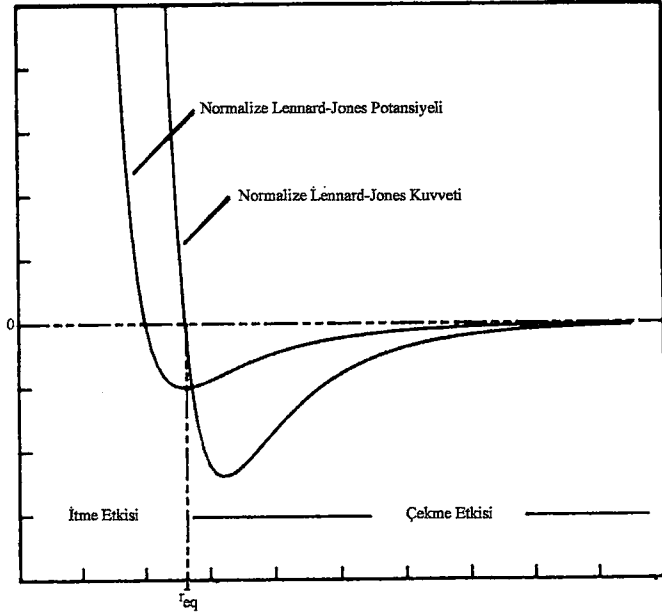
Lennard-Jones potansiyeli kısa mesafede itme kuvvetini, uzun mesafede çekme yayılımını sağlar. Kısa mesafeli itme kuvvetleri, malzemenin kendi içine çökmesini engellerken, uzun mesafeli çekmeler, kap içinde olmaması durumunda, malzemenin dağılmasını engeller. Bu kuvvetler ($n > m$ olmak üzere) n ve m büyüklüklerine bağlıdır. Genellikle $m = 6$ ve $n = 2m$ alınır, ki bu durum belli bir mantık çerçevesinde son derece uygundur. Bu durumda Lennard-Jones;

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] \quad (3.63)$$

(3.63)'te geriye kalan parametreler, σ , $u(r)$ 'de denge konumu ve ε , $u(r)$ 'nin minimumundaki enerjidir. Şekil 3.9'da argon atomu için Lennard-Jones potansiyeli grafiği görülebilir. Atomlararası kuvvetlerin korunması gerektiğinden, potansiyele sebebiyet veren kuvvet;

$$F(r) = -\frac{du(r)}{dr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \cdot \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (3.64)$$

Görülebileceği üzere, itme kuvvetleri pozitifken, çekme kuvvetleri negatiftir.



Şekil 3.9. Normalize Lennard-Jones potansiyeli ve kuvvetinin uzaklığa göre değişimi

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 Toensoff potansiyelleri yaygın olarak kullanılmaktadır.

3.3.2. 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 (Daw, 1983) metalik sistemlerdeki yüzeyler, alaşımlar, impüriteler ve kırılmalar konularının incelenmesi için kullanılmışlardır. Bu model, her atomu, tüm atomları içeren konak kafes içerisinde gömülü olarak varsayar. Bir impüritenin 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 fonksiyonudur. Arkaalan elektron yoğunluğunu sabit tutarak bir

sadeleştirme yapılırsa, atomun enerjisi, atomun elektron yoğunluğu ile sabit arkaalan yoğunluğuyla birleşen enerjidir. Bu, gömülme enerjisini arkaalan elektron yoğunluğu ve atomun cinsinin fonksiyonu olarak ifade eder.

Toplam enerji,

$$E_{top} = \sum_i F_i \cdot (\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(>i)} \Phi_{ij}(R_{ij}) \quad (3.65)$$

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 atomlarının arasındaki mesafedir. $\rho_{h,i}$ konak yoğunluğu bileşenlerin ρ^a atomik yoğunluklarının toplamıdır;

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^a(R_{ij}) \quad (3.66)$$

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 et.al. (Belak, 1990) yaptığı ve denge dışı durumların incelendiği GAM modeli, Finnis-Sinclair potansiyelleri ve Sutton-Chen potansiyelleri (Uludoğan, 2003) örnek verilebilir.

3.4. 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.

3.4.1. Başlangıç Süreci

Başlangıç süreci, kendi arasında önkoşulların belirlenmesi ve atomların belirlenmesi olarak ikiye ayrılır. Önkoşullar, 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.

3.4.1.1. 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 atomunki alınır.

Birimsiz (ya da indirgenmiş) nicelik formları, bir yıldız sembolü ile belirlenir. Örnek olarak (3.84) Lennad-Jones potansiyeli için şu form yazılabilir;

$$u^*(r^*) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r^*} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r^*} \right)^{12} \right] \quad (3.67)$$

burada $u^* = u / \varepsilon$ ve $r^* = r / \sigma$ olur. Diğer türetilmiş niceliklerin indirgenmiş formları çizelge 3.1.'de verilmiştir.

Çizelge 3.1. Moleküler Dinamik Simülasyonlarında Kullanılan Birim Sistemi

Temel nicelikler;	kütle	$m = \text{atomun kütlesi}$
	uzunluk	σ
	enerji	ε
	zaman	$\sigma \sqrt{m/\varepsilon}$
Türetilmiş Değerler;		
Adyabatik sıkıştırılabilirlik		$\kappa_s^* = \kappa_s \cdot \varepsilon / \sigma^3$
Kurulumsal iç enerji		$U_c^* = U_c / N \cdot \varepsilon$
Yoğunluk		$\rho^* = N \cdot \sigma^3 / V$
Kuvvet		$F^* = F \cdot \varepsilon / \sigma$
Isı kapasitesi		$C_v^* = C_v / N \cdot k_B$
Radyal konum		$r^* = r / \sigma$
Basınç		$P^* = P \cdot \sigma^3 / \varepsilon$
Sıcaklık		$T^* = k_B \cdot T / \varepsilon$
Isıl basınç katsayısı		$\gamma_v^* = \gamma_v \cdot \sigma^3 / \varepsilon$
Toplam enerji		$E^* = E / N \cdot \varepsilon$
hız		$v^* = v \sqrt{m/\varepsilon}$

Durum Şartları: izole 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.

E^* için bir değer belirlemek, atomik hızların ölçeklendirilmesiyle mümkün olabilir. D ve A alt indislerini “istenen” ve “gerçekleşen” değerler için kullanırsak;

$$E_A^* = E_{kA}^* + U^* \quad (3.68)$$

ve

$$E_{kD}^* = ED^* - U^* \quad (3.69)$$

Daha sonra hız vektörünün her bir komponentini aşağıdakilere göre ölçeklendirirsek;

$$v_{ix}^{yeni} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{E_{kD}^*}{E_{kA}^*}} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{E_D^* - U^*}{E_A^* - U^*}} \quad (3.70)$$

aynı ölçeklendirme y - ve z -komponentlerine de uygulanabilir.

$$E^* = \frac{1}{2N} \sum_i v_i^* \cdot v_i^* + U^* (r^N) \quad (3.71)$$

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.

$$T^* = \frac{1}{3N} \left\langle \sum_i v_i^* \cdot v_i^* \right\rangle \quad (3.72)$$

Bu yüzden, (3.70)'i ölçeklendirmekten ziyade başlangıç hızları $v_i(0)$ 'i ölçeklendiririz, böylelikle başlangıçta istenen sıcaklık T_D^* elde edilir,

$$v_{ix}^{yeni} = v_{ix}^* \sqrt{\frac{T_D^*}{T_A^*}} \quad (3.73)$$

Burada T_A^* , (3.72)'te 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, (3.73)'teki ölçeklendirme ile set noktası sıcaklığı elde etmek, (3.70)'deki 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 (3.70), 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,

$$L^* = \frac{L}{\sigma} = \left(\frac{N}{\rho^*} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.74)$$

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.

3.4.1.2. 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 rastgele belirlenmemelidirler, çünkü rastgele atamalar, komşu atomların yapay büyüklükte üstüste binmesine sebep olur; bu da sonlu fark algoritmasında nümerik hatalara sebep olacak itme kuvvetleri yaratır.

Başlangıç hızları $v_i(0)$ rastgele belirlenebilir ya da bir önceki simülasyondan alınabilir. Rastgele belirlenen hızlar için, ξ_x, ξ_y, ξ_z $[-1, +1]$ aralığında düzgün dağılmış üç rastgele sayı ise; $v_i(0)$ için kartezyen komponentler şöyle verilir;

$$v_{ix}^*(0) = \frac{\xi_x}{\xi}; v_{iy}^*(0) = \frac{\xi_y}{\xi}; v_{iz}^*(0) = \frac{\xi_z}{\xi} \quad (3.75)$$

burada $\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}$ olur. Bu başlangıç hızları set noktası toplam enerjisini sağlayacak şekilde (3.70)'den ya da set noktası sıcaklığını sağlayacak şekilde (3.73)'ten 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.

3.4.2. 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 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.

3.4.2.1. Dengeye Yaklaşma

Dengeleme sırasında, birçok özeliğin ortalama değerleri kararlı değildir; daha ziyade, ortalamalar denge değerlerine doğru ilerlerler. Yine de, sistemin izole olması durumunda, toplam enerji sistem dengede olmasa 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 izlemememizi 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,

$$\lambda = \frac{1}{3} [\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z] \quad (3.76)$$

burada,

$$\lambda_x = \frac{1}{N} \sum_i^N \cos\left(\frac{4\pi x_i}{a}\right) \quad (3.77)$$

a , kafesin birim hücresinin 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 rastgele 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;

$$H_x = \sum_{\Delta v_x} f(v_x) \ln f(v_x) \Delta v_x \quad (3.78)$$

Burada $f(v_x)$ atomik hızların x -komponentinin dağılımıdır.

$$f(v_x) \Delta v_x = \frac{1}{N} \sum_i^N \delta(v_x - v_{xi}) \Delta v_x \quad (3.79)$$

λ değeri beklenen değer etrafında dalgalanmadığı ve H-fonksiyonu Maxwell hız dağılımı ile uyumlu olmadığı sürece sistem dengede olmayacaktır.

