

T.C.

FIRAT ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**NIAl NANO TELLERİN MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN
MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMLE İNCELENMESİ**

HAMDULLAH KUŞÇA

Yüksek Lisans Tezi

Anabilim Dalı: Fizik

Programı: Katıhal Fiziği

Danışman: Prof. Dr. Soner ÖZGEN

AĞUSTOS-2015

**T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**NiAl NANO TELLERİN MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN
MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAMDULLAH KUŞÇA

(121114108)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: 31.08.2015

Tezin Savunulduğu Tarih: 28.08.2015

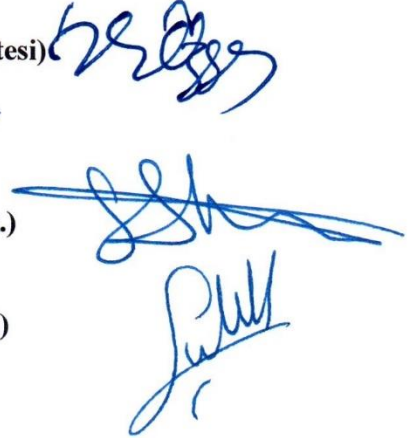
Tez Danışmanı: Prof. Dr. Soner ÖZGEN (Fırat Üniversitesi)

Diğer Jüri Üyeleri:

Prof.Dr. Sinan AKPINAR (Fırat Üniversitesi, Fen Fak.)

Yrd.Doç.Dr. Şule KARATEE (Bitlis Eren Üniversitesi)

AĞUSTOS-2015



ÖNSÖZ

NiAl Nano Tellerin Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Yöntemle İncelenmesi konulu Yüksek Lisans Tez çalışmamda bana her konuda destek olan, maddi ve manevi yardımını esirgemeyen ve ondan öğrendiklerimi her zaman yeni nesillere severek aktaracağım bilgileri edindiğim çok değerli hocam ve danışmanım sayın Prof. Dr. Soner ÖZGEN'e sonsuz saygılarımı ve teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca, her zaman yanımda olan aileme maddi ve manevi desteğini esirgemeyen Anneme, Babama ve değerli eşim VESİLE'ye ve oğlum HALİL İBRAHİM'e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Ortaya çıkan bu bilimsel çalışmanın yeni problemlere ışık tutmasını temenni ederim.

Hamdullah KUŞÇA

ELAZIĞ, 2015

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ.....	III
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET.....	IV
SUMMARY.....	V
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	VI
TABLOLAR LİSTESİ.....	VIII
KISALTMALAR.....	IX
1. GİRİŞ.....	1
2. NANO TELLER ve ÇUBUKLAR	6
2.1 Üretim Teknikleri	6
2.2 Nano Yapıların Termodinamik Özellikleri.....	8
2.3 Nano Yapıların Mekanik Özellikleri.....	10
2.3.1. Zorlanma Teorileri.....	11
2.3.2. Virial Zor Metodu.....	11
2.3.3. Enerji Metodu (Klasik Süreli Mekanik).....	12
2.3.4. Nikel Nano Teller Üzerine Moleküler Dinamik Hesaplamalar.....	14
2.3.5. Bakır Nano Teller Üzerine Moleküler Dinamik Hesaplamalar.....	16
2.3.6. Young Modülü – Tel Kalınlığı İlişkisi.....	17
2.3.7. Young modülü – Sıcaklık İlişkisi	17
2.3.8. Young modülü – Zorlanma Hızı İlişkisi	18
3. MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMİ.....	19
3.1 (NVE) Topluluğu için Moleküler Dinamik Yöntemi.....	19
3.2 Gömülmüş Atom Metodu.....	21
3.2.1. Pun-Mishin gömülü atom yaklaşımı.....	22
3.3 Moleküler Dinamik Paket Programları.....	23
3.4 LAMMPS Paket Programı.....	24
4. SONUÇLAR ve TARTIŞMA	27
4.1 Nano Yapılı Modellerin Oluşturulması.....	27
4.2 LAMMPS MD Çalışmaları.....	31
4.3 Sıcaklığın Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi	33
4.4 Kalınlığın Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi	37
4.5 Çekme hızının Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi	41
5. KAYNAKLAR.....	43
EKLER.....	47
ÖZGEÇMİŞ.....	53

ÖZET

Bu tez çalışmasında, şekil hatırlama bölgesinde bulunan Ni-30Al alaşımının nano ölçekli tel modelleri oluşturulmuş ve bu modellerin moleküler dinamik simülasyonları yardımıyla zor-zorlanma davranışları incelenmiştir. Çalışmalarda, atomlararası fiziksel etkileşmeler gömülü atom metodu ile temsil edilmiş ve simülasyonlar açık kaynak kodlu LAMMPS kodları ile gerçekleştirilmiştir.

11 farklı kalınlığa sahip aynı uzunluk ve aynı kristal yönelimli [001] model nano teller üzerinde 0 K, 300 K, 500 K, 700 K ve 900 K sıcaklıklarında ve 1 m/s den 10 m/s ye kadar 10 farklı çekme hızı için moleküler dinamik hesaplamaları yapılmıştır. Elde edilen sonuçlardan, nano tellerin Young modülleri, akma dayanımları, nihai zorlanma değerleri ve kopma zorlanma değerleri elde edilmiştir. Elde edilen bu mekanik parametrelerin sıcaklığa, tel kalınlığına ve çekme hızına bağlı değişimleri belirlenmiştir. Sonuçlar literatürle karşılaştırılarak tartışılmıştır.

Çalışmalar sonunda, şekil hatırlamalı Ni-30Al nano tellerinin Young modüllerinin sıcaklıkla lineer olmayan bir şekilde değiştiği, 500 K e kadar önce arttığı ve yüksek sıcaklık fazına geçildikten sonra azaldığı tespit edilmiştir. 1,44 nm kalınlıklı en ince telin 1 m/s çekme hızı ile çekilmesi halinde 300 K sıcaklıktaki Young modülü 72 GPa civarında tespit edilmiştir. Aynı şartlarda akma dayanımı 3,15 GPa ve nihai zor değeri ise 5 GPa olarak belirlenmiştir. 300 K sıcaklıkta Young modülü model kalınlığı arttıkça azalmaktadır. 4,32 nm kalınlığa sahip en kalın nano tel için tespit edilen Young modülü 40 GPa civarındadır. Benzer şekilde, akma dayanımı da tel kalınlığı arttıkça azalmaktadır. En kalın telin 300 K deki akma dayanımı 1,75 GPa değerindedir. Çekme hızının Young modülü üzerindeki etkisi oldukça karmaşıktır ve tel kalınlığına bağlı olarak lineer olmayan bir davranış sergiler. Bu durum, tel kalınlığının, tel içindeki dislokasyon oluşumunu etkileyen en önemli faktör olduğunu ortaya koymaktadır.

Anahtar Kelimeler: Nano Teller, NiAl alaşımı, Şekil Hafızalı Alaşımlar, Moleküler Dinamik Simülasyonu, Mekanik Özellikler, Zor-Zorlanma

SUMMARY

Investigation of Mechanical Properties of NiAl Nanowires by means of Molecular Dynamics Simulations

In this thesis, it has been modeled shape memory Ni-30Al alloy in a form of nanowires in order to investigate their stress-strain behavior by means of molecular dynamics simulations. Embedded atom method has been used to define the physical interactions between atoms. The simulations have been realized by using the LAMMPS simulator package having open source code.

Molecular dynamics simulations have been done for the models with 11 different thicknesses, the same length and the same crystal orientation [001], but at different temperatures 0, 300K, 500K, 700K and 900K, and 10 different strain rates from 1m/s to 10m/s used to obtain stress-strain relations. By using the stress-strain curves the values of Young's modulus, yield strength, ultimate strength and fracture points of nanowires were obtained. Temperature, thickness and strain rate dependencies of these mechanical parameters were determined. The results were also discussed comparatively using the results found in the literature.

It has been determined that the Young's modulus of shape memory Ni-30Al nanowires change nonlinearly with temperature, i.e. they increase first up to 500K temperature at which the phase transition starts, and then decrease with temperature. The Young's module of the fine nanowire with 1.44nm thickness was determined as 72GPa for a strain rate of 1m/s and at 300K. At the same conditions and for the same nanowire the yield strength and the ultimate stress were 3.15Gpa and 5Gpa, respectively. The Young's modulus at 300K decrease as increasing thickness of nanowires. The Young's modulus for the thicker nanowire with 4.32nm thickness has a value of about 40Gpa. Similarly, the values of yield strength also decrease as increasing thickness of nanowires. Yield strength is 1.75Gpa for the thicker nanowire at 300K. The effect on the Young's modulus of the strain rate is very complex and exhibits a non-linear behavior depending on the nanowire thickness. This result reveals that the thickness of nanowire is the most important factor affecting the formation of the dislocations in the wire, and so the mechanical properties.

Key Words : Nano Wires, NiAl Alloys, Shape Memory Alloys, Molecular Dynamics Simulations, Mechanical Properties, Stress-Strain Relations.

ŞEKİLLER LİSTESİ

	<u>sayfa No</u>
Şekil 2.1. Nano malzemelerin erime sıcaklığının malzeme boyutlarına bağlı değişimi	8
Şekil 2.2. Nano boyutlu metaller için üç farklı erime modeli. a) Homojen erime, b) sıvı çekirdeklenme ve büyüme modeli ve c) yüzey erime modeli	9
Şekil 2.3. Nano boyutlu malzemelerde erime modellerinin karşılaştırılması	10
Şekil 2.4. Malzemelerin zor-zorlanma davranışı ve Young Modülü	11
Şekil 2.5. Bulk altın için tek eksenli zorlanmaya karşı toplam potansiyel enerjinin birim hacim başına değişimi	13
Şekil 2.6. Bulk altın için Virial zoru	13
Şekil 2.7. Ni nano tellerin <110> doğrultusu için gerilme zor-zorlanma tepkisi	14
Şekil 2.8. <110> doğrultusundan gerilen Ni nano tellerin atomik yapısındaki değişimler. a) %5.1 zorlanma, b) %5.3 zorlanma ve c) % 8.5 zorlanma	15
Şekil 2.9. <111> doğrultusundan gerilen nikel nano teller. a) %10 zorlanma, b) %25 zorlanma ve c) %41 zorlanma	15
Şekil 2.10. Temel doğrultularda gerilen nikel ve bakır nano tellerin akma dayanımları	15
Şekil 2.11. Bakır nano tellerin MD ile incelenmesinde kullanılan atomik Modelin görüntüsü	16
Şekil 2.12 Bakır nano tellerin MD ile hesaplanan Zor-zorlanma davranışları [52]. ...	16
Şekil 2.13. Gümüş nano tellerin kalınlık-Young modülü ilişkisi.....	17
Şekil 2.14. Nano boyutlu tantalyum için Young modülünün sıcaklıkla değişimi.....	17
Şekil 2.15. 300 K de nikel nano telin (a) zorlanma hızına bağlı zor-zorlanma davranışı ve (b) akma zorunun zorlanma hızı ile değişimi.....	18
Şekil 4.1. Tipik bir MD çekme deneyinde nano tel davranışı. Kırmızı küreler Ni atomlarını ve mavi küreler Al atomlarını temsil etmektedir. a) Başlangıç yapı, b) termal dengedeki yapı, c) - f) çekme sonucu yapılarıdır.....	29
Şekil 4.2. Tipik bir MD çekme deneyinde MD adımına karşı kohesif enerji değişimi.....	29
Şekil 4.3. Tipik bir MD çekme deneyinde yüzde zorlanmaya karşı kohesif enerji değişimi	30
Şekil 4.4. Tipik bir MD çekme deneyinde zor-zorlanma değişimi.....	30
Şekil 4.5. Modellerin taban kesitlerinden görünüşleri. Ölçüler birim hücre sayısı cinsindendir. Kırmızılar Ni, maviler Al atomlarını temsil etmektedir.....	31
Şekil 4.6. t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında (a) Young Modulünün, (b) Akma zorunun ve (c) Nihai Gerilme zorunun – Sıcaklığa bağlı değişimleri...	34