3.4.2.2. 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. Isıl 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 makroskopik kısımlarının sınırları arasında da bulunmamalıdır.

Denge tanımı, moleküler dinamikte görelilik göstermektedir. Öncelikle, makroskopik bir kavram olmasından ötürü: makroskopik büyüklükteki bir sisteme sonlu bir süre etkir. Sistemi anlık olarak örneklemek yeterli değildir. İkincisi, denge, gözlemci için gerekli olan sonlu bir süre ile ilgilidir. Buna örnek olarak, bir buçağın 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.

3.4.3. 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;

$$\Delta r^{*2}(t) = \frac{1}{N} \sum_i [r_i^*(t) - r_i^*(0)]^2 \quad (3.80)$$

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 kriticalize akışkanlar ve kısmi ergimiş katılar için, $g(r)$, geriye kalan kafes yapısının artıklarını gösterebilir, bu artıklar tamamen akışkan faza geçildiğinde yok olacaktır.

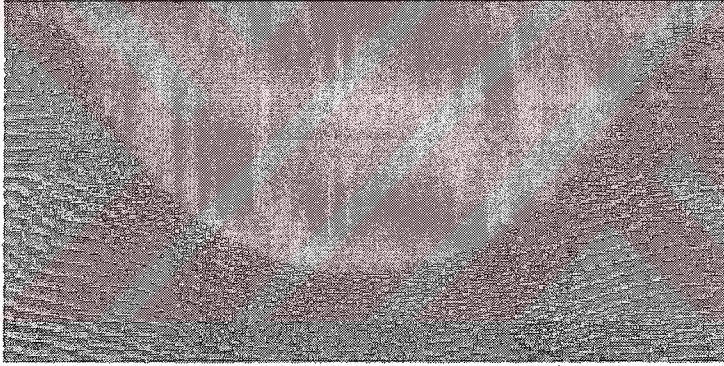
Radyal dağılım fonksiyonu şu şekilde verilir;

$$\rho g(r) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \delta_D [r - r_{ij}] \right\rangle \quad (3.81)$$

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. MD Kullanılarak Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar

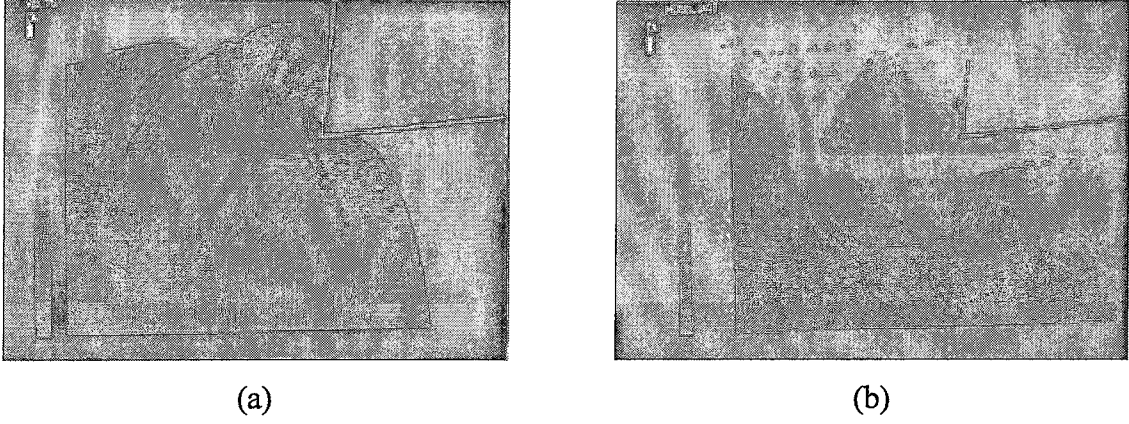
Belak v.d. yaptıkları modellemede (Belak, 1990), gömülü atom metodunun modifiye edilmiş bir biçimini kullanarak metallerde nano ölçekte dalmayı simüle etmişlerdir. Yaptıkları çalışmalar başlangıç niteliğinde ve kendinden sonra gelen araştırmacılara yol gösterici nitelikte olmuştur. Şekil 3.10'da Belak v.d. yapmış oldukları modelden bir örnek görülmektedir.



Şekil 3.10. Belak v.d. yapmış oldukları çalışmada dalıcı altında oluşan deformasyon ve dalma boşluğundaki sağ-sol asimetrisi (Belak, 1990)

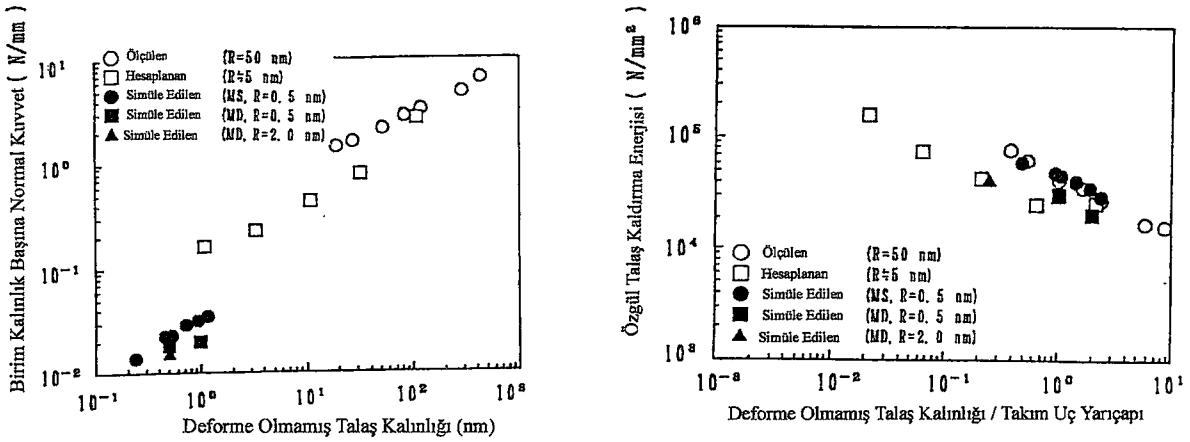
Taniguchi v.d. yaptıkları modelde, (Taniguchi, 1992), bakır malzemenin karbon atomlu kesici takım ile iki boyutlu talaş kaldırılması modellenmiş, Cu-Cu ve C-C atomları arasında Morse potansiyeli, Cu-C atomları arasında ise Born-Mayer potansiyeli kullanılmıştır. Taniguchi v.d. göre talaş kaldırma sırasında ortaya çıkan ısı, işparçasındaki dislokasyonların hareketine bağlıdır; nano ölçekte talaş kaldırma mekanizması, işparçası malzemesinin kristal oryantasyonuna bağlıdır; tek kristal yapı malzemenin deformasyonu, yüzeydeki malzeme özelliklerinin önemli rol oynaması nedeniyle mikro ölçekte talaş kaldırmadan oldukça farklıdır; basit bir çok kristal yapı malzemenin talaş kaldırma simülasyonunda görülmektedir ki; işparçasındaki plastik deformasyon önce tane sınırlarında oluşmakta, daha sonra tanelerin

içine yönelmektedir. Şekil 3.11’de Taniguchi v.d. yaptıkları modelde, farklı kristal yönelmelerinde ortaya çıkan işparçası deformasyonları görülebilmektedir.



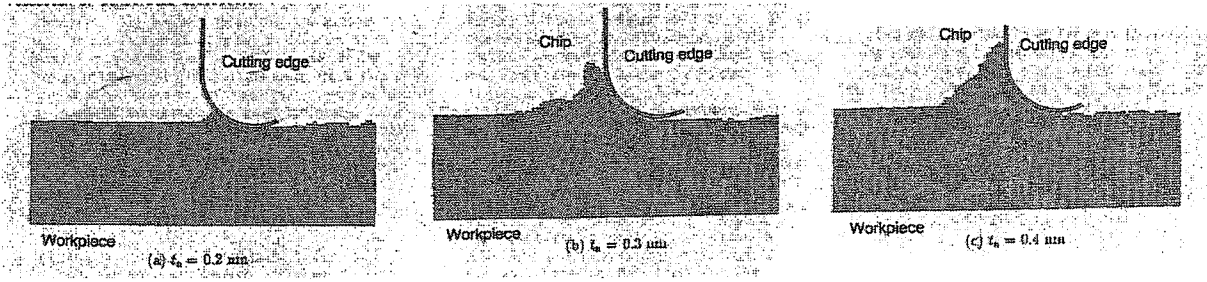
Şekil 3.11. Farklı kristal yönelmelerinde ortaya çıkan işparçası deformasyonları.
a) $X = [1\ 0\ 1]$, $Y = [-1\ 0\ 1]$ kristal yönelmesinde b) $X = [1\ 0\ 0]$, $Y = [0\ 0\ 1]$ kristal yönelmesinde işparçası deformasyonları (Taniguchi, 1992)

Ikawa v.d., yaptıkları modeldeki ilk çalışmalarında, (Ikawa, 1992), 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 uç yarıçapı arttıkça kesici takımın sürme ve perdahlama kuvvetlerinin artması sebebiyle kesme kuvvetleri de artmaktadır. Şekil 3.12.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 3.12.b’de özgül enerjinin kesme derinliği/uç yarıçapı fonksiyonuna göre değişimi görülmektedir.



Şekil 3.12. Ikawa v.d. göre talaş kaldırma parametrelerinin kuvvet ve özgül enerjiye ekileri. a) kesme kuvvetlerinin deforme olmamış talaş kalınlığı (kesme derinliği) fonksiyonu olarak değişimi; b) Özgül enerjinin kesme derinliği/uç yarıçapı fonksiyonuna göre eğişi (Ikawa, 1992)

Ikawa v.d. yaptıkları modeldeki bir diğer çalışmada, (Ikawa, 1993), 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 takım ile talaş kaldırılması esnasında 0,2 nm kesme derinliğinin altında talaş kaldırma işlemi yapılamamaktadır. Talaş kaldırmanın oluşması derinliği 0,3 nm'lik kesme derinliklerinde ve yukarısında gözlenmektedir. 10 nm uç yarıçaplı kesici takım kullanımında ise minimum talaş kaldırma derinliği 0,6 nm'ye çıkmaktadır. Alüminyum malzemenin benzer kuşullarda talaş kaldırılmasında, 5 nm uç yarıçaplı bir takım kullanımında minimum talaş kaldırma derinliği 1.2 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 3.13'de bakır malzemenin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu görülmektedir. Çizelge 3.2'de, Ikawa v.d. çalışmalarında elde edilen sonuçlara göre, talaş kaldırma parametrelerinin yüzey kalitesine ve yüzeyaltı deformasyonuna etkisi verilmektedir.



Şekil 3.13. Bakır malzemenin değişik kesme derinliklerinde talaş oluşumu a) kesme derinliği 0,2 nm, b) kesme derinliği 0,3 nm c) kesme derinliği 0,4 nm (Ikawa, 1993)

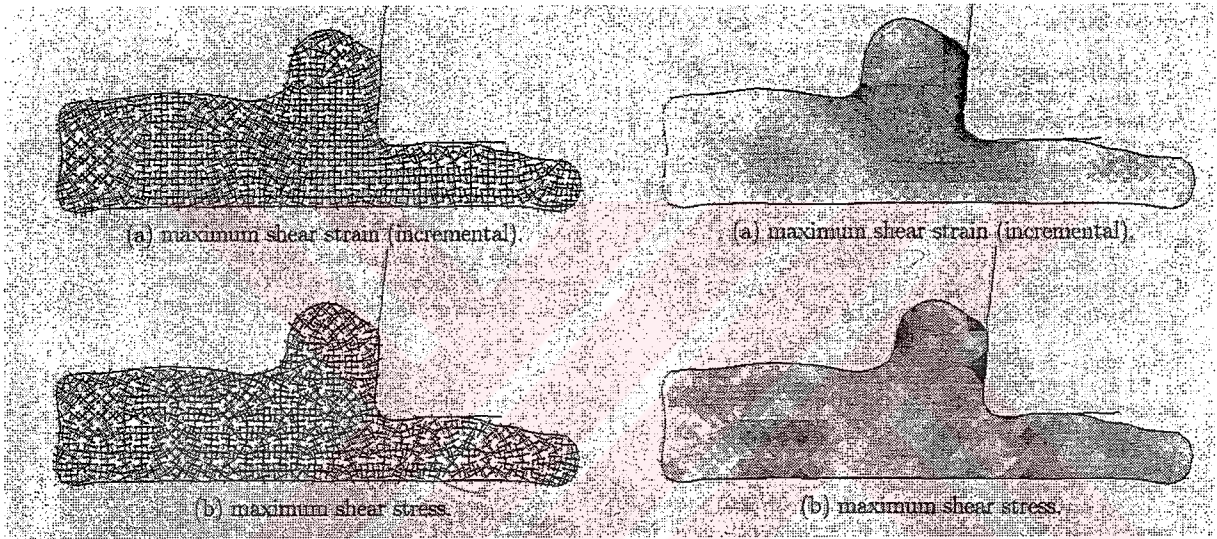
Çizelge 3.2. Talaş Kaldırma Parametrelerinin Yüzey Kalitesine ve Yüzeyaltı Deformasyonuna Etkisi, Talaş Kaldırma Hızı: 200 m/s (Ikawa, 1993)

İşparçası	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 Katmanın Derinliği (nm)	4,5	4,1	6,5	9,7
Dislokasyon Derinliği (nm)	5,3	7,6	9,7	≥ 10

Inamura v.d. yaptıkları çalışmalarda, atomların minimum enerji pozisyonlarını değiştirerek kuasi-statik şartlarda moleküler dinamik modellemeler yapmışlardır. Yaptıkları bir çalışmada, (Inamura, 1993), 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, (Inamura, 1993), toplam enerjinin %52'si plastik deformasyon esnasında birincil ve ikinci deformasyon bölgelerinde kaybedilmekte, %42'si takım altındaki plastik deformasyonda kaybedilmekte ve %6'sı da yüzey oluşumunda harcanmaktadır.

Yine aynı tekniğe dayanarak yapılan bir başka çalışmada, (Inamura, 1994), kesme yönüne bağlı kristal oryantasyonu, gerilim/gerinim konularında incelemeler yapılmıştır. Görülmektedir ki, (Inamura, 1994), işparçası 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 görece olarak sabit ve yüksek basınç 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 basınç şartlarından ötürü burkulmaya bağlıdır. Şekil 3.14.'te, Inamura v.d. yaptıkları modellerinde nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları görülmektedir.

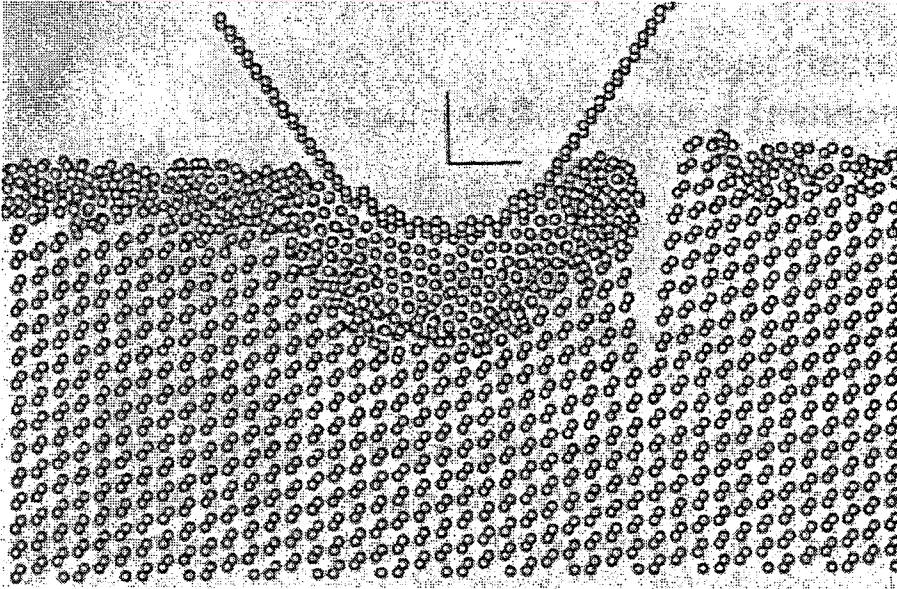


Şekil 3.14. Nano ölçekte talaş kaldırma esnasında oluşan gerilme ve gerinim dağılımları (Inamura, 1994)

Ikawa v.d. bir başka çalışmada, (Ikawa, 1994), polikristalin bakırın MD ile talaş kaldırma modelinde, kristal oryantasyonu ve tane sınırlarının etkilerinin, yüzey kalitesine etkilerini incelemiştirler. Ikawa v.d. göre, (Ikawa, 1994), 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 kullanarak 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.

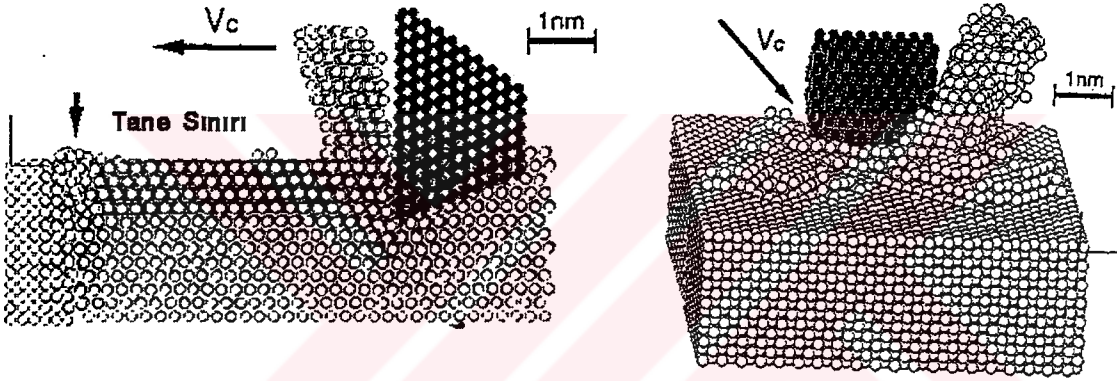
Kim ve Suh, (Kim, 1994), yaptıkları moleküler dinamik modelinde sürtünmeye etkiyen etmenleri, pürüz deformasyonu, adhezyon ve yüzeylerin birbirlerine sürtmelerini, incelemişler ve tek bir tanenin taban ile etkileşiminde genel kanının aksine adhezyonun baskın etki olmadığını belirlemiştirler. Kim ve Suh'a göre, net sürtünme kuvveti adhezif etkileşim yokken de oluşmaktadır. Ortalama sürtünme katsayısı değerleri, itme kuvvetlerinin etkin olduğu elastik etkileşimler sonucu elde edilmekte ve sürtünme enerjisinin dalgalanması, malzemenin sıcaklığını arttırmaktadır.

Rentsch ve Inasaki, yaptıkları çalışmada, (Rentsch, 1994), abrazif proseslerdeki yığılma olgusu üzerinde durmuşlar, modelleme tekniklerini geliştirme yönünde önermelerde bulunmuşlar ve ileriki çalışmalar için bir tanıtım yapmışlardır. Daha sonraki çalışmalarında, (Rentsch, 1995), gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırılması modellemesi yapılmış, bunun için Toensoff'un önerdiği model kullanılmış ve gevrek malzemeler için nano ölçekte dalma simülasyonu yapılmıştır. Görülmektedir ki, dalma esnasında okuşan 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 3.15'de Rentsch ve Inasaki'nin silisyum malzeme için nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma paterni görülmektedir.