Şekil 4.7. t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında (a) Akma zorlanması, (b) Nihai Gerilme zorlanması ve (c) Kopma değeri – Sıcaklığa bağlı değişimleri	36
Şekil 4.8. R1 çekme hızları için, 0K ve 300K sıcaklıklarında (a) Young Modulünün, (b) Akma zorunun ve (c) Nihai Gerilme zorunun Kalınlığa bağlı değişimleri	38
Şekil 4.9. R1 çekme hızları için, 0K ve 300K sıcaklıklarında (a) Akma zorlanması, (b) Nihai Gerilme zorlanması ve (c) Kopma değeri Kalınlığa bağlı değişimleri	40
Şekil 4.10. 0K sıcaklığında, (a) t1 , (b) t2, (c) t3, (d) t6, (e) t8, (f) t11, kalınlığında, Young Modülü - çekme hızına bağlı değişimleri.....	42

TABLÖLAR LİSTESİ

	<u>sayfaNo</u>
Tablo 3.1 Ni, Al ve NiAl alaşımasının bazı fazları için deneysel ve hesaplanmış erime sıcaklıkları [46]. Değerler Kelvin birimindedir.....	23
Tablo 3.2 MD çalışmak için temin edilebilecek hazır paket programlar.....	24
Tablo 3.3. Yaygın kullanılan bazı LAMMPS kodları ve kullanım amaçları	26
Tablo 4.1. Modellerin ölçüleri, x ve y aynı değerlere sahip olup z eksenini uzunluğu sabittir..	27
Tablo 4.2. Modellerin sahip olduğu atom sayıları.....	28

KISALTMALAR

AFM	: Atomic Force Microscopy
CNA	: Common Neighbour Analysis
ÇBM	: Çekirdeklenme ve Büyüme Modeli
EAM	: Gömülmüş atom Modeli (Embedded Atom Method)
FS	: Finnis-Sinclair
GPU	: Grafik İşlemci Birimi
HEM	: Homojen Erime Modeli
LAMMPS	: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
LATGEN	: Lattice Generator
MD	: Moleküler Dinamik
MEAM	: Modified EAM
PEF	: Potansiyel Enerji Fonksiyonu
QSC	: Kuantum Sutton-Chen
SC	: Sutton-Chen
TRGRID	: Ulusal Hesaplama Ağı
VC	: Voter-Chen
YEM	: Yüzey Erime Modeli

1. GİRİŞ

Yüzyılımızın en önemli teknolojisi olarak tanımlanan nanoteknoloji, temel bilimin ilgi odağı olmaktan çıkıp, mühendislik bilimlerinin de üzerinde yoğun araştırmalar yaptığı ve sonuçlarının artık günlük hayatta kullanılmaya başlandığı önemli bir teknoloji alanı olmuştur. Nanoteknoloji, fizik, kimya, biyoloji gibi temel bilimlerin yanı sıra, mühendislik, tıp, bilgisayar ve sanayide de yeni ve faydalı birçok ürünü topluma sunmaktadır. Birçok gelişmiş ve gelişmekte olan ülkenin nanoteknolojiye önemli ölçüde yatırımlar yaptığı bilinmektedir. Nano sözcüğü ölçek itibarıyla milyarda bir anlamına gelmektedir. Nano ölçekli malzeme olarak tanımlanan yapılar ise; nano-kristaller, nano-parçacıklar, nano-tüpler, nano-teller, nano-çubuklar veya nano ölçekli ince filmler şeklinde çeşitli sınıflara ayrılmaktadır. Bu yapıların henüz tam olarak anlaşılmamış pek çok fiziksel davranışı bulunmaktadır. Bu davranışların anlaşılmasına yönelik yapılan teorik ve deneysel çalışmalar devam etmektedir. Nano ölçekli yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesi hem nanoteknolojinin gelişmesine hem de kullanım alanlarının ortaya konulmasına katkı sağlayacaktır.

Nanoteknoloji, atom ve moleküllerin madde içindeki yerlerini tek tek işleme ve yeniden düzenleme yoluyla kullanışlı malzemeler, araçlar ve sistemler oluşturma teknolojisi olarak tanımlanabilir [1]. Nanoteknoloji ve nano yapıli malzeme araştırmalarının temeli 1959 da Richard Feynman tarafından verilen bir seminer notuna dayandırılabilir. Bu notta Feynman, küçük ölçekte nesnelerin kontrol edilme ve düzenlenmesi problemine bir öneride bulunmuştur. Sözüünü ettiğı ölçek; o günün bilim adamlarınca tanınan fakat keşfedilmemiş atomik ölçektir. Nanoteknolojinin mevcut bilimsel ve teknolojik düzeni kökten değıştireceğı daha o dönemde tahmin edilmekteydi. Bütün bu gelişmelere karşın, nano ölçekte maddelerin davranışlarını açıklamaya yönelik çok fazla bilimsel teori bulunmamaktadır [2-4]. Bu nedenle, nano teknoloji alanındaki pek çok problem çözüm beklemektedir.

Nanometre, ölçekteki öyle bir sihirli noktadır ki, bu noktada el yapımı araçlar, atom ve molekülleri tek tek işleyebilirler. Elektrik iletkenliğinden, optik, manyetik, termal ve mekanik özelliklere kadar her şeyin, kullanılan malzemenin atomik yerleşimlerine ve bileşimine bağıli olarak değıştirilebilme potansiyeli vardır. Dolayısıyla maddenin atomlarını seçici bir şekilde düzenleyerek metalden seramiğe, polimerden yarıiletkene,

camdan kompozitlere kadar her şey alışılmışın dışında bir performans gösterecek şekilde yapılandırılabilir [5, 6].

Nano yapılı malzemelerin hacimli olan eşdeğerlerinden fiziksel olarak farklı olmasına neden olan en önemli faktör yüzey/hacim oranındaki değişimdir [7-9]. Bu nedenle, yüzeylerde bulunan atomlararası fiziksel etkileşmelerin daha güçlü olması ve buna bağlı olarak yüzey gerilimlerinin ve enerjilerinin artması nano ölçekteki malzemelerin fiziksel özelliklerini baştan sona değiştirebilir. Nano ölçekte fiziksel davranışları anlamak ve hesaplar yapabilmek için makroskobik ölçekte yapılan yaklaşımlardan daha farklı düşünmeye gerek duyulmaktadır. Bunun sonucu olarak, nano-bilim adı verilen yeni bir alan ortaya çıkmaktadır. Nanoteknoloji ile nano-bilim arasındaki farkı, kontrol edebildiğimiz şey ile anlayabildiğimiz şey arasındaki fark olarak tanımlayabiliriz. Bu yüzden nano-bilim olmadan nanoteknoloji üretmek mümkün değildir. Ayrıca, nano ölçekli malzeme davranışlarını anlayamaz ve üretmez isek yine nanoteknoloji üretmek mümkün olmayacaktır. Sonuçta, nano-malzeme bilimi, nanoteknoloji başlığı altında çalışılabilecek en önemli çalışma konusu olarak karşımıza çıkmaktadır.

Katıların mekanik özellikleri denildiğinde ilk akla gelen parametreler esneklik ve dayanıklılıkla ilişkili olanlardır ve bunlar malzeme bilimi içinde önemli bir yere sahiptir. Teknolojik alanda kullanılacak tel şeklindeki bir malzemenin özellikle Young modülünün ve kopma esnekliğinin bilinmesi arzu edilir. Makroskobik ölçekte tel şeklindeki bir malzemenin Young modülü ve kopma esnekliği genellikle çekme (germe) deneyleri ile belirlenir [10, 11]. Makroskobik ölçekte bu deneylerin yapılması nispeten kolaydır. Ancak, nano boyutlara inildiğinde bu deneylerin yapılması zorlaşır. Nano ölçekte klasik çekme deneyleri yerine nano ve hatta piko çentik (nano/piko indentation) deneyleri yapılabilmektedir [12-17]. Bir başka yöntem ise rezonatif teknikleri kullanmaktadır [12, 13, 15]. Bu tekniklerde nano ölçekli malzeme elektrik veya manyetik alanlar yardımıyla titreştirilir. Ebatları, geçirmeli veya taramalı elektron mikroskopisi (TEM ve SEM) ile belirlenen malzemenin doğal titreşim frekansları tespit edilir. Bu frekanslar kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda nano malzemenin esneklik modüllerine ulaşılır [18-20]. Deneysel olarak elde edilen sonuçlardan nano-tellerin Young modüllerinin, özellikle 100 nm nin altındaki boyutlarda, tel çapının azalmasıyla hızlı bir şekilde arttığı tespit edilmiştir [21-25]. Bu davranışın nedeni olarak; küçülen boyutlarla birlikte plastik davranışın nedeni olan zorlanma kaymasını (strain slipping) oluşturabilecek yeterli atomik tabakanın

olmayışı ve uygunsuz sıralanma kusuru (misfit) üretebilecek iç zorlanmaların üretilmemesi gösterilmektedir [26-28]. Ayrıca, plastikleşme teorilerinin büyük bir bölümü malzemenin yüzey etkilerini dikkate almakta ve yüzey etkilerinin makroskobik malzemelerde dahi önemli bir yer aldığını ortaya koymaktadır [29, 30]. Bu açıdan bakıldığında, nano ölçekli malzemelerdeki yüzey enerjilerinin büyüklüğünün de, küçülen malzeme boyutlarıyla birlikte mekanik parametreleri önemli ölçüde değiştirebileceği sonucuna ulaşılmaktadır.

Fiziksel deneyler yapmanın çok zor ya da imkansız olduğu birçok alanda bilgisayar simülasyonları yapmak fiziksel olayları anlamak ve yeni teoriler oluşturmak açısından oldukça yararlı olmaktadır. Yapılan simülasyonların, uygun modeller kullanıldığında gerçek deneylere yakın sonuçlar ürettiği görülmüştür. Yaygın olarak kullanılan bilgisayar simülasyonlarından birisi Moleküler Dinamik (MD) yöntemidir. MD yöntemi, fizik, kimya ve malzeme biliminde geniş bir şekilde kullanılan etkili bir araç olmuştur. Bu yöntem, belirli bir fiziksel sistem için tanımlanan Newton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonu yardımıyla, sistemin minimum enerjili yapılarını elde etmeyi amaçlar [31-34]. Hareket denklemleri içinde yer alan kuvvet terimleri, parçacıkların birbirleriyle fiziksel etkileşmelerini temsil eden model potansiyel enerji fonksiyonlarından türetilir. Minimum enerjili denge durumuna yerleşen model sistem, gerçek bir fiziksel sistemin pek çok özelliğini doğru olarak yansıtır. Böylece, oluşturulan model sistem üzerinde çeşitli teorik deneyler yapmak, bilinmeyen pek çok özelliği gözlemek mümkün hale gelir. Bu tür simülasyon çalışmaları yapmak amacıyla geliştirilmiş çeşitli bilgisayar programları ve açık kaynak kodları ücretli veya ücretsiz olarak temin edilebilmektedir [35]. Bunlardan açık kaynak kodlu olup GNU lisansı ile verilen ve yaygın olarak kullanılan bazı kodlar; LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [36], GROMACS [37], IMD [38] ve NAMD [39] şeklinde örneklenebilir. Bu yazılımlar paralel hesaplama teknikleri kullanırlar ve birkaç milyon atomdan oluşan moleküler sistemlerin incelenmesinde kullanılabilirler.