Şekil 3.15. Silisyumun nano ölçekte dalma simülasyonunda oluşan kırılma paterni (Rentsch, 1995)

Rentsch ve Inasaki'nin bir diğer devam çalışmasında (Rentsch, 1996), 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 (Rentsch, 1996), küçük kesme derinliği ve keskin takımlar gerilim sınırlanması 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 3.16'da Rentsch ve Inasaki'nin tane sınırlarının nano ölçekte talaş kaldırma işlemine etkilerini inceledikleri moleküler dinamik simülasyonu görülmektedir.

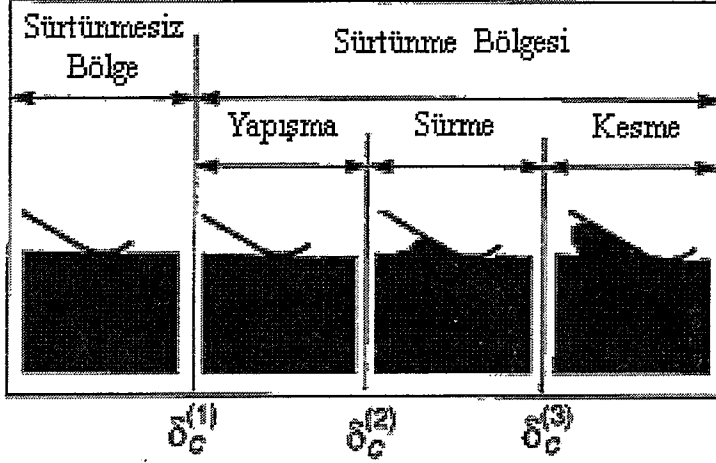


Şekil 3.16. Rentsch ve Inasaki'nin nano ölçekte talaş kaldırma işlemine etkilerini inceledikleri moleküler dinamik modeli a) 2 boyutlu simülasyon görüntüsü, b) 3 boyutlu simülasyon görüntüsü (Rentsch, 1996)

Maekawa ve Itoh, (Itoh, 1995), yeni bir MD yaklaşımı, alan sınırlı moleküler dinamik, ARMD, uygulamışlar ve nano ölçekte talaş kaldırmada sürtünme ve aşınma konularını incelemişlerdir. Maekawa ve Itoh'a göre, ARMD yaklaşımı ile hesaplama zamanı 1/3 azalmıştır. Aşınma mekanizması, takım ve parça atomlarının birbirleriyle difüzyonundan ve partiküllerin takıma yapışmasından oluşur. Nano ölçekte işlemedeki sürtünme ve takım aşınmasının etkileri, makro ölçekte işlemedekiyle benzerdir.

Zhang ve Tanaka, (Zhang, 1997), monokristalin bakırın elmas kesici takımla işlenmesinde aşınma mekanizması, sürtünme ve yüksek kayma hızlarında temas alanının değişimlerini incelemişlerdir. 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**, üçgenel 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 3.17’de deformasyon rejimlerinin değişimi görülmektedir.



Şekil 3.17. Atomistik kayma sisteminde deformasyon rejimlerinin değişimi, takım sağdan sola ilerlemektedir (Zhang, 1997)

Komanduri v.d., (Komanduri, 1998a), geliştirdikleri yeni bir moleküler dinamik yaklaşımı, uzunluk sınırlı moleküler dinamik, LRMD, ile bakır malzemenin nano ölçekte ortogonal talaş kaldırılması modellemiştir ve konvansiyonel moleküler dinamik teknikleriyle karşılaştırma yapmışlardır. Literatürdeki deneysel çalışmaların sonuçlarıyla LRMD tekniği ile elde edilen sonuçlar karşılaştırılarak LRMD tekniğinin geçerliliği incelenmiştir.

Komanduri v.d., (Komanduri, 1998b) çalışmalarında, takım geometrisinin nano ölçekte talaş kaldırmaya etkilerini incelemiştirler ve değişik uç yarıçaplı takımlarla yapılan modellemelerde, kesme derinliği (d_c) ve uç yarıçapı (r) d_c / r oranı sabit tutularak yapılan denemelerde görülmektedir ki, kesme derinliğinin artmasıyla, d_c / r oranından bağımsız olarak, kesme kuvvetlerinde artış ve özgül enerjide düşüş olmaktadır.

Komanduri v.d. yaptıkları bir başka çalışmada (Komanduri, 1999a), tek kristal malzemenin kristal oryantasyonlarının nano ölçekte talaş kaldırmaya etkilerini moleküler dinamik ile incelemiştirler. Aynı yıl yaptıkları bir başka çalışmada ise (Komanduri, 1999b), taşlamayı simüle etmek için negatif talaş açılı nano ölçekte talaş kaldırma modellemesi yapmışlardır. Görülmektedir ki, negatif talaş açısının artmasıyla talaş kaldırma kuvvetleri, talaş kaldırma kuvvetleri oranı ve özgül enerji artmaktadır. Ayrıca, (Komanduri, 2000a) çalışmalarında tek

kristal alüminyum malzemenin dalma ve çizme sırasında oluşan sürtünmenin nano ölçekte talaş kaldırmaya etkilerini incelemişlerdir. Komanduri v.d. göre, (Komanduri, 2000a), atomistik boyutta sürtünme, dalma derinliği ve normal kuvvetlerden bağımsızdır, dalıcıdaki talaş açısına bağlıdır.

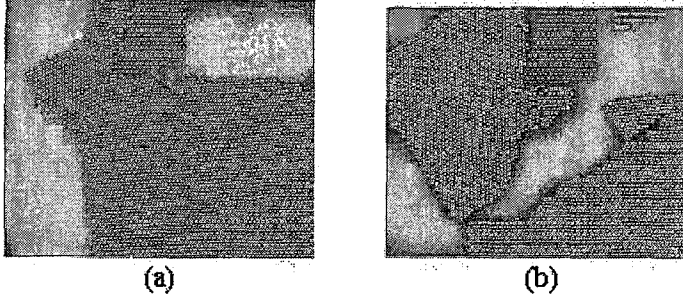
Komanduri v.d., tek kristal alüminyumda dalma ve çizmenin moleküler dinamik ile simülasyonu çalışmalarında, (Komanduri, 2000b), çok küçük dalma derinliklerinde, örneğin nano ölçekte dalmada, plastik deformasyonun, boyut etkisine bağlı olarak, iş parçasının teorik akma dayanımı tarafından belirlendiğini 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 (Komanduri, 2000b), çizme esnasında, atomlar arasındaki bağlar atomistik seviyede kopmak ve tekrar oluşmak zorundadırlar.

Komanduri v.d., tek kristal alüminyum malzemenin farklı kristal oryantasyonlarının ve kesme yönlerinin nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmasına etkilerini inceledikleri çalışmalarında (Komanduri, 2000c), elde ettikleri sonuçlara göre, yüzeyaltı deformasyonları, 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. MD 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), [-110]], dislokasyonlar kesme yönüne paralel oluşur. Bu sebeple malzeme kesme yönüne paralel deforme olur ve kayma açısı 45°'den küçüktür. Çizelge 3.3'de alüminyum malzemenin farklı kristal oryantasyonlarının ve kesme yönlerinin çeşitli kesme derinliklerindeki kuvvetlere ve özgül enerjiye etkileri görülmektedir.

Çizelge 3.3. Alüminyumun Farklı Kristal Oryantasyonlarında ve Kesme Yönlerinde Çeşitli Kesme Derinliklerindeki Kuvvetlere Ve Özgül Enerjiye Etkileri (Komanduri, 2000c)

Kristal Oryantasyonu	Kesme Yönü	Kesme Derinliği (nm)	Kesme Kuvveti / Birim Kalınlık (N/mm.10 ²)	Basma Kuvveti / Birim Kalınlık (N/mm.10 ²)	Basma Kuvveti / Kesme Kuvveti	Toplam Kuvvet / Birim Kalınlık (N/mm.10 ²)	Özgül Enerji (N/mm.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

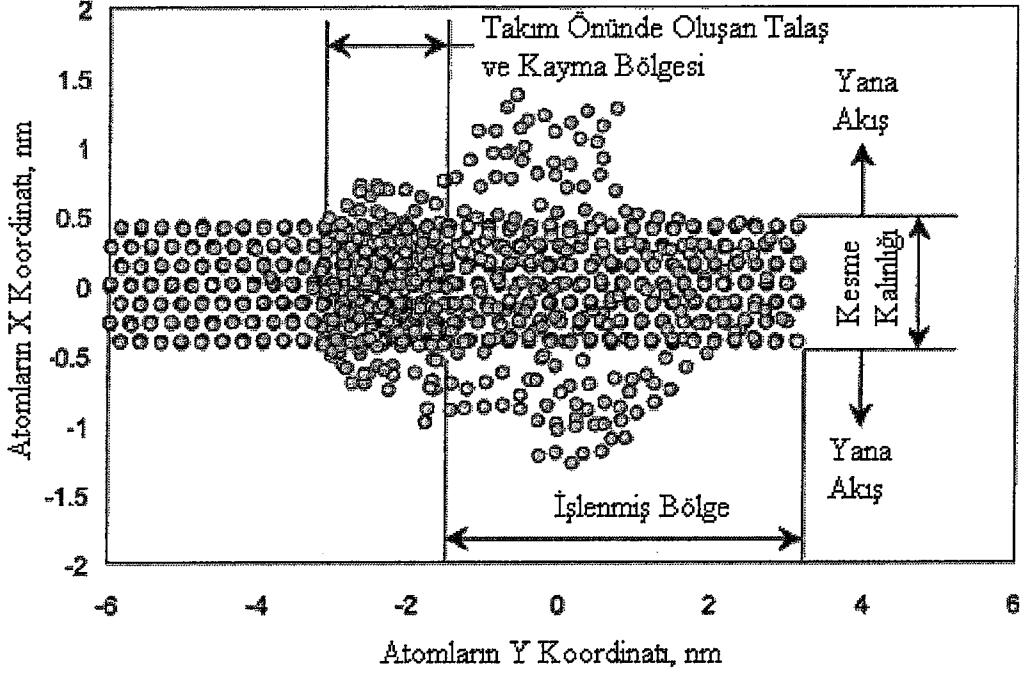
Komanduri v.d., nano ölçekte talaş kaldırmada takım çıkış etkilerinin incelenmesi amacıyla yaptıkları moleküler dinamik modellemede, (Komanduri, 2001a), elde ettikleri sonuçlara göre, çıkış bozulmasında negatif ya da pozitif çapak oluşumu iş parçasının sünekliğine ya da gevrekliğine bağlıdır. Kesmeden sonra oluşan çapağın boyutu (kalınlık ve yükseklik), artan pozitif talaş açısıyla beraber azalmaktadır. Nanometrik kesme esnasında, talaş kaldırma kuvvetlerinde de benzer azalma gözlenmektedir. Çapağın kalınlık/yükseklik oranları, değişik talaş açılı takımlarda, talaş kaldırma kuvvetleri oranları ile çok yakın çıkmaktadır. Şekil 3.18'de sünek ve gevrek malzemeler için oluşan çıkış bozulmaları görülebilir.



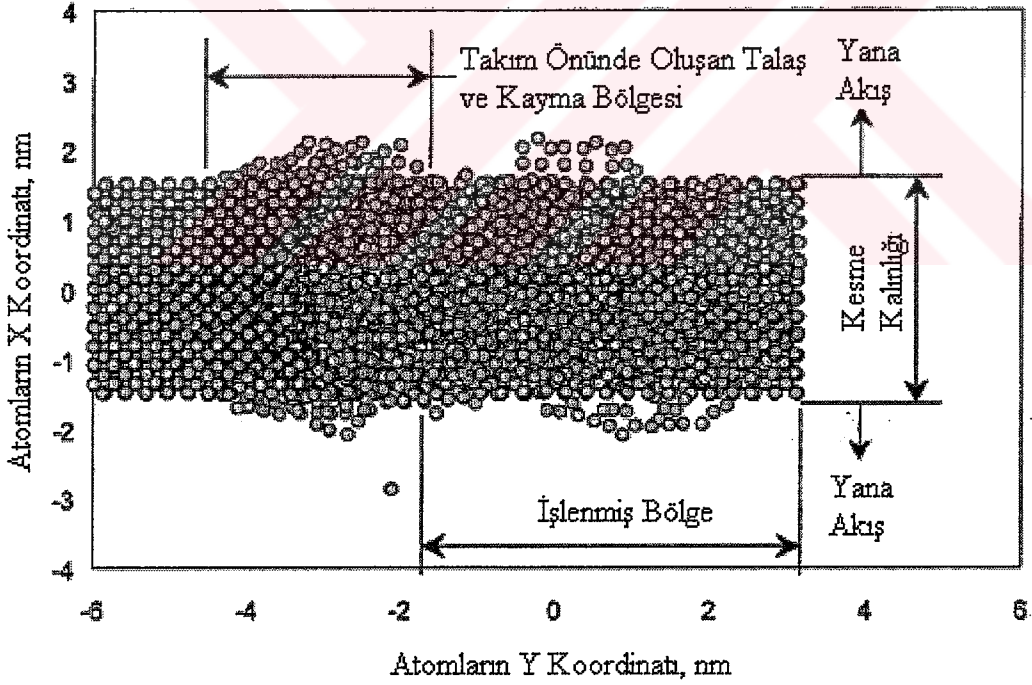
Şekil 3.18. Çıkış bölgesinde çapak oluşumu ve bozulmalar (a) sünek malzeme (b) gevrek malzeme. Talaş açısı 15° (Komanduri, 2001a)

Komanduri v.d. , (Komanduri, 2001b) çalışmalarında, silisyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırılmasını, Toensoff potansiyeli kullanarak geliştirdikleri modelde incelemiştirler. Komanduri v.d. göre (Komanduri, 2001b), alüminyum gibi sünek malzemelerin işlenmesindeki talaş oluşumu kristallografik düzlemlerdeki ve yönlerdeki takım önünde oluşan birincil bölgedeki plastik deformasyon yoluyla oluşmasına rağmen, silisyum malzemenin talaş oluşumu belirli bir kristallografik 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. Yine aynı çalışmada görülmektedir ki, kesme derinliğine bağlı olarak yüzeyaltı deformasyonu, hem talaş açısı artışında hem de kesme genişliğinin kesme derinliğine oranı w_c/d_c azaldığında azalmaktadır. Böylece, kesme derinliğine bağlı yüzeyaltı deformasyonunu azaltmak için, küçük negatif talaş açısı ve düşük w_c/d_c oranları tavsiye edilmektedir. Komanduri v.d. göre (Komanduri, 2001b) silisyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırılması şu dört mekanizmadan oluşmaktadır;

- i. kesici takım önündeki malzemenin sıkışması,
- ii. ekstrüzyon benzeri bir süreç ile talaş oluşumu,
- iii. yana akış, (SF),
- iv. kesici takımın altındaki işlenmiş yüzeyde oluşan yüzeyaltı deformasyonu şekil 3.19'da görülmektedir.



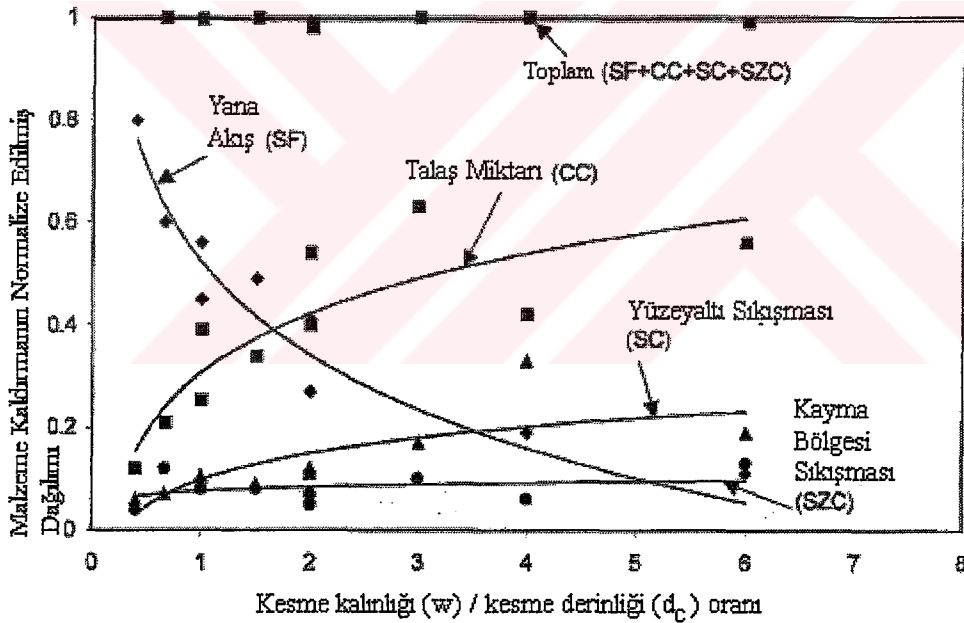
(a)



(b)

Şekil 3.19. İki farklı kesme derinliğinde oluşan atomların dağılımı. a) 1,1 nm b) 3,26 nm takım talaş açısı -30° , kesme derinliği 1,1 nm (Komanduri, 2001b)

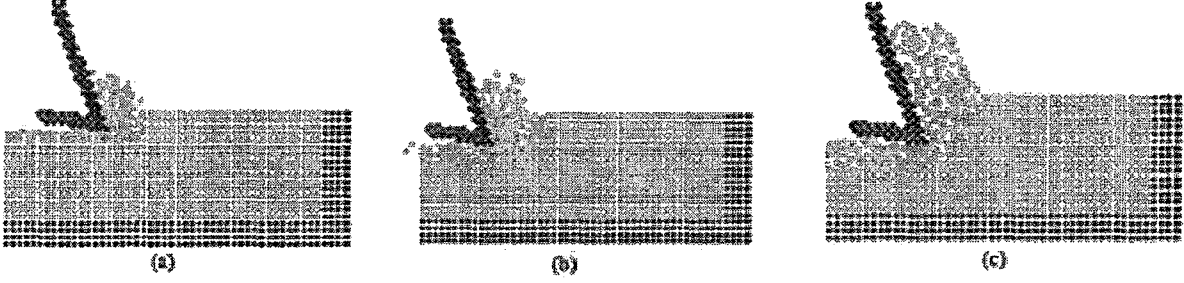
Yana akış, w_c arttığında azalmakta, d_c azaldığında artmaktadır. w_c/d_c arttığında ise, yana akış azalmaktadır. Talaş açısı arttığında ya da w_c/d_c oranı arttığında talaş miktarı artmaktadır. Her iki durumda da yana akış azalmaktadır. Yüzeyaltı yoğunlaşması, talaş açısı arttıkça azalmakta fakat w_c/d_c 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, yüzeyaltı sıkışması, w_c/d_c oranı arttıkça artmaktadır. Yüzeyaltı 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), yüzeyaltı sıkışması (SC) ve kayma bölgesi sıkışmasının (SZC) w_c/d_c oranına bağlı değişimlerini gösterir grafik şekil 3.20'de görülmektedir.