Metal ve alaşımların atomlararası fiziksel etkileşmelerini modellemek için genellikle çok cisim etkileşme potansiyel fonksiyonları kullanılmaktadır. Bu fonksiyonlar metaller için gerçek deneylerle uyumlu sonuçlar vermektedir. Çok cisim etkileşmelerini dikkate alan en yaygın potansiyel yaklaşımı gömülü atom metodu (Embedded Atom Method - EAM) olarak bilinir [40]. EAM yaklaşımında kristal içindeki bir atomun enerjisi, elektrostatik itici enerjilerin toplamı ile atomun bulunduğu koordinattaki elektronik yük

yoğunluğunun sebep olduğu ve çekici etkileşimleri tanımlayan gömme enerjisi terimlerinin toplamı olarak ifade edilir. EAM yaklaşımının en yaygın kullanılan tiplerine Finnis–Sinclair (FS) [41], Johnson [42], Voter–Chen (VC) [43] ve Sutton–Chen (SC) [44] modelleri örnek verilebilir. Geniş bir kompozisyon aralığında NiAl alaşımını modellemek üzere geliştirilen en yeni EAM yaklaşımı 2009 yılında Pun ve Mishin [45, 46] tarafından tanımlanmıştır.

Nano ölçekli malzeme davranışlarının anlaşılmasına yönelik çok sayıda MD simülasyonu yapılmıştır. Yang ve ark. [47] Ni ve Cu nano tellerin akma dayanımını $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ doğrultularına ve tel kalınlığına bağlı olarak belirlemek için bir dizi moleküler dinamik hesaplama yapmışlardır. Bu hesaplamalarda atomlararası etkileşimler, Baskes tarafından geliştirilen MEAM (Modified EAM) [48] yaklaşımı kullanılarak modellenmiştir. Model yapı olarak kare kesitli ve boyutları z doğrultusunda 40 örgü sabitli x - y doğrultusunda ise 6-10 arasında değişen örgü sabitli yapılar kullanmışlardır. Modellerin termal dengeye yerleşmesi için 300 K sıcaklığında 50 ps süreyle Nose-Hoover termostat işlemi uygulanmıştır. İntegrasyon adımı büyüklüğü 2 fs seçilmiştir. Model tellerin bir uçları sabitlenmiş ve diğer uçlarından belirli hızlarla çekilmişlerdir. Bu işlemlerin tamamı LAMMPS kodları kullanılarak yapılmıştır. Sonuçlardan, nano tel kesitinin azalması halinde akma zorunun arttığı belirlenmiştir. Buna göre, $\langle 110 \rangle$ doğrultusundan çekilen 2,1 nm kesitli Ni nano telin akma zoru 14.26 GPa değerinde iken 3,5 nm kalınlıklı telin akma zoru 12.29 GPa olarak tespit edilmiştir.

Cağın ve ark. [49], Q-SC tipi bir EAM modeli kullanarak CuNi alaşımının nano-telleri üzerinde zorlanma hızına bağlı zor-zorlanma incelemesi yapmışlardır. 2 nm kalınlığa sahip model sistemlerin plastik deformasyonunun incelendiği bu çalışmada $0,005 \text{ ps}^{-1}$ den $0,05 \text{ ps}^{-1}$ e kadar olan çeşitli çekme hızları kullanılmışlardır. Nano tellerin küçük kalınlıkları nedeniyle yeterli plastik deformasyon oluşturamadığı bunun yerine nano-teli sertleştiren ardışık çoklu ikizlenme tipi deformasyonlar meydana geldiğini bildirmişlerdir. Ayrıca, zorlanma hızının artmasının ikizlenme büyüklüğünü azalttığını ve daha büyük hızlarda ise zorlanma etkili amorfleşme gözlemlendiğini bildirmişlerdir.

Hocker ve ark. [50] Ni/NiAl ve Ni/Ni₃Al arayüzlerinin çekme dayanımını gözlemek için MD yöntemini kullanmışlardır. Bu çalışmada Ni/NiAl arayüzünü modellemek için Ludwig ve Gumbsch [51] tarafından ileri sürülen EAM yaklaşımını ve Ni/Ni₃Al arayüzünü modellemek için Mishin ve ark. [45] tarafından hazırlanan EAM yaklaşımını kullanmışlardır. Araştırmacılar açık kaynak kodlu IMD MD kodlarından yararlanmışlardır. Çalışmada 23 x

23 x 12 nm³ ölçülere sahip 600000 atom bulunduran modeller oluşturulmuştur. Oluşturulan modeller çalışılacak sıcaklıkta önce termal olarak dengelenmiştir. Bu dengeleme işlemleri için, her biri 2 fs olan 20000 adımlık *NPT* topluluğu integrasyonları yapılmıştır. Daha sonra model sistemler her bir integrasyon adımında $1+10^{-6}$ faktörüyle gerilerek esnetilmiştir. Çalışmalarda her temel eksene periyodik sınır şartları uygulanmıştır. Model yapılar için oluşan dislokasyonlar ve yığılma kusurları ortak komşu analizi (common neighbour analysis - CNA) kullanılarak tespit edilmiştir. Elde edilen sonuçlardan, sıcaklık arttıkça model sistem içindeki zorun azaldığı, plastik bölgenin genişlediği ve esneklik bölgesinin küçüldüğü tespit edilmiştir.

Zhan ve Gu [52], bakır nano çubukların üç noktalı eğilme esnekliğini MD yöntemle incelemişler ve sonuçları AFM (Atomic Force Microscopy) ile deneysel olarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırmışlardır. Bu incelemede bakır nano çubukların elastik, plastik ve kopma bölgesindeki davranışları zor uygulama hızına ve çubuk boyuna bağlı olarak tespit edilmiştir. Çalışmada, LAMMPS kodları kullanılmış ve hesaplamaların daha hızlı olabilmesi için 2.892 x 2.892 x 14.46 nm³ boyutlarında nispeten ince bir çubuk model oluşturulmuştur. Daha sonra çubuk boyu 32.535 nm ye kadar aralıklarla artırılmıştır. Yükleme hızı 1 m/s den 50 m/s ye kadar farklı hızlarda alınmıştır. Sonuçların çekme deneyleri ile karşılaştırıldığı çalışmada, Young modülünün çubuk boyuna bağlı olarak 71 GPa (14,46 nm için) dan 61 GPa ya (32,535 nm için) kadar azaldığı belirtilmiştir.

Bu tez çalışmasında, LAMMPS MD simülatörü [36] kullanılarak nano ölçekli Ni-at.%30Al alaşımının zor-zorlanma davranışı sıcaklığa, zorlanma hızına ve tel kalınlığına bağlı olarak incelenmiştir. Atomlararası fiziksel etkileşimleri tanımlamak için Pun ve Mishin tarafından geliştirilen EAM yaklaşımı [46] kullanılmıştır. Tanımlanan alaşım kompozisyonu için başlangıç atom koordinatları B2 süperörgü noktalarına LATGEN (LATtice GENerator) [53] programı yardımıyla yerleştirilmiştir. Çalışmalarda kullanılmak üzere 11 farklı kalınlığa sahip model sistemler üretilmiştir. Üretilen modeller 10 farklı zorlanma hızı kullanılarak gerilmiş ve zor-zorlanma eğrileri elde edilmiştir. Elde edilen zor-zorlanma eğrilerinden, model sistemlerin Young modülleri, akma noktaları, nihai zor/zorlanma değerleri ve kopma noktaları tespit edilmeye çalışılmıştır. Bu mekanik özelliklerin sıcaklıkla, zorlanma hızıyla ve model kalınlığıyla değişimleri incelenmiştir. Bu değişimlere eşlik eden yapısal özellikler ve bunların alaşımın temel özellikleri ile ilişkisi ortaya konulmak istenmiştir. Sonuçta, NiAl alaşımının tanımlanan kompozisyonu için şekil hatırlama etkisi göstermesinin elastik özellikleri etkilediği gözlenmiştir.

2. NANO TELLER VE ÇUBUKLAR

2.1. Üretim Teknikleri

Nano ölçekli malzemeler laboratuvarında önce teoriyle, bir düşünceyle, çabayla, tesadüfen veya bunların bir karışımı sonucu bulunur. Bulunan malzeme üzerinde çeşitli testler yapılır, özellikleri ortaya çıkarılır ve ilk örnek yapılır. Nano malzemelerin üretiminde iki yol vardır [6, 12, 13, 54]:

- a) Yukarıdan Aşağıya doğru (top down)
- b) Aşağıdan Yukarıya doğru (bottom up)

Her iki modelin avantajları ve dezavantajları vardır. Yukarıdan aşağıya doğru üretim katı bir maddeden, onu yonta yonta heykel yapmaya benzetilebilir. Aşağıdan yukarıya doğru üretim ise parçaları birleştirerek bir otomobil yapmaya benzer. Genel olarak yukarıdan aşağıya üretim ucuz değildir, zaman alıcıdır ve büyük miktar üretim için çok uygun değildir. Aşağıdan yukarıya üretim ise atom veya molekül seviyesinden başlayarak nano yapılara ulaşılır. Üretim çok daha ucuzdur.

Yukarıdan aşağıya üretim yöntemi oldukça çeşitlidir. Genel olarak fiziksel üretim yöntemleri yukarıdan aşağıya üretim grubuna girer. Bunlar mekanik, yüksek enerji, kimyasal, litografik (baskı) ve doğal yöntemlere ayrılır. Aşağıda en popüler üretim teknikleri verilmiştir [6].

Mekanik yöntem; Kesme, haddeleme, dövme, işleme, sıkıştırma, frezeleme ve püskürtme ile nano parçalar elde etmek için uygulanan belli başlı üretim yöntemidir. Mekanik üretim yönteminde fiziksel bir uygulama vardır, kimyasal değişim söz konusu değildir.

Kimyasal yöntem; Yanma hem yukarıdan aşağıya hem de aşağıdan yukarıya nano malzeme üretim tekniğidir. Dağlama bir kimyasal yukarıdan aşağıya yöntemidir, litografi (baskı) başta olmak üzere çeşitli uygulama alanları vardır.

Litografi (baskı) yöntemi; Nanoteknoloji kapsamında uygulanması ağırlıklı bilgisayar teknolojisinde görülmektedir. Yongalar ve tümleşik devreler, mikro-elektromekanik makineler ve birçok başka uygulamalarda litografi öne çıkmaktadır. Her geçen gün litografik uygulamalar daha yüksek teknoloji gerektirmektedir. Parçalar küçüldükçe radyasyon dalga boylarının küçülmesi gerekir ki bu daha yüksek teknoloji demektir. Litografinin çeşitli uygulamaları vardır: Optik litografi, parça huzmesi litografi, yüksek ultramor litografi, x-ışını litografi, elektron huzmesi litografi vb. [6].

Aşağıdan yukarıya üretim bir çeşit atom ve molekülleri bir araya getirerek istenen nano malzemeyi oluşturmaktır. Bu yöntem, Kimya ve biyoloji alanlarında daha sık rastlanır. Aşağıdan yukarıya üretim maddenin içinde bulunduğu faz haline göre sınıflandırılır: Gaz fazı yöntemi, Sıvı fazı yöntemi [6].

Gaz fazı yöntemi: Bu yöntem, karbon nano tüpler elde etmek için en uygun olanıdır. Çünkü enerji ihtiyacı daha azdır ve ürün üzerinde kontrol daha kolaydır. Gaz fazı yöntemleri aşağıdaki şekilde gruplandırılabilir.

Buharlaştırma; Bu yöntemde metal (örneğin altın) basıncı çok düşük vakum odasında, asal gaz ortamında buharlaştırılır ve buharlaşan metal asal gaz atomları ile çarpışarak soğur ve yeni çekirdekler oluşur. Parçacık boyutu 1-100 nm arasında ve gaz basıncını ayarlayarak kontrol altına alınabilir. Daha sonra toplanan parçacıklar istenirse sinterlenerek katı nano malzeme elde edilir. Bu sistem özellikle metal nano parçacıklar elde etmek için bilinen en basit sistemdir.