Şekil 3.20. Yana akış, talaş miktarı, yüzeyaltı sıkışması ve kayma bölgesi sıkışmasının w_c/d_c oranına bağlı dağılımları (Komanduri, 2001b)

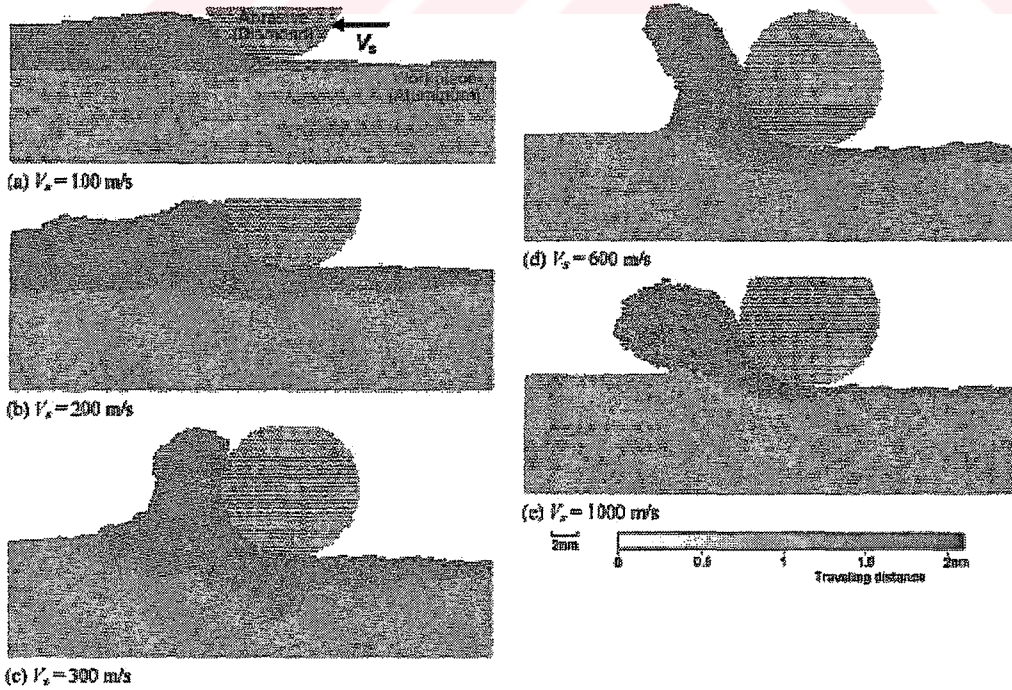
Han v.d. yaptığı modellemede, (Han, 2002), takım geometrisinin nanometrik kesmeye etkileri gözlenmiştir. Han'a göre, kesme işlemi ilerledikçe, verilen kesme şartlarında, farklı kristal yönleri ve dislokasyon hareketleri için engeller boyunca ilave dislokasyonlar oluşması sebebiyle, dislokasyon yoğunluğu giderek artmaktadır. Ayrıca, kesme derinliğinin artması ile kuvvetlerdeki artış nedeniyle dislokasyon yoğunluğunun arttığı ve bunun da kristal deformasyonunu ve kimyasal bağ kırılmasını oluşturabildiği görülmüştür. Yine Han'a göre,

takım ucu yarıçapının artmasıyla yüzeyaltı deformasyonun genişlemesi artmakta ve oluşan talaş miktarı azalmaktadır. Şekil 3.21’de Han ve arkadaşlarının değişik kesme derinliklerinde yaptıkları nanometrik kesme MD simülasyonları gösterilmektedir.



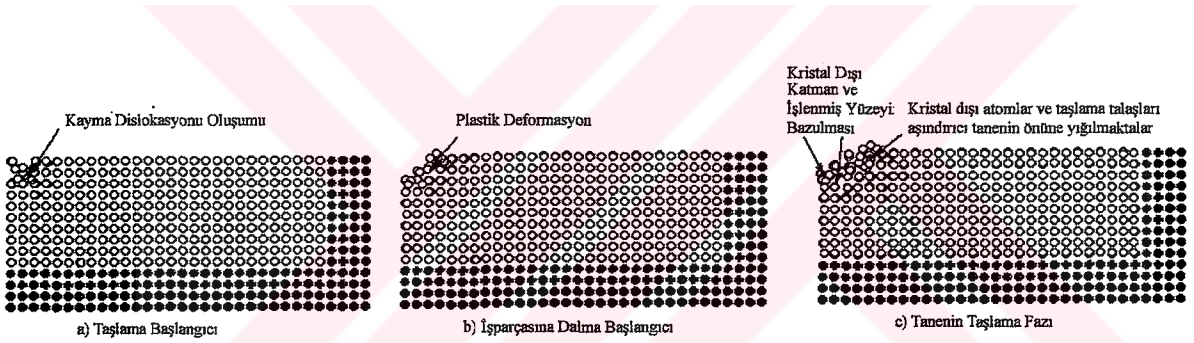
Şekil 3.21. Değişik kesme derinliklerinde yapılan nanometrik kesme MD simülasyonları. a) 0,4 nm, b) 0,6 nm, c) 0,9 nm. Talaş açısı: 20° (Han, 2002)

Shimizu v.d. yaptıkları çalışmada (Shimizu, 2002), alüminyum malzemenin deformasyonu ve talaş oluşum prosesi ile taşlama kuvveti ve temas mesafesi konularında modeller 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 3.22’de Shimizu v.d. yaptıkları çalışmada, değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları görülmektedir.



Şekil 3.22. Değişik taşlama hızlarındaki talaş oluşumları (Shimizu, 2002)

Lin v.d. yaptıkları çalışmada (Lin, 2003), nano ölçekte taşlama modellenmiş, aşındırıcı tanenin etki bölgesinin yakınlarındaki mikroskopik bölgedeki talaş kaldırma ve yüzey oluşumu incelenmiştir. 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. Eşzamanlı 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 (Lin, 2003) dislokasyon oluşumu sırasında atomların kinetik enerjileri artmakta, dolayısıyla atomik kristal kafesin ısıl titeşimi artmakta ve malzemenin plastik deformasyonu kolaylaşmaktadır. Şekil 3.23'te tanenin taşlama anındaki malzeme yapısındaki oluşumlar görülmektedir.



Şekil 3.23. Tanenin taşlama anındaki malzeme yapısındaki oluşumlar (Lin, 2003)

Cheng v.d. yaptığı çalışmada (Cheng, 2003), geliştirilen yeni bir modelleme tekniğiyle, talaş kaldırma ısısının etkilerini simülasyona dahil ederek, nano ölçekte talaş kaldırmada takım aşınmasını incelemişlerdir. Cheng v.d. göre, takım aşınması, sıcaklık arttıkça takım malzemesini oluşturan atomlar arasındaki bağlar zayıflayacağından, takım aşınması sıcaklığa bağlıdır. Takım aşınmasının temel mekanizması termo-kimyasal aşınmadır.

4. SONUÇ

Nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmalarının incelenmesi ve imalat tekniklerinin geliştirilmesi için yüksek maliyetli, büyük insan ve ekipman kaynağı isteyen çalışmalar yapılmaktadır. Bundan 100 sene önce talaş kaldırma teknikleri el ev göz becerilerine dayalı iken, artık nano ölçekte talaş kaldırma uygulamaları, insanın 5 duyusunun algılayabileceği alt sınırın ötesine geçmiş ve hızla ilerlemektedir.

Henüz emekleme aşamasında olan nano ölçekte talaş kaldırma konusunda, yapılmış bu 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 devrimsel yenilikler gündeme gelmektedir. Yapılan deneysel çalışmalarda elde edilen kritik kesme derinlikleri, nano ölçekte talaş kaldırma işlemleri ile elde edilebilmekte ve böylelikle gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmeleri olanaklı olmaktadır. Yapılan moleküler dinamik modellemelerinde de görüldüğü üzere oluşan mekanizma, gevrek malzemelerin mikro ölçekte talaş kaldırma mekanizmalarıyla benzerlikler göstermektedir. Shaw'a göre (Shaw, 1995), takım ucundaki hidrostatik basıncın yükselmesi kritik kesme derinliğini etkilemektedir. Yapılan moleküler dinamik çalışmalarında da görülmektedir ki, talaş kaldırma genişliğinin az olması, takım ucundaki hidrostatik basıncı arttırmaktadır, dolayısıyla da yüzeyaltı deformasyonlarını azaltmakta ve böylece gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenmesi olanaklı olmaktadır. Talaş açısının yönü ve büyüklüğü de hidrostatik basıncı ve dolayısıyla kritik kesme derinliğini etkilemektedir. Ayrıca, işparçasının kristal yönlendirmesinin de kritik kesme derinliğini etkilediği görülmektedir. İlerleme hızının artması da, sünek rejimde talaş kaldırma için kritik kesme derinliğini azaltmaktadır. Bunun sebebinin, ilerleme hızı arttıkça hidrostatik basıncın düşmesi ve dolayısıyla yüzeyaltı deformasyonun artması olduğu açıkça görülmektedir.

Bu durumda, takımın işparçası üzerinde oluşturduğu hidrostatik basıncın, malzemenin gevrek ya da sünek rejimde işlenmesini belirleyen en önemli faktör olduğu söylenebilir ve işlem parametreleri de;

- Kesmi genişliği,
- Kesme derinliği (dc),
- Takım uç yarıçapı (r),
- Takım talaş açısı ve
- ilerleme olarak ortaya çıkmaktadır.

Nano ölçekte talaş kaldırma çalışmalarında talaş kaldırma derinliğinin de bir teorik sınırı vardır. Ikawa v.d. yapmış olduğu MD çalışmasında görülmektedir ki (Ikawa, 1991), minimum talaş derinliği, uç yarıçapından şiddetle etkilenmektedir ve uç yarıçapının 1/10'u mertebesindedir.