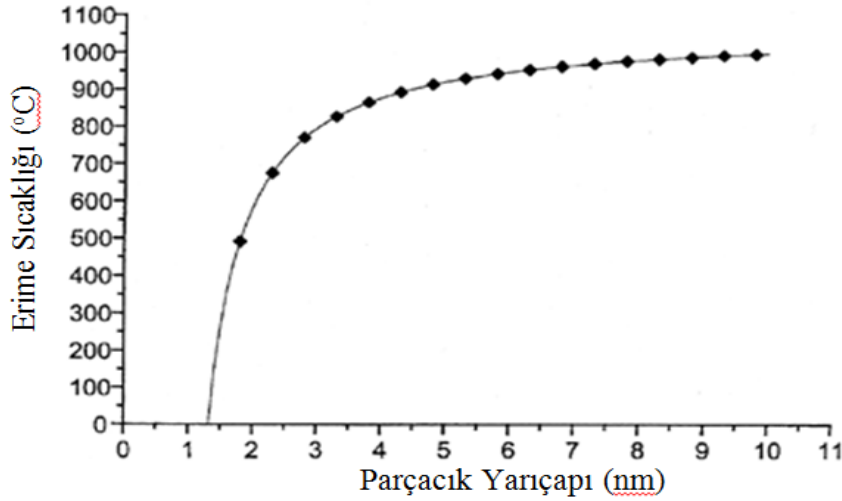
Kimyasal buhar çökeltmesi; Bu yöntemde yüksek sıcaklık altında gaz fazında olan malzeme bir plaka veya katalizör üzerinde nano malzemeye dönüşür. Çok saf, yüksek performanslı katı nano malzemeler elde edilir. Yarı iletken endüstrisindeki ince filmler bu yöntemle üretilir

Sıvı fazı yöntemi: Kimyasal tepkimelerin çoğu sıvı fazda oluşur. Çünkü sıvı hali malzemelerin bir araya gelmesi, tepkimeye girmesi için en uygun ortamı sağlar. Çok çeşitli sıvı faz üretim yöntemi vardır. En iyi nano parçacık sıvı faz yöntemiyle elde edilir. Bu yöntemle elde edilen nano parçacıklar dağınık durumda olup topaklanmalar azaltılabilir veya önlenir. Üretilen nano parçalar çok az farkla aynı ölçüdedir, bu yöntemle kimyasal bileşim ve morfoloji de denetim altına alınabilir. En önemli sıvı faz yöntemi Sol-jel sentezidir.

Sol-Jel sentezi; Bu yeni bir yöntem değildir, fakat nano teknoloji için birçok olanak sağlamaktadır. Son yıllarda ise ileri nano malzemeler ve kaplamalar üretmek için çok geliştirilmiştir. Bilhassa metal oksit nano parçacıklar ve kompozit nano parçacıkların üretimi için çok uygundur. Düşük sıcaklık gereksinimi büyük avantaj sağlamaktadır.

2.2. Nano Yapıların Termodinamik Özellikleri

Malzemelerin pek çok fiziksel özelliği, malzeme boyutlarının mikro ve nano boyutlara düşmesiyle birlikte değişir. Özellikle erime noktasındaki değişimin anlaşılması üzerine yapılmış pek çok çalışma bulunmaktadır. Bu çalışmalarda, malzeme boyutlarının nano metre düzeyine düşürülmesi halinde erime sıcaklığının genellikle azaldığı belirtilmekle birlikte çok az çalışmada erime sıcaklığındaki sınırlı artıştan da bahsedilmektedir. Erime sıcaklığındaki artışın sebebi olarak, atomik bağlardaki değişim ve bunun sonucunda oluşan band yapısı değişimleri gösterilmektedir. Erime sıcaklığındaki artış genellikle nano parçacıkların başka malzemeler içine gömüldüğü kompozit malzemelerde görülmektedir [55]. Erime sıcaklığındaki azalmanın açıklanmasına yönelik olarak, homojen ve heterojen çekirdeklenme teorilerine dayanan birkaç teori bulunmaktadır. Bu teorilere göre, nano-teller, nano-tüpler ve nano parçacıklar için erime sıcaklığı malzemenin boyutları ile azalır ve bu azalma Şekil 2.1 deki gibi meydana gelir. Bu azalma genellikle yüzey-hacim oranındaki değişimle ilişkilendirilir. Malzemenin şekli de yüzey-hacim oranını önemli ölçüde etkiler ve böylece oluşturulan teoriler malzeme şeklini de dikkate alır.



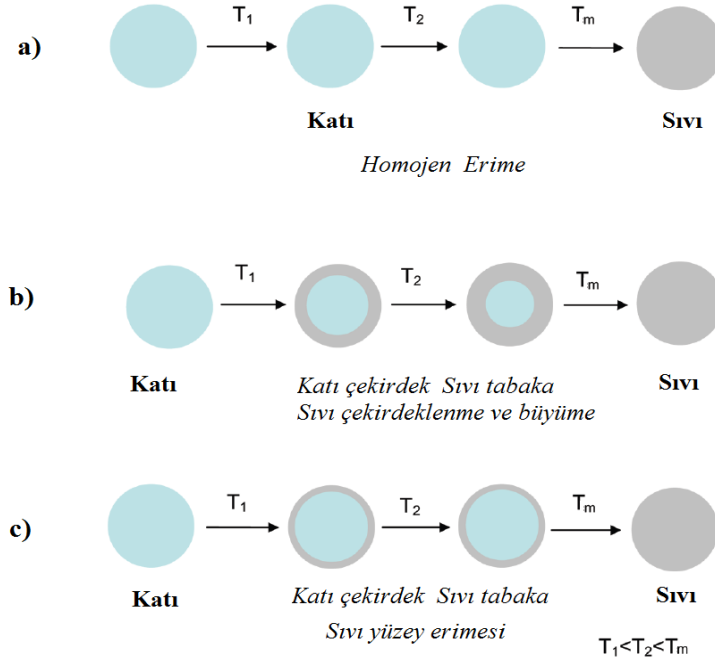
Şekil 2.1. Nano malzemelerin erime sıcaklığının malzeme boyutlarına bağlı değişimi [55].

En yaygın bilinen üç erime modeli Şekil 2.2 de görülmektedir [56]. Şekil 2.2 (a) da katı fazın sıvı fazla aynı anda dengede olduğu Homojen Erime Modeli (HEM)

görülmektedir. Böyle bir durumda yüzey erimesi yoktur ve nano malzemenin erime sıcaklığı (T_{cm}) Denklem 2.1 de verilen bağıntı ile belirlenir.

$$\frac{T_{cm}}{T_{CM}} = 1 - \frac{4V}{\Delta H_f D} \left[\gamma_{sv} - \gamma_{lv} \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \right)^{2/3} \right] = 1 - \frac{\beta_{HMH}}{D} \quad (2.1)$$

Burada γ_{sv} ve γ_{lv} sırasıyla katı-buhar ve sıvı-buhar ara yüzey enerjilerini, ΔH_f bulk latent ısını, D nano parçacık çapını, ρ_s ve ρ_l katı ve sıvının yoğunluğunu ve T_{CM} ise bulk erime sıcaklığını tanımlar.



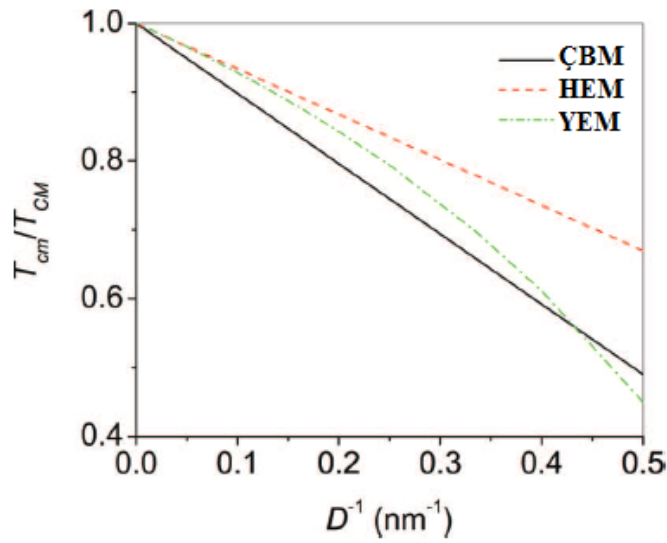
Şekil 2.2. Nano boyutlu metaller için üç farklı erime modeli. a) Homojen erime, b) sıvı çekirdeklenme ve büyüme modeli ve c) yüzey erime modeli [56].

Şekil 2.2 (b) de görülen sıvı Çekirdeklenme ve Büyüme Modeline (ÇBM) göre, erime sıcaklığından daha düşük bir sıcaklıkta yüzey sıvılaşmaya başlar ve sıcaklık artışıyla birlikte yüzeyin sıvılaşma miktarı artar, yani sıvı tabaka büyür. Erime sıcaklığına ulaşıldığında malzeme tamamen sıvı faza dönüşmüş olur. Bu modele göre nano parçacığın erime sıcaklığı Denklem 2.2 ile verilir:

$$\frac{T_{cm}}{T_{CM}} = 1 - \frac{6V}{\Delta H_f D} \left[\gamma_{sv} - \gamma_{lv} \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} \right)^{1/2} \right] = 1 - \frac{\beta_{LNG}}{D} \quad (2.2)$$

Şekil 2.2 (c) de ise Yüzey Erime Modeli (YEM) görülmektedir. Bu modelde önce yüzey erimesi oluşur, fakat katının erime sıcaklığına ulaşıp tamamen sıvı faza dönüşünceye kadar yapıda herhangi bir değişim meydana gelmeyeceği öngörülür. Erime sıcaklığına gelindiğinde yapı tamamen sıvı faza geçmiş olarak kabul edilir. Bu model de erime sıcaklığı Denklem 2.3 ile elde edilir. Üç model için erime davranışının birbirleriyle karşılaştırılması Şekil 2.3 görülmektedir.

$$\frac{T_{cm}}{T_{CM}} = 1 - \frac{4\gamma_{s1}V}{\Delta H_f(D-2\delta)} = 1 - \frac{\beta_{LSM}}{(D-2\delta)D} \quad (2.3)$$



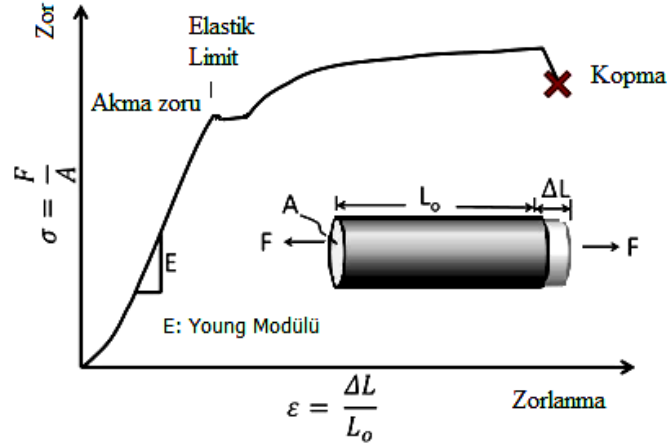
Şekil 2.3. Nano boyutlu malzemelerde erime modellerinin karşılaştırılması [56].

2.3. Nano Yapıların Mekanik Özellikler

Malzemelerin mekanik özelliklerinden en önemlileri arasında bulunan Young Modülü malzemenin esneklik özelliklerini temsil eder. Gerilme modülü olarak da bilinen Young Modülü, elastik izotropik bir malzemenin sertliğinin ölçüsüdür. Young Modülü genel olarak; Hook kanunu sınırları içinde malzemenin bir eksen boyunca uygulanan zorun aynı doğrultudaki zorlanmaya oranı olarak tanımlanır. Katı mekaniğinde zor-zorlanma eğrisinin herhangi bir noktasındaki eğimi tanjant modülü olarak adlandırılır [10]. Zor-zorlanma eğrisinin başlangıçtaki lineer değişim bölgesindeki tanjant modülünün değeri Young modülü adını alır (Şekil 2.4) ve aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$E = \frac{\text{Çekme Zoru}}{\text{Esnekleme Zorlanması}} = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta L/L_0} \quad (2.4)$$

Moleküler dinamik hesaplamalarında atomlar arasındaki kuvvetler doğrudan hesaplanır. Bu nedenle, MD yöntemiyle Young modülünü belirlemek nispeten kolay bir hesaplama değildir. Model sistem belirli bir doğrultuda belirli oranlarda çekilerek zorlanma oluşturulur ve bu zorlanmaya bağlı olarak atomlar arasındaki kuvvet yardımıyla etkin kuvvet ya da zor değeri hesaplanır. MD hesaplamalarında en yaygın kullanılan metot virial zor metodu ve enerji metodudur.



Şekil 2.4. Malzemelerin zor-zorlanma davranışı ve Young Modülü [10].

2.3.1. Zorlanma Teorileri

Zorlanma, belirli bir referans uzunluğa göre cisim içindeki parçacıkların yerdeğiştirmesini temsil eden deformasyonun normalize edilmiş bir ölçüsü olarak tanımlanır. Bir cismin deformasyonu genel olarak $X=f(x)$ şeklinde ifade edilebilir. Burada x cisim içindeki bir referans noktasıdır. Deformasyon uzunluk birimindedir ve bu nedenle cismin şekil değişimi ile hareketi arasındaki ayrımı ortaya koyamaz. Zorlanma tensör şeklinde ifade edilir ve bu nedenle “normal” ve “kesme” bileşenlerine ayrılabilir. Cismin uzunluğu boyunca sıkıştırılması veya gerilmesi halindeki bileşen normal bileşen (normal strain) olarak ve cismin düzlemlerinin birbirlerine göre kaymasını tanımlayan bileşen ise kesme bileşeni olarak tanımlanır. Bir malzemenin boyunda bir artış varsa normal bileşene gerilme zorlanması, eğer sıkıştırma yapılıyorsa sıkıştırma zorlanması denilmektedir.

2.3.2 Virial Zor Metodu

Belirli bir atomik topluluk için virial zoru

$$\Pi^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left\{ -\sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right\} \quad (2.5)$$

şeklinde tanımlanmaktadır [57]. Burada Ω sistem hacmini, m_i ve v_i i parçacığının kütlesi ve hızını, F_{ij} i ve j atomları arasındaki kuvveti, r_{ij} i ve j atomları arasındaki uzaklığı, α ve β indisleri Kartezyen bileşenleri temsil etmektedir. Denklem 2.5 ayrıştırılarak aşağıdaki gibi de yazılabilir:

$$\Pi^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \sum_i \bar{\omega}_i \pi_i^{\alpha\beta} \quad (2.6)$$

burada;

$$\pi_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\bar{\omega}_i} \left\{ -m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right\} \quad (2.7)$$

şeklinde tanımlanır ve $\sum \bar{\omega}_i = \Omega$ 'dir. Buna göre Denklem 2.7 i atomu ile ilişkili atomik seviyede stres tanımı olarak kullanılabilir. $\bar{\omega}_i$ i atomunun etkin hacmi olarak alınır. Denklem 2.5 in sağ tarafındaki ilk toplam termal titreşimlerden kaynaklanır ve statik hesaplamalarda sıfırdır. İkinci toplam terimi ise atomlar arası kuvvetten kaynaklanır ve ortalama olarak düşünüldüğünde Cauchy zoru ile eş anlamlı tutulabilir. Simülasyon çalışmalarında ilk yapısal gevşeme (relaksasyon) sonunda, bir nano-telin bütün hacmi üzerinden ortalama virial stresi sıfır olur. Ancak, stres altındaki bir nano-telin belirli bir uzunluğu için virial stresi sıfırdan farklı olacaktır. Bir nano-telin x doğrultusunda gerilmesi halinde sadece Π^{xx} terimi sıfırdan farklı olur. Π^{xx} Virial stresi ile ε zorlanması arasındaki $\Pi^{xx} = E_0 \varepsilon + a_2 \varepsilon^2$ polinom ilişkisi kullanılarak fit yapılacak olursa, buradaki E_0 terimi gevşemiş nano-telin Young modülünü tanımlar. Bu metot virial stres metodu olarak bilinir [57].

2.3.3. Enerji Metodu (Klasik Sürekli Mekanik)

Young modülünü hesaplamak için kullanılabilecek bir diğer metot ise klasik mekanik yaklaşımlardan elde edilen enerji üzerine kurulu metottur. Başlangıç gevşemesinden sonra her hangi bir dış kuvvet yokken nano-tel denge halindedir. Böylece herhangi bir kesit yüzey üzerindeki ortalama zor sıfırdır. Tek eksenli belirli bir zorlanma oluşturacak statik benzeri bir yükleme durumunda o eksene ait zor, nano-telin bir ucundaki dış uygulama kuvveti ile dengelenir. Bu yükleme esnasında nano-telin toplam potansiyel enerji değişimi dış kuvvet tarafından yapılan işe eşit olur:

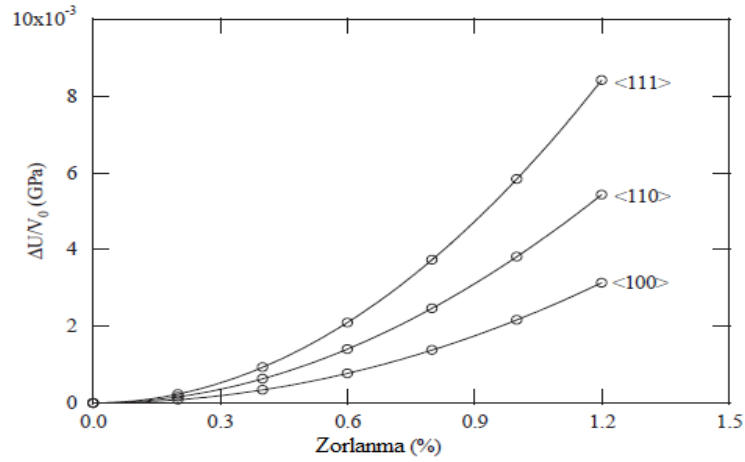
$$\Delta U = \int_0^{\Delta l} F d(\Delta l) = \int_0^\varepsilon S \cdot \sigma \cdot l d\varepsilon \quad (2.8)$$

Burada ΔU , başlangıç gevşemesinden sonra nano-telin toplam potansiyel enerjisine göre toplam potansiyel enerjinin değişimidir. S nano-telin yüke dik kesit yüzey alanı, l nano-tel uzunluğu, $d\varepsilon = d(\Delta l)/l = d(l - l_0)/l = dl/l$ dir ve burada l_0 başlangıç gevşemesi sonrasında nano-telin uzunluğudur, F ise x doğrultusunda etkiyen dış kuvvet, $\sigma = F/S$ ortalama eksen zoru ve V nano-telin hacmidir. Buradan gerekli matematik işlemler yapılarak;

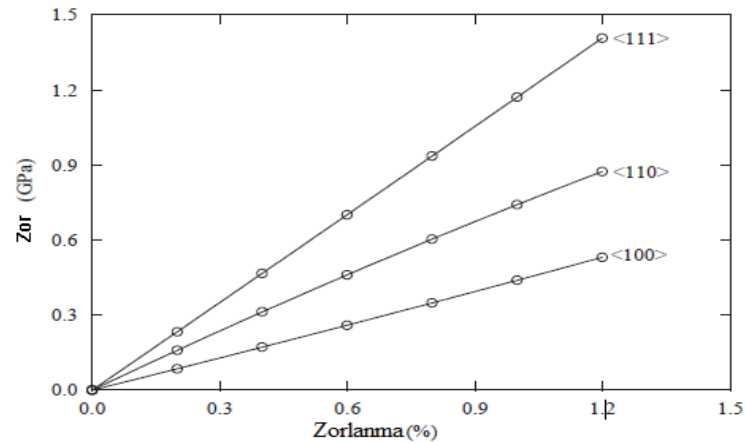
$$\frac{\Delta U}{V_0} = \zeta \left[\frac{1}{2} \varepsilon^2 + \frac{1}{3} \zeta \varepsilon^3 \right] \quad (2.9)$$

ifadesine ulaşılır [57]. Burada $\zeta = E_0$ dir, yani $\varepsilon=0$ da gevşemiş nano-telin Young modülüdür. Moleküler dinamik simülasyonlarından ΔU ve V_0 kolaylıkla hesaplanabilir.

Yukarıdaki yaklaşımlar takip edilerek bulk altın için elde edilmiş farklı kristal yönelimlerine göre tek eksenli zorlanma halinde toplam potansiyel enerji değişimi Şekil 2.5 de, zor-zorlanma davranışı ise Şekil 2.6 de verilmiştir [57].



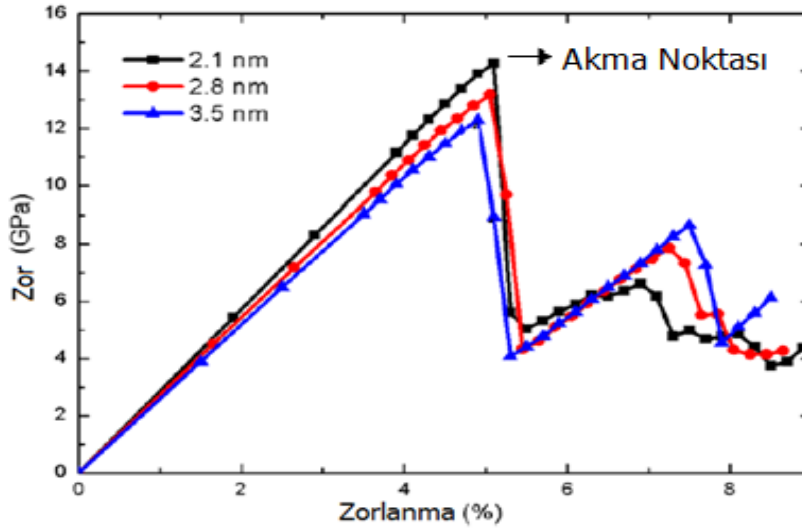
Şekil 2.5 Bulk altın için tek eksenli zorlanmaya karşı toplam potansiyel enerjinin değişimi [57].



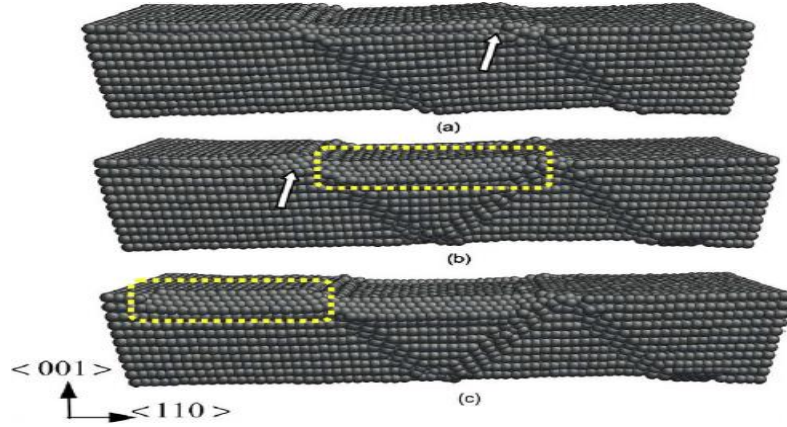
Şekil 2.6. Bulk altın için Virial zoru [57].