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

Yapılan moleküler dinamik modelleme uygulamaları, kuasi-statik şartlardan denge-dışı şartlara kadar değişik teknikler kullanılarak yapılmıştır. Görülmektedir ki, tüm talaş kaldırma mekanizmasını modelleyebilecek tek bir moleküler dinamik algoritması yoktur. Talaş kaldırma esnasında oluşacak gerilim-gerinimlerin analizi için kuasi-statik şartlara dayalı modellemeler, dalma, çıkış etkisi gibi malzemenin denge-dışı şartlarda incelenmesini gerektiren durumlar için denge-dışı modeller ve çizme, sürekli talaş kaldırma ya da sürtünme mekanizması gibi tekrarlı mekanizmalar için periyodik sınır şartları belirlenerek (alan sınırlı, uzunluk sınırlı, vs) dengede modellemeler yapılmaktadır.

Nano ölçekte talaş kaldırma konusunda moleküler dinamik yöntemi kullanılarak yapılan modellemelerde, sıcaklığın etkisi temelde atomların hızlarını etkilemektedir. Fakat, bilinmektedir ki, sıcaklık arttıkça atomların kinetik enerjisi azalacağından ve atomlar arasındaki bağlar zayıflayacağından, malzemenin eşik potansiyeli azalacaktır. Yapılan modellemelerde ise, sıcaklığın bağ enerjisine direkt etkisi sadece bir makalede (Cheng, 2003), takım aşınması modellemesi amacıyla konu edilmiştir. Geliştirilen algoritmalarla beraber bu konu üzerine de çalışmalar yapmak mümkündür.

Ayrıca, moleküler dinamiğe nem, atmosferik basınç gibi çevresel gürültü etkenlerinin tanıtılması oldukça güç olmaktadır. Moleküler dinamiğin normalizasyon yapısı gereği, yapının entropisini önemli ölçüde değiştiren bu etkenler, modellemelerde önemli sapmalara sebebiyet verecektir. Her nümerik teknikte var olan hataları meydana getiren zaman adımının optimum bir şekilde seçilmesi de yapılan modelin doğruluğunu önemli bir şekilde etkilemektedir. Ayrıca, modelin denge durumunun şartlarının da iyi belirlenmesi gereklidir. Belirli bir süre için dengede görülen bir model, toplam işlem süresi içerisinde dengesiz bir duruma geçebilir. Bu dengesiz fazda işlemleri yapmak, işlem doğruluğunu ve güvenilirliğini

ciddi bir şekilde azaltacaktır. Bunlara ek olarak, kararlı ve global hataların minimum olduğu optimum bir sonlu fark algoritması kullanımı da, işlem doğruluğu ve güvenilirliği için önemlidir. Kullanılan malzemeye uygun potansiyellerin seçimi de dikkat edilmesi gereken diğer bir husustur.

Konvansiyonel takım tezgahları teknolojilerinde artık yerini alternatiflerine bırakan tek kesen ağızlı elmas takımla tornalama tekniği, nano ölçekte vazgeçilmez olmaktadır. Gerek işlemin basitliği ve değişkenlerinin azlığı, gerekse de proses kontrolünün kolay olması sebebiyle nano ölçekte tornalama yüz sene önce klasik işleme tekniklerinde olduğu gibi öncü niteliğini burada da göstermektedir.

Taşlama, honlama, lepleme gibi çok kesen ağızlı kesici takımlar, nano ölçekte talaş kaldırma için kullanıldığında oluşan mekanizma, temel olarak tek kesen ağızlı kesici takımların kullanımında oluşan mekanizmalarla benzerdir. Fakat, gerek bağlı-aşındırıcılı olsun, gerekse de serbest aşındırıcılı olsun, kesici takım uç profilinin her tanede farklı olması ve her tanenin proses içinde dönme, öteleme hareketleri ve aşınma sebepleriyle profilini değiştirmesi sonucu ortaya çıkan kuvvetler, değişkenlik göstermektedir. Özellikle aşındırıcı tane ile nano ölçekte talaş kaldırma konularında gerek takım tezgahlarında yaşanan gelişmeler ve görüntüleme tekniklerinde yapılan ilerlemeler ile deneysel, gerekse de algoritmaların geliştirilmesi ve bilgisayarların işlem kapasitesinin artması ile moleküler dinamik modelleme ile yapılacak çalışmalar, bu mekanizmaların daha detaylı incelenmesini sağlayacaktır.

Kesici takım olarak sadece elmas takım kullanılabilir. Nano ölçekte oluşan şartlara dayanıklılık gesterecek yeni malzemelerin, yine nanoteknoloji kullanılarak, elde edilmesiyle beraber, işlemin elmas malzemeden bağımlılığı ortadan kalkacak ve maliyetler azalacaktır. Kesici takım geometrisinin de hassasiyeti göz önünde bulundurulduğunda elmas kesici takım malzemesi şu an için vazgeçilmez olarak görülmektedir. Kesme kuvvetlerinin önemli bir parametresi olan kesici takım ucu yarıçapı, elmas malzeme 50 nm ve altında rahatlıkla elde edilebilmektedir. Ayrıca, takımın talaş açısı da kesme kuvvetlerini ve yüzeyaltı deformasyonlarını önemli bir şekilde etkilemektedir.

Nano ölçekte yürütülen bütün bu çalışmalar, özellikle de nano ölçekte malzeme kaldırma mekanizmalarının anlaşılmasına hizmet etmesi açısından, ülkelerin geleceklerini yönlendirmeleri için en önemli bilgi kaynaklarıdır. Bugün sadece Amerika Birleşik

Devletleri'nin nanoteknoloji yatırımlarına 2004 yılı için 1,6 milyar USD ayırması, konunun ne kadar önem arz ettiğinin ifadesi olmaktadır.

Nanoteknoloji artık laboratuardaki deneysel çerçevesinden çıkmıştır. 6. Çerçeve gibi devlet politikaları olarak ele alınmaktadır ve önümüzdeki 50 yılın teknolojilerinin yatırımları bugünden yapılmaktadır. Bu çerçevede, artık bilginin en değerli ticari oldu olduğu günümüzde, nano ölçekte işlemlerin mekanizmalarının bilinmesi, teknoloji yarışında en önemli avantaj olacaktır.



KAYNAKÇA

Allen M.P., Tildesley, D.J., (1987), "Computer Simulation of Liquids", Clarendon Press, Oxford

Belak J., et.al., (1990), "Large Scale Elastic-Plastic Indentation Simulation via Non-equilibrium Molecular Dynamics", Phys. Rev. A. 42 (10), 1990

Chao C. L., (2002), "Ductile Behaviour in Single-Point Diamond-Turning Of Single-Crystal Silicon", Journal of Materials Processing Technology, Volume 127, Issue 2, 2002

Cheng K., Luo X., Ward R., Holt R., (2003), "Modeling And Simulation Of The Tool Wear in Nanometric Cutting", Wear 255, 2003

Cheung C. F., (2003), "Influence Of Cutting Friction On Anisotropy Of Surface Properties in Ultra-Precision Machining Of Brittle Single Crystals", Scripta Materialia, Volume 48, Issue 8, 2003

Corbett J., et. al, (1999), "An Ultra Precision Machine Tool Demonstrating a Novel Vibration, Resistant, Structure", Precision Engineering – Nanotechnology, Proceedings fo the 1st International Euspen Conference, Shaker Verlag, Aachen

Corbett J., McKeown P.A., Peggs G.N., Whatmore R., (2000), "Nanotechnology: International Developments and Emerging Products", Annals of CIRP vol. 49/2/2000, Keynote Papers 523

Daw M.S., Baskes M.I., (1983), Phys. Rev. B, 50, 1285

Donaldson R.R., et.al, (1994), "Aspects of Surface Generation in Orthogonal Ultraprecision Machining", Annals of the CIRP vol. 43/1/1994

Drexler E., (1991), "Unbounding the Future: the Nanotechnology Revolution", Willam Morrow and Company, Inc. New York

Eda H., Ohmura E., Sahashi M., Kobayashi T., Ikawa N., (1992), "Ultraprecise Machine Tool Equipped with a Giant Magnetostriction Actuator – Development of New Materials, $Tb_xDy_{1-x}(Fe_yMn_{1-y})_n$, and Their Appication", Annals of CIRP 41/1/1992

Fang F.Z., (1998), "Nano Turning of Single Crystal Silicon", Journal of Materials Processing Technology, 82

Fang F.Z., Liu X.D., Lee L.C., (2003), "Micro-machining of Optical Glasses – A review of diamond-cutting glasses", Sadhana, vol. 28, Part 5, 2003

Feynman R. P., (1959), "There's Plenty of Room at the Bottom – An Innovation to Enter a New Field of Physics" Ann. Meeting of the APS, California Institute of Technology, December 1959 <http://www.nanoword.net/pages/history.htm>

Furukawa Y., Moronuki N., (1988), "Effect of Material Properties on Ultra Precise Cutting Processes", Annals of the CIRP Vol. 37/1/1988

Gao W., Hocken R. J., Patten J. A., Lovingood J., (2000), "Experiments Using a Nano-Machining Instrument for Nano-Cutting Brittle Materials", *Annals of CIRP* 49/1/2000, sf. 439

Gao W., Hocken R. J., Patten J. A., Lovingood J., Lucca D. A., (2000), "Construction and Testing of a Nanomachining Instrument", *Precision Engineering, Journal of the International Societies for Precision Engineering and Nanotechnology*, 24, 2000

Gear C.W., (1971), "Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ

Haile J.M., (1991), "Molecular Dynamics Simulation: elementary methods", Wiley-Interscience Publication

Han X. S., et. al. (2002), "Investigation of tool geometry in nanometric cutting by molecular dynamics simulation", *Journal of Mat. Proc. Tech.* 129, 2002