2.3.4. Nikel Nano Teller Üzerine Moleküler Dinamik Hesaplamalar

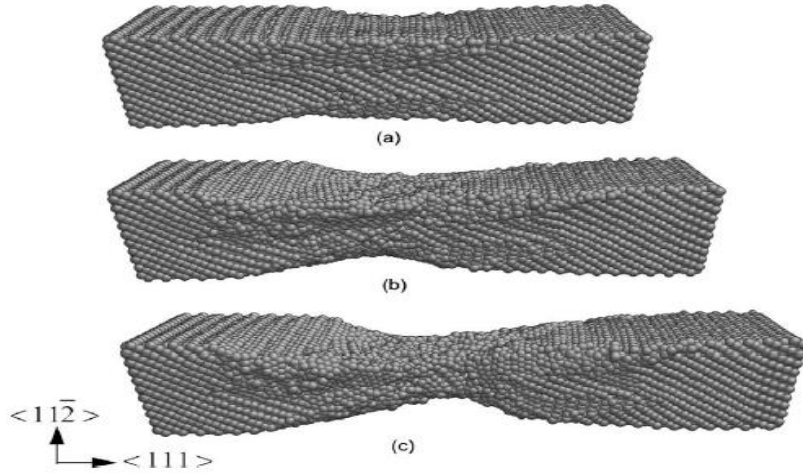
Yang ve ark. [47] metal nano tellerin akma dayanımını belirlemek için bir dizi moleküler dinamik hesaplama yapmışlardır. LAMMPS kodlarının kullanıldığı bu çalışma sonucunda, nikel nano tellerin $\langle 110 \rangle$ doğrultusu için gerilme zor-zorlanma tepkisini Şekil 2.7 de görüldüğü gibi elde etmişlerdir. Bu çalışmadan elde edilen atomik yapı değişimleri ise Şekil 2.8 de verilmiştir. Şekildeki oklar, gerilme esnasında kristal yapıdaki yeniden yönelim oluşumlarını göstermekte ve kutular yeniden yönelim yapılarını göstermektedir. Şekil 2.7 den elde edilen bulgulara göre, nikel nano tellerde akma dayanımı kesit yüzey büyüklüğünün azalması ile artmaktadır. Akma olayının başlamasına atomik yapıdaki yeniden yönelimler, kayma kusurlarının oluşumları gibi kusur aktiviteleri gösterilmektedir. Böylece telin kopması gecikmekte ve plastik deformasyonlar oluşmaktadır. Plastik deformasyon oluşumlarının başlangıç kristal yapı yönelimine bağlı olarak değişiklik gösterdiği de aynı çalışmada belirtilmektedir [47]. Ni nano-tellerin $\langle 111 \rangle$ doğrultusundan gerilmesi halinde oluşacak atomik yapı değişimleri ise Şekil 2.9 da görülmektedir. Akma dayanımının nano-tel boyutlarına bağlı değişimi de Şekil 2.10 deki gibi belirlenmiştir.



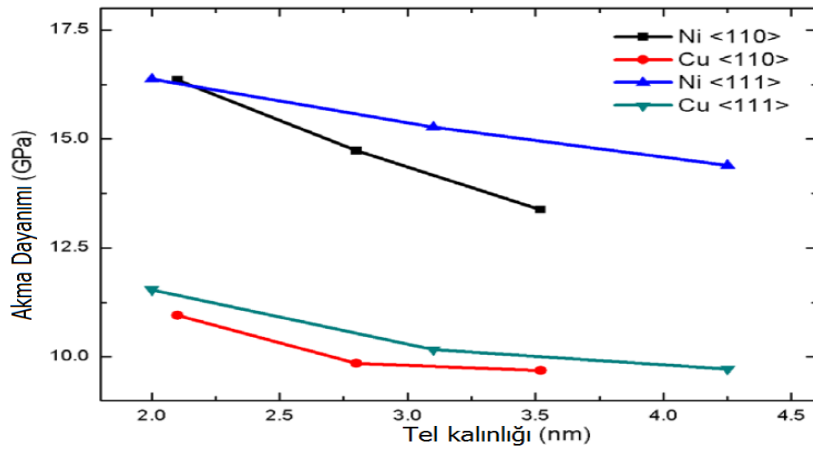
Şekil 2.7. Ni nano-tellerin $\langle 110 \rangle$ doğrultusu için gerilme zor-zorlanma tepkisi [47].



Şekil 2.8. $\langle 110 \rangle$ Doğrultusundan gerilen Ni nano-tellerin atomik yapısındaki değişimler. a) %5.1 zorlanma, b) %5.3 zorlanma ve c) % 8.5 zorlanma [47].



Şekil 2.9. $\langle 111 \rangle$ Doğrultusundan gerilen nikel nano teller. a) %10 zorlanma, b) %25 zorlanma ve c) %41 zorlanma [47].



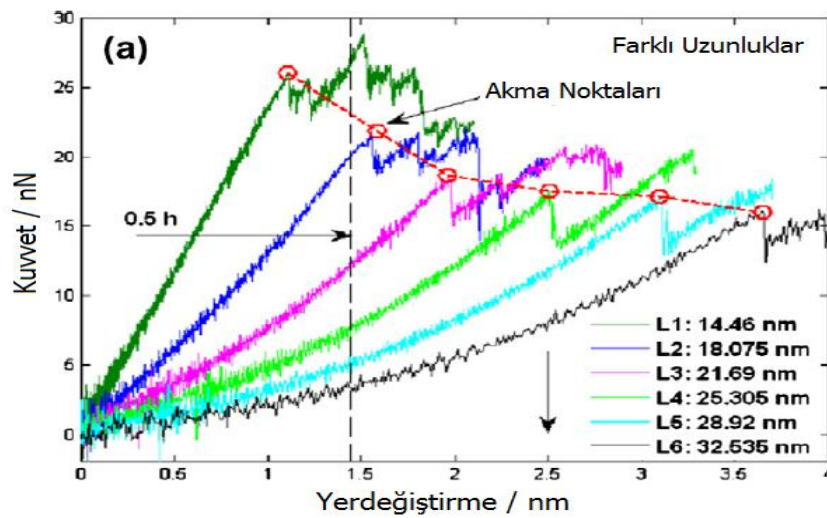
Şekil 2.10. Temel doğrultularda gerilen nikel ve bakır nano-tellerin akma dayanımları [47].

2.3.5. Bakır Nano Teller Üzerine Moleküler Dinamik Hesaplamalar

Zhan ve Gu [52] bakır nano tellerin eğilme davranışını moleküler dinamik yöntemle incelemişlerdir. Bu incelemede bakır nano tellerin elastik, plastik ve kopma bölgesindeki davranışları tellerin uzunluklarına ve kalınlıklarına göre tespit edilmiştir. Çalışmada, moleküler dinamik hesaplamalarından elde edilen kuvvet- yerdeğiştirme ($F-d$) eğrileri ve bu eğrilerin zor uygulama hızına bağlı değişimleri kullanılmıştır. Burada kuvvet ifadeleri virial atomik zor tensörlerinden türetilmiştir. Bu çalışmada kullanılan MD atomik yapılar Şekil 2.11 de ve elde edilen zor-zorlanma davranışları Şekil 2.12 de görülmektedir [52].



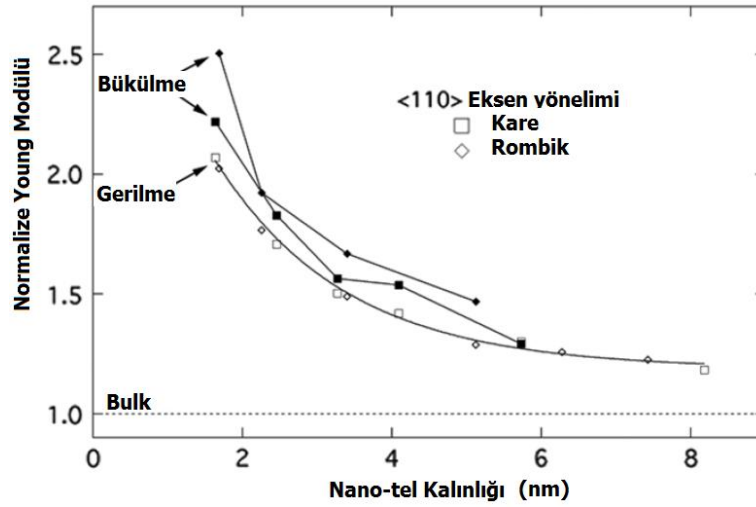
Şekil 2.11. Bakır nano tellerin MD ile incelenmesinde kullanılan atomik modelin görüntüsü [52].



Şekil 2.12. Bakır nano tellerin MD ile hesaplanan Zor-zorlanma davranışları [52].

2.3.6. Young Modülü – Tel Kalınlığı İlişkisi

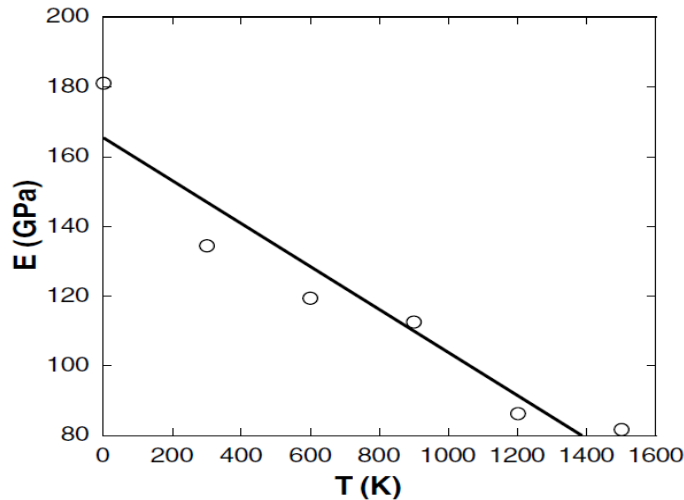
Nano teller için Young modülü değerin tel kalınlığının azalmasıyla arttığı tespit edilmiştir. McDowell ve ark. [23] tarafından yapılan bir MD çalışmasında gümüş nano tellerin kalınlığıyla Young modülü arasındaki ilişki Şekil 2.13 da verildiği gibi belirlenmiştir. Buna göre, gümüş nano telin hem bükülme esnekliği için hem de çekme esnekliği için Young modülü kalınlıkla üstel olarak azalmaktadır. Benzer sonuçlar NiTi alaşımı [58] ve NiAl [59, 60] için de elde edilmiştir.



Şekil 2.13. Gümüş nano tellerin kalınlık-Young modülü ilişkisi [23].

2.3.7. Young modülü – Sıcaklık İlişkisi

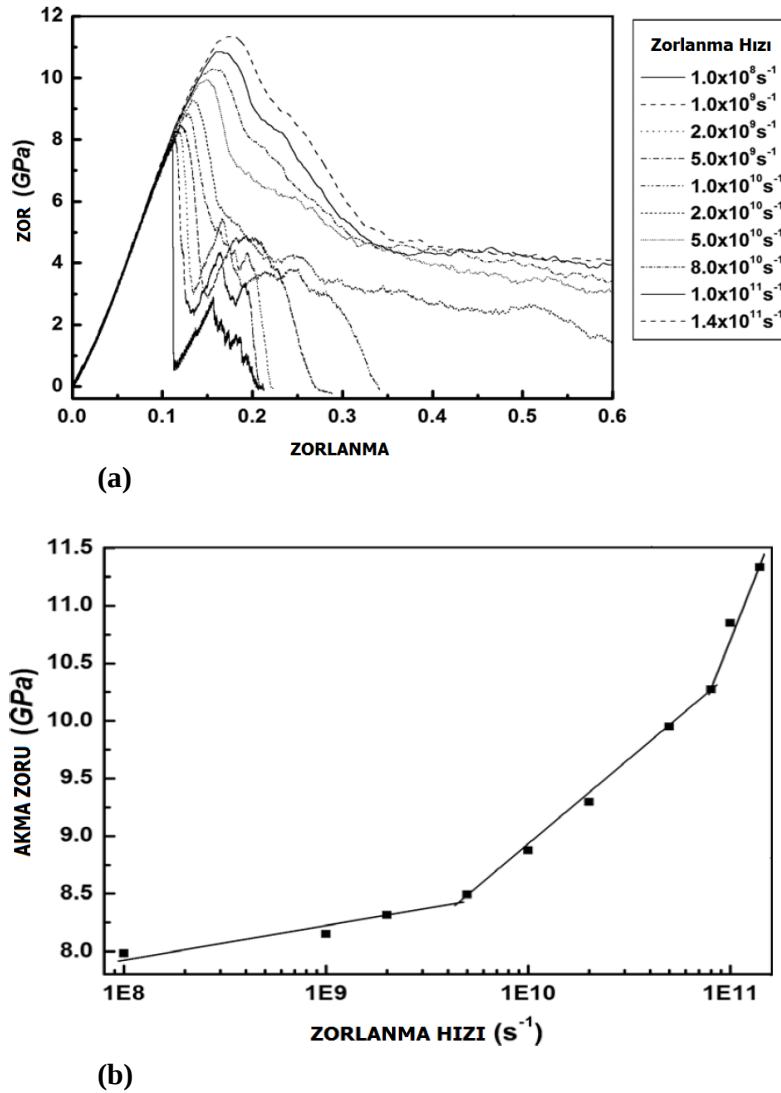
6,5 nm tane kalınlığına sahip nano boyutlu Ta model sistemler üzerinde yapılan MD çalışmaları sonucunda Young modülünün sıcaklığın artmasıyla azaldığı tespit edilmiştir [61]. Bu çalışmanın sonucu Şekil 2.14 de verilmiştir.



Şekil 2.14. Nano boyutlu tantalum için Young modülünün sıcaklıkla değişimi [61].

2.3.8. Young Modülü – Zorlanma Hızı İlişkisi

Wen ve ark. [62] Ni nano tellerinin mekanik davranışlarını zorlanma hızına bağlı olarak inceledikleri bir MD çalışmasında zorlanma hızını $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ den $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ mertebesine kadar değiştirmişlerdir. Bu çalışmada atomlar arasındaki etkileşimler kuantum düzeltmeli SC EAM yaklaşımı ile modellenmiştir. Kare kesitli taban yüzeyine sahip model sistemin kalınlığı 2,53 nm (~ 7 FCC birim hücresi) kadar ve uzunluğu 24,61 nm alınmıştır. Çalışma sonunda elde edilen zor-zorlanma eğrisi ve akma zorunun uygulanan zorlanma hızına bağlı değişimleri Şekil 2.15 de verilmiştir. 300 K sıcaklıkta [001] doğrultusu için Young modülünü 70 GPa civarında tespit etmişlerdir. Benzer sonuçlar yine MD yöntemiyle bakır nano teller üzerine yapılan başka bir çalışmada da elde edilmiştir [63].



Şekil 2.15. 300 K de nikel nano telin (a) zorlanma hızına bağlı zor-zorlanma davranışı ve (b) akma zorunun zorlanma hızı ile değişimi [62].

3. MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMİ

MD metodu analitik olarak sonuçlara ulaşamayan problemlerin nümerik çözümlerini bulmayı ve kurulan teorilerin deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmasını amaçlar. MD hesaplamaları, doğru modeller kullanılarak fiziksel sistemlerin deneysel olarak gözlenmesi zor olan davranışlarını incelemeyi mümkün kılar [31-34].

MD hesaplamaları genellikle üç adımda planlanır: *i*- hazırlık, *i*-dengeleme, *iii*- sonuçların üretilmesi [31]. Birinci adımda, başlangıç değer problemi haline getirilen hareket denklemlerinin; ilk konumlar ve ilk hızlar tanımlanarak sistemin başlangıç şartları oluşturulur. İkinci adımda, sayısal integrasyon algoritmaları yardımıyla hareket denklemleri bilgisayarda çözülür ve sistemin belirlenen termodinamik şartları için minimum enerjili bir konuma ilerlemesi sağlanır. Üçüncü adımda, termodinamik olarak dengelenmiş sistemin çeşitli fiziksel ölçümleri (hesaplamaları) yapılarak sonuçlara ulaşılır. Doğru sonuçlara ulaşmada anahtar faktörlerden birisi sistemin başlangıç şartlarının amaca uygun seçilmesi iken diğeri atomlararası fiziksel etkileşmeleri tanımlayan potansiyel enerji fonksiyonlarının doğru tanımlanmasıdır.

MD yönteminde, fiziksel sistemin hareket denklemlerinin elde edilebilmesi için bazı termodinamik değişkenler üzerinde çeşitli sınırlamalar getirilir. Parçacık sayısının (N), sistem hacminin (V) ve sistem toplam enerjisinin (E) sabit kabul edildiği bir fiziksel sistem NVE istatistik topluluğu olarak dikkate alınır. Bunun dışında, sabit parçacık, sabit basınç (P) ve sabit entalpi (H) için kurulan model sistemler NPH istatistik topluluğu olarak bilinir [32, 33]. Sıcaklığın (T) sabit alındığı sistemler için NPT ve NVT istatistik toplulukları örnek verilebilir.

3.1. NVE Topluluğu için Moleküler Dinamik Yöntemi

Sabit parçacık sayılı ve sabit hacim içinde bulunan E enerjili bir sistemin (NVE topluluğu) atomlararası etkileşme enerjisi $\Phi(r_{ij})$ olmak üzere sistemin Lagrange fonksiyonu;

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{r}_i^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>1}^N \Phi(r_{ij}) \quad (3.1)$$

şeklindedir. Burada $\dot{r}_i$, i parçacığının hızı, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ ise i ve j parçacıkları arasındaki mesafedir. (3.1) ile verilen Lagrange fonksiyonu çözülerek, i parçacığına ait hareket denklemi,

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i} \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (3.2)$$

şeklinde olur. m_i ve $\ddot{\mathbf{r}}_i$, i parçacığının kütlesi ve ivmesini, $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ ise $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ vektörel farkı temsil eder.

Bir sistemin hareket denklemleri elde edildikten sonra sayısal çözüm yapılabilir. Sayısal çözümlerin yapılmasında; Euler, Runga-Kutta, Gear ve Verlet gibi çeşitli algoritmalar kullanılmaktadır [31, 32]. En çok tercih edilen algoritma Verlet algoritmasının hız formudur:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + h v_{ix}^n + \frac{h^2}{2m_i} F_{ix}^n \quad (3.3)$$

$$v_{ix}^{n+1} = v_{ix}^n + \frac{h}{2m_i} (F_{ix}^n + F_{ix}^{n+1}) \quad (3.4)$$

(3.3) ve (3.4) bağıntıları Verlet algoritmasının sadece x bileşenlerini tanımlar. Üç boyutta çözüm yapmak için aynı ifadeler diğer vektör bileşenlerine de uygulanır [33]. Burada F_{ix} kuvvetleri potansiyel enerji fonksiyonunun gradyentinden elde edilir. (3.3) ve (3.4) bağıntılarının sayısal olarak çözülebilmesi için başlangıç ($n = 0$) konum ve hızlarının bilinmesi gereklidir. Bu, sistemin başlangıçtaki fiziksel şartları dikkate alınarak yapılabilir. N atomlu bir sistemde başlangıç konumlarının ve hızlarının sayısı $6N$ olacaktır. Başlangıç atom konumları ideal kristal örgü noktaları olarak kabul edilebilir. Başlangıç atom hızlarının belirlenmesinde ise, sistemin başlangıç sıcaklığına uygun Maxwell hız dağılımından yararlanılabilir.

NVE istatistik topluluğu olarak kabul edilebilecek bir fiziksel sistemin MD algoritması, $h = \Delta t$ integrasyon zaman adımı büyüklüğü olmak üzere, konumları ve hızları (Denklem 3.3 ve 3.4) istenilen toplam süre (n) için hesaplar. Böyle bir algoritmanın temel yapısı aşağıda verilmiştir:

NVE Algoritması [33]

- 1) $n = 0$ için, x_i^0 ve v_i^0 başlangıç değerlerini tanımla ve f_{ix}^0 ifadesini hesapla.
- 2) (3.3) ifadesini kullanarak konumları h kadar ilerlet.
- 3) x_i^{n+1} konumlarını kullanarak f_{ix}^{n+1} kuvvetlerini hesapla.
- 4) (3.4) ifadesini kullanarak hızları h kadar ilerlet.
- 5) $n \leftarrow n+1$ alarak (yani n yi 1 artırarak) 2. basamağa geri dön.

3.2. Gömülü Atom Metodu

Metal ve alaşımların atomlararası fiziksel etkileşmelerini modellemek için genellikle çok cisim etkileşme potansiyel fonksiyonları kullanılmaktadır. Bu fonksiyonlar metaller için deneylerle uyumlu sonuçlar vermektedir. Çok cisim etkileşmelerini dikkate alan en yaygın potansiyel yaklaşımı gömülü atom metodu (Embedded Atom Method - EAM) olarak bilinir [40].

EAM yaklaşımında kristal içindeki bir atomun enerjisi, elektrostatik itici enerjilerin toplamı ile atomun bulunduğu koordinattaki, komşu atomlardan kaynaklanan elektronik yük yoğunluğu nedeniyle ortaya çıkan çekici etkileşmeleri tanımlayan gömme enerjisi terimlerinin toplamı olarak ifade edilir. Böylece, N atomlu bir kristalin toplam potansiyel enerjisi,

$$E_T = \sum_{i=1}^N E_i \quad (3.5)$$

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \phi(r_{ij}) + F_i(\bar{\rho}_i) \quad (3.6)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \rho(r_{ij}) \quad (3.7)$$

olarak hesaplanır [40-46]. Burada, $\phi(r_{ij})$ itici etkileşmeleri tanımlayan etkileşme fonksiyonu, $\rho(r)$ herhangi bir komşu atomun i koordinatlarındaki elektrostatik yük yoğunluğunu tanımlayan bir fonksiyon ve $F_i(\bar{\rho}_i)$ ise gömme enerjisini tanımlayan bir fonksiyondur. Bu üç fonksiyona bağlı olarak EAM yaklaşımının farklı sürümleri mevcuttur. EAM nin en çok bilinen sürümleri Finnis–Sinclair (FS) [41], Johnson [42], Voter–Chen (VC) [43] ve Sutton–Chen (SC) [44] modelleridir.

EAM yaklaşımında bir i atomu üzerine etkiyen kuvvet, (3.6) ile verilen potansiyel enerji ifadesinin gradyentinden elde edilir [40]:

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \left[\frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial F_i}{\partial \rho_j} \frac{\partial \rho_j}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right] \hat{r}_{ij} \quad (3.8)$$

NiAl alaşımlarının farklı kompozisyonları için atomlararası etkileşmeleri tanımlamak amacıyla çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Bunlardan en yenisi 2009 yılında Pun ve Mishin [46] tarafından tanımlanan EAM yaklaşımıdır ve NiAl alaşımlarının pek çok özelliğini deneylerle uyumlu olarak hesaplayabilmektedir.

3.2.1. Pun-Mishin gömülü atom yaklaşımı

NiAl alaşımasının atomik seviyede bilgisayar simülasyonlarının güvenle yapılabilmesi için Pun ve Mishin [46] tarafından geliştirilen ve parametreleri belirlenen EAM yaklaşımında ikili etkileşmeler, Ni ve Al için daha eski bir çalışmada olduğu gibi [64, 65]

$$\Phi(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) \left[\frac{V_0}{b_2-b_1} \left(\frac{b_2}{z^{b_1}} - \frac{b_1}{z^{b_2}} \right) + \delta \right] \quad (3.9)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada $z = r/r_1$ ve geri kalan b_1 , b_2 , V_0 , h ve δ değişkenleri potansiyel fonksiyonu parametreleridir. Potansiyel enerji fonksiyonundaki bu parametreler sistemin deneysel verilerine uygunluk sağlayacak şekilde elde edilmektedir. Elektron yük yoğunluğu ise

$$\rho(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) [A_0 z^\gamma e^{-\gamma z} (1 + B_0 e^{-\gamma z}) + C_0] \quad (3.10)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada da A_0 , B_0 , C_0 , r_c , h , γ ve γ değişkenleri fonksiyon parametreleri olarak bilinir.