Hocken R.J., Lucca D.A., Chou P., (1998), "Effect of Tool Edge Geometry on the Nanometric Cutting of Ge", *Annals of the CIRP* vol. 47/1/1998

Hocken, et.al, (2000), "Experiments Using a Nano-Machining Instrument for Nano-Cutting Brittle Materials", *Annals of the CIRP* vol. 49/1/2000

Hook J.R., Hall H.E., çev: Köksal F., Altunbaş M., Dinçer M., Başaran E., (1999), "Katıhal Fiziği", Literatür Yayıncılık

Ikawa N., et. al., (1990), "Diamond Turning of Brittle Materials for Optical Components", *Annals of CIRP* vol. 39/1/1990

Ikawa N., Shimada Sh., Tanaka H., Ohmori G., (1991), "An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Work-Tool Interaction in Diamond Turning", *Annals of the CIRP* vol. 40/1/1991

Ikawa N., Ohmori G., Tanaka H., Shimada S., (1992), "Molecular Dynamic Analysis As Compared With Experimental Results Of Micromachining", *Annals of CIRP* vol. 41/1/1992

Ikawa N., et.al., (1993), "Feasibility Study On Ultimate Accuracy in Microcutting Using Molecular Dynamics Simulation", *Annals of CIRP* vol. 42/1/1993

Ikawa N., Shimada S., Tanaka H., Uchikoshi J., (1994), "Structure Of Micromachined Surface Simulated By Molecular Dynamics Analysis", *Annals of CIRP* vol. 43/1/1994

Inamura T., Takezawa N., Kumaki Y., (1993), "Mechanics And Energy Dissipation in Nanoscale Cutting", *Annals of CIRP* vol. 42/1/1993

Inamura T., Takezawa N., Kumaki Y., Sata T., (1994), "On A Possible Mechanism Of Shear Deformation In Nanoscale Cutting", *Annals of CIRP* vol. 43/1/1994

Itoh A., Maekawa K., (1995), "Friction and Tool Wear in Nano-scale Machining – a Molecular Dynamics Approach", *Wear* 188, 1995

Kim, D.E., Suh N.P., (1994), "Molecular Dynamics Investigation of Two-Dimensional Atomic-Scale Friction", *Journal of Tribology*, vol. 116, 1994

Komanduri R., Lucca D.A., Tani Y., (1997), "Technological Advances in Fine Abrasive Processes", *Annals of the CIRP Vol. 46/2/1997*

Komanduri R., Chandrasekaran N., Khajavi A.N., Raff L.M., (1998), "A New Method for Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Cutting", *Phys. Mag. B*, vol. 77, No 1, 1998

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (1998), "Effect Of Tool Geometry in Nanometric Cutting: A Molecular Dynamics Simulation Approach", *Wear* 219, 1998

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (1999), "Orientation Effects In Nanometric Cutting Of Single Crystal Materials: An MD Simulation Approach", *Annals of CIRP vol. 48/1/1999*

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (1999), "Some Aspects Of Machining With Negative-Rake Tools Simulating Grinding: A Molecular Dynamics Simulation Approach", *Phys. Rev. B, VOL. 79, NO. 7, 1999*

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (2000), "Molecular Dynamics Simulation of Atomic-Scale Friction", *Phys. Rev. B vol. 61, no. 20, 2000*

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (2000), "MD Simulation Of Indentation and Scratching Of Single Crystal Aluminum", *Wear* 240, 2000

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (2000), "MD Simulation Of Nanometric Cutting Of Single Crystal Aluminum – Effect Of Crystal Orientation and Direction of Cutting", *Wear* 242, 2000

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (2001), "MD Simulation of Exit Failure in Nanometric Cutting", *Mat. Sci. and Eng. A311, 2001*

Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M., (2001), "Molecular Dynamics Simulation of the Nanometric Cutting of Silicon", *Phys. Rev. B vol. 81, no. 12, 2001*

Lennard-Jones J.E., (1924), "The Determination of Molecular Fields, 1. Form the variation of the Viscosity of a gas with temperature", *Proc. Roy. Soc. (London)*, 106A, 441, 1924

Lennard-Jones J.E., (1924), "The Determination of Molecular Fields, 1. Form the equation of state of a gas", *Proc. Roy. Soc. (London)*, 106A, 463, 1924

Lin B., Yu S.Y., Wang S.X., (2003), "An Experimental Study On Molecular Dynamics Simulation In Nanometer Grinding", *Journal of Materials Processing Technology* 138, 2003

Lucca D.A., Komanduri R., Seo Y.W., (1993), "Effect of Tool Edge Geometry on Energy Dissipation in Ultraprecision Machining", *Annals of the CIRP* 42/1/1993

Moriwaki T., Horiuchi A., Okuda K., (1990), "Effect of Cutting Heat on Machining Accuracy in Ultra-Precision Diamond Turning", *Annals of the CIRP* Vol. 39/1/1990

Moriwaki T., Shamoto E., (1991), "Ultraprecision Diamond Turning of Stainless Steel by Applying Ultrasonic Vibration", *Annals of the CIRP* 40/1/1991

Patten J.A., Gao W., (2001), "Extreme Negative Rake Angle Technique For Single Point Diamond Nano-Cutting Of Silicon", *Precision Engineering* 25, 2001

Rahman A., (1964), "Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon", *Physics Rev.* 136 (2A), 405, 1964

Okamura K., Namba Y., Tsuwa Y., (1978), "Mechanism and Some Applications of Ultra-Fine Finishing", *Annals of the CIRP* vol. 27/1/1978

Rentsch R., Inasaki I., (1994), "Molecular Dynamics Simulation For Abrasive Processes", *Annals of CIRP* vol. 43/1/1994

Rentsch R., Inasaki I., (1995), "Investigation Of Surface Integrity By Molecular Dynamics Simulation", *Annals of CIRP* vol. 44/1/1995

Rentsch R., Inasaki I., Brinksmeier E., Preuss W., Riemer O., (1996), "Influence of Material Characteristics on the Micromachining Process", *Materials Issues in Machining III and the Phsics of Machining III*, 1996

Shaw, M.C., (1995), "Precision Finishing", *Annals of CIRP* vol. 44/2/1995

Shimizu J., Zhou L.B., Eda H., (2002), "Simulation And Experimental Analysis Of Super High-Speed Grinding Of Ductile Material", *Journal of Mat. Proc. Tech.* 129, 2002

Shinno H., Hashizume H., Ito Y., (1992), "Structural Configuration and Performances of Machining Environment-Controlled Ultraprecision Diamond Turning Machine 'Capsule' ", *Annals of CIRP* 41/1/1992

Smith W.F., çev: N.G. Kınkoğlu, (2001), "Malzeme Bilimi ve Mühendisliği", *Literatür Yayınları*, İstanbul

Sreejith P.S., Ngoi B.K.A., (2001), "Material Removal Mechanisms In Precision Machining Of New Materials", *IJMT&M* 41, 2001

Tabor, D, (1951), "Hardness of Metals", *Clarendon Press*, Oxford

Sata T., Takeuchi Y., (1996), "Ultraprecision 3D Machining of Glass", *Annals of the CIRP* Vol. 45/1/1996

Taniguchi N., et. al., (1974), "On the Basic Concept of Nanotechnology" *Proceedings of ICPE*, Tokyo, 1974

Taniguchi, N., (1983), "Currents Status in, and Future Trends of, Ultraprecision Machining and Ultrafine Materials Processing", *Annals of the CIRP* vol. 32/2/1983

Taniguchi N., Inamura T., Takezawa N., (1992), "Atomic Scale Cutting In A Computer Using Crystal Models Of Copper And Diamond" Annals of CIRP vol. 41/1/1992

Taniguchi N., et al., (1996), "Nanotechnology: Integrated Processing Systems for Ultra-Precision and Ultra-Fine Products", Oxford University Press

To S., et.al., (1997), "Ultraprecision Diamond Turning of Aluminyum Single Crystals", journal of Materials Processing Technology 63, 1997

Tyson W.R., (1966), Philosophical Magazine, 14 (1966), 926-936

Ueda K., et. al., (1991), "Machining High Precision Mirrors Using Newly Developed CNC Machine", Annals of the CIRP vol. 40/1/1991

Ueda K., Manabe K, (1992), "Chip Formation Mechanism of an Amorphous Metal", Annals of the CIRP vol. 41/1/1992

Uludođan M., (2003), "Molecular Dynamics Investigation of Pure Metals and Metal Alloys", Ph.D. Thesis, METU

Vorburger T.V., Dagata J.A., Wilkening G., Iizuka K., Thwaite E.G., Lonardo P., (1997), "Industrial Uses of STM and AFM", Annals of CIRP 46/2/1997

Yan J., et.al., (2002), "Ductile Regime turning at Large Tool Feed", Journal of Materials Processing Technology, Volume 121, Issues 2-3, 2002

Zhang L., Tanaka H, (1997), "Towards a Deeper Understanding of Wear and Friction on the Atomic Scale – A molecular dynamics approach", Wear 211, 1997

INTERNET KAYNAKLARI

1. <http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/images/stm15.jpg>
2. http://www.upm.pi.titech.ac.jp/capsule_eng.html
3. http://www.cranfield.ac.uk/sims/mem/dave_s/tetraform.html

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi	17.10.1978	
Doğum yeri	Wuppertal, Almanya	
Lise	1989-1996	Üsküdar Hüseyin Avni Sözen Anadolu Lisesi
Lisans	1997-2001	Yıldız Üniversitesi Mühendislik Fak. Makine Mühendisliği Bölümü
Yüksek Lisans	2001-2004	Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Makine Müh. Anabilim Dalı, İmal Usulleri Programı

Çalıştığı Kurumlar

2002-2003	Teklas Kauçuk Sanayi, Gebze, Kocaeli
2004-Devam ediyor	Ford Otomotiv Sanayi A.Ş. Gölcük, Kocaeli