Pun ve Mishin tarafından NiAl atomik etkileşmelerini tanımlamak için

$$\phi_{\text{NiAl}}(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) [a_1 e^{-b_1 r} \phi_{\text{NiNi}}(c_1(r-r_1)) + a_2 e^{-b_2 r} \phi_{\text{AlAl}}(c_2(r-r_2))] \quad (3.11)$$

şeklinde bir potansiyel kullanılmaktadır [46]. Burada $\psi(x)$ ile tanımlanan çarpan fonksiyon potansiyel kesme fonksiyonu olarak adlandırılmıştır ve

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{x^4}{1+x^4}, & x < 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

şeklinde hesaplanmaktadır. Bu fonksiyon potansiyelin r_c kesim uzaklığında yumuşak bir şekilde sıfıra düşmesini garanti etmektedir. Böylece a_1 , a_2 , b_1 , b_2 , c_1 , c_2 , r_1 , r_2 , r_c ve h olmak üzere toplam on adet fit parametresi bulunmaktadır. Bu parametrelerin belirlenmesi amacıyla alaşımanın B2 fazındaki deneysel örgü parametresi (a_0), düzenlenme enerjisi (E_f) ve elastik sabitleri (c_{ij}) kullanılmaktadır. Ni_nAl_m kompozisyonlu bir NiAl alaşımasının düzenlenme enerjisi

$$E_f = \frac{E_0(Ni_nAl_m) - nE_0(Ni) - mE_0(Al)}{n+m} \quad (3.13)$$

şeklinde hesaplanabilmektedir. Burada E_0 tek tek elementlerin veya alaşımanın kohesif enerjisini tanımlamaktadır [46]. Bu şekilde elde edilmiş potansiyel fonksiyonu kullanılarak Ni, Al ve NiAl alaşımına ait erime sıcaklıkları ve deneysel değerler ile karşılaştırılması Tablo 3.1 de verilmiştir.

Pun ve Mishin tarafından geliştirilen bu potansiyel fonksiyonunun NiAl alaşımının pek çok fazında oldukça iyi sonuçlar vermesinin yanı sıra çok fazla sayıda potansiyel parametresi bulunması, fonksiyonların analitik olarak hesaplanabilmesini zorlaştırmaktadır. Bu tür çok parametrelili fonksiyonların simülasyon çalışmalarında kolaylıkla kullanılabilmesi için $\Phi(r)$, $\rho(r)$ ve $F(\rho)$ fonksiyonlarının sayısal tablolarını hazırlamak ve tablo verilerinin profesyonel yazılmış programlarda veri olarak kullanılması büyük avantajlar sağlamaktadır. Bu nedenle, potansiyeli kuran araştırmacılar bu tabloları da üretmekte ve güvenilir internet sitelerinde kullanıcılara sunmaktadırlar. Bu potansiyel enerji fonksiyonunun tablolaştırılmış hali [66] referansıyla verilen internet sitesinden temin edilebilmektedir. Bu tez çalışmasında da tablolaştırılmış kuvvet alanı formu kullanılmıştır.

Tablo 3.1 Ni, Al ve NiAl alaşımının bazı fazları için deneysel ve hesaplanmış erime sıcaklıkları [46]. Değerler Kelvin birimindedir.

Faz	Ni	Ni ₃ Al	NiAl	Al
EAM (Mishin)	1701	1678	1780	1042
Deneysel	1728	1645	1911	933
Fark	1,6	1,9	6,8	11,7

3.3. Moleküler Dinamik Paket Programları

MD simülasyon çalışması yapabilmek için yukarıda bahsedilen MD algoritmalarından birisini ve çalışılacak sisteme uygun potansiyel enerji fonksiyonunun analitik formlarının herhangi bir bilgisayar programlama kodları ile kodlanması gerekmektedir. Bu işlem için Fortran, C/C++, Java gibi programlama dillerinin iyi derecede bilinmesi gereklidir. Ayrıca, yüksek hesaplama hızlara ihtiyaç duyuluyorsa bu durumda paralel hesaplama tekniklerinin de bilinmesi zorunlu olur. Bütün bunlara rağmen, internet ortamında ticari olmayan ve ticari olan MD simülasyon programları bulunmaktadır [35]. Bu paket yazılımlardan bazıları Tablo 3.2 de verilmiştir. Bu Tez çalışmasında Tablo 3.2 de verilen LAMMPS MD simülasyon kodları [36] kullanılmıştır. Ayrıca potansiyel

enerji fonksiyonu olarak da bir önceki bölümde tanımlanan Pun ve Mishin EAM fonksiyonları kullanılmıştır. LAMMPS kaynak kodları Linux (Ubuntu) işletim sistemi üzerinde derlenmiş ve hesaplamaların büyük bir bölümü ulusal hesaplama ağı olan TRGRID ağı [67] üzerinde gerçekleştirilmiştir. Sonuçların değerlendirilmesinde ise Intel i7 işlemcili kişisel bilgisayarlar kullanılmıştır.

Tablo 3.2 MD çalışmak için temin edilebilecek hazır paket programlar [35].

KOD İsmi	Kullanım Alanı	Lisans	Erişim
NAMD+VMD	Hızlı, Paralel MD, CUDA	Açık kaynak, Akademik kullanım	Beckman Institute
LAMMPS	Katıhal ve yumuşak malzemeler için potansiyel fonksiyonlarına sahip	Ücretsiz, açık kaynak kodlu. (GNU GPLv2)	Sandia
GROMACS	Yüksek Performanslı MD	Ücretsiz (GNU GPLv2)	gromacs.org
CP2K	Katıhal, sıvılar ve biyolojik sistemler için atomistik ve moleküler dinamik simülasyon yapabilir.	Ücretsiz (GNU GPLv2)	CP2K
CHARMM	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi.	Ticari	charmm.org
BOSS	OPLS	Ticari	Yale University
AMBER	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi.	Ticari	ambermd.org
ACEMD	CHARMM veya AMBER kuvvet alanlarını kullanarak MD simülasyonu yapar. Yüksek dereceden optimize edilmiş CUDA kullanarak NVIDIA GPU üzerinde çalışabilir.	Basit sürümü ücretsiz. Ticari sürümü bulunmaktadır.	Acellera Ltd
Abalone	Özellikle Biyomoleküler sistemlerin ve protein katlanımının çalışılmasına yöneliktir.	Ücretsiz	Agile Molecule

3.4. LAMMPS Paket Programı

LAMMPS paket programı 1990'ların ortalarında CRADA adı verilen Sandia ve LLNL laboratuvarları ile Cray, Bristol Myers Squibb ve Dupont şirketleri arasında yapılan bir araştırma ve geliştirme anlaşması sonucunda Steve Plimpton öncülüğünde yazılmaya başlanmıştır [35]. Temel amacı, büyük ölçekli paralel klasik moleküler dinamik kodu geliştirmektir. İlk başlarda Fortran-77 programlama dili kullanılarak yazılan LAMMPS

daha sonra F90 kodları ile yeniden düzenlenmiş ve günümüzde ise C++ sürümü ile ücretsiz ve açık kaynak kodlu olarak bilim insanlarına sunulmaktadır. Son yıllarda moleküler dinamik hesaplamalarında meydana gelen tüm gelişmeler takip edilerek bu koda eklenmiş ve böylece kodun güncel kalması sağlanmıştır. Açık kaynak kodlu olması sebebiyle, kodu kullanarak yenilikler sağlayan tüm kullanıcılar eklentilerini bir havuzda toplamakta ve kodun daha ileri taşınmasını sağlamaktadır.

LAMMPS kodlarını kullanarak yapılacak bir moleküler dinamik simülasyonu çalışmasında; potansiyel enerji fonksiyonunu, başlangıç atom konumlarını ve simülasyon parametrelerini tek bir giriş dosyasında tanımlamak yeterlidir. İsteğe bağlı olarak bu veriler farklı dosyalar kullanılarak da sağlanabilmektedir. Ayrıca, hangi niceliklerin hesaplanacağını ve hangi sonuç dosyalarının oluşturulacağını da kullanıcı belirleyebilmektedir. Bu kodları kullanarak milyonlarca parçacıklı sistemlerin moleküler dinamik simülasyonlarını yapmak mümkün olmaktadır. Literatürde, hem metal grubu problemlerin hem de biyo-sistemlerin LAMMPS kodları kullanılarak çalışıldığına rastlanmaktadır. Kodlar hem Linux hem de Microsoft işletim sistemlerinde problemsiz olarak kullanılabilir. Paralel işlemci kullanılabildiği için pek çok problemin çok hızlı olarak çözülebildiği gözlenmiştir. Paralel hesaplamalar için yaygın olarak kullanılan MPI kütüphanesi kullanılabileceği gibi OpenMP veya GPU (CUDA ve OpenCL) hızlandırıcı seçenekleri de değerlendirilebilir.

Özellikle EAM, MEAM, Stillinger-Weber, Tersoff ve ReaxFF gibi üst düzey ve karmaşık yapıya sahip potansiyel enerji fonksiyonlarının kolaylıkla kullanılabilmesi LAMMPS kodlarını diğerlerinden üstün hale getirmektedir. Ayrıca, program sonuçlarını analiz etmek için kullanılabilecek VMD [68] ve OVITO [69] gibi yardımcı programlar da bulunmaktadır. VMD ve OVITO sonuçların görsel hale getirilmesinde, animasyonların oluşturulmasında ve yapısal analizlerin yapılmasında oldukça yararlı olmaktadır. LAMMPS programının giriş dosyasında yaygın kullanılan komutların bazıları ve kullanım amaçları Tablo 3.3 de verilmiştir.

Tablo 3.3. Yaygın kullanılan bazı LAMMPS kodları ve kullanım amaçları [35].

units	Hesaplamalarda kullanılacak birim sisteminin tanımlanması
dimension	Hesaplamaların kaç boyutta gerçekleştirileceğinin tanımlanması
boundary	Periyodik sınır şartı uygulanacak doğrultuların belirlenmesi
lattice	Örgü modeli ve örgü sabiti değerlerinin programa verilmesi
read_data	Başlangıç atom koordinatları dosyasının tanımlanması
pair_style	Atomlararası etkileşmeler, potansiyel fonksiyonu tipinin seçimi
pair_coeff	Potansiyel fonksiyonu parametreleri ve etkileşme dosyasının tanımlanması
group	Belirli bir atom grubu tanımı
timestep	İntegrasyon için zaman adımı büyüklüğünün tanımlanması
velocity	Başlangıç atom hızlarının oluşturulması ve sıcaklık tanımı
compute	İstenilen niceliklerin hesaplatılması
thermo	Sonuçların yazdırılma sıklığının tanımlanması
dump	Atom koordinatlarını ve nicelikleri dosyaya yazdırma seçeneği
fix	MD parametrelerini tanımlama
run	İntegrasyon adım sayısının tanımlanması

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

4.1. Nano Yapılı Modellerin Oluşturulması

Tez çalışmasında kullanılmak üzere toplam 11 farklı nano tel, VORO++ kütüphanesini [70] kullanan açık kaynak kodlu LATGEN yazılımı [53] yardımıyla Linux (Ubuntu) işletim sisteminde üretilmiştir. Modellerin atom koordinatları *dosya.pos* dosyalarına kaydedilmiştir. Üretilen modellerin tamamında z eksen (çekme doğrultusu) 7,2 nm uzunluğunda ve sabit tutulmuştur. x ve y eksenleri ise her model için eşit tutularak 1,44 nm den başlanıp 4,32 nm değerine kadar artırılmıştır. Böylece, her model kare kesitli ve z ekseninde [001] yönelimli olacak şekilde üretilmiştir. Modellerin kare kesitli kenar ölçüleri ve uzunluk değerleri Tablo 4.1 de ve sahip oldukları atom sayıları Tablo 4.2 de verilmiştir. Tablo 4.2 de verilen Ni ve Al atom sayıları dikkate alındığında modellerin Ni-Al₃₀ olacak şekilde alaşımlandığı görülebilir. Bu kompozisyon bölgesi için NiAl alaşımı şekil hatırlama özelliği sergilemektedir [71].

Çekme testleri yapmak için, modellerin geometrik olarak alt kısmından yaklaşık %10 ve üst kısmından yaklaşık %10 luk bölümleri sabit katı bölgeler olarak alınmıştır. Arada kalan %80 lik bölge dinamik olarak esneyebilecek şekilde MD hesaplamalar yapılmıştır. Modellerin bu şekilde tanınlanması halinde alt, ara, üst ve sınır bölgeleri içinde kalan atom sayıları da yine Tablo 4.2 de verilmiştir.

Tablo 4.1. Modellerin ölçüleri, x ve y aynı değerlere sahip olup z eksen uzunluğu sabittir.

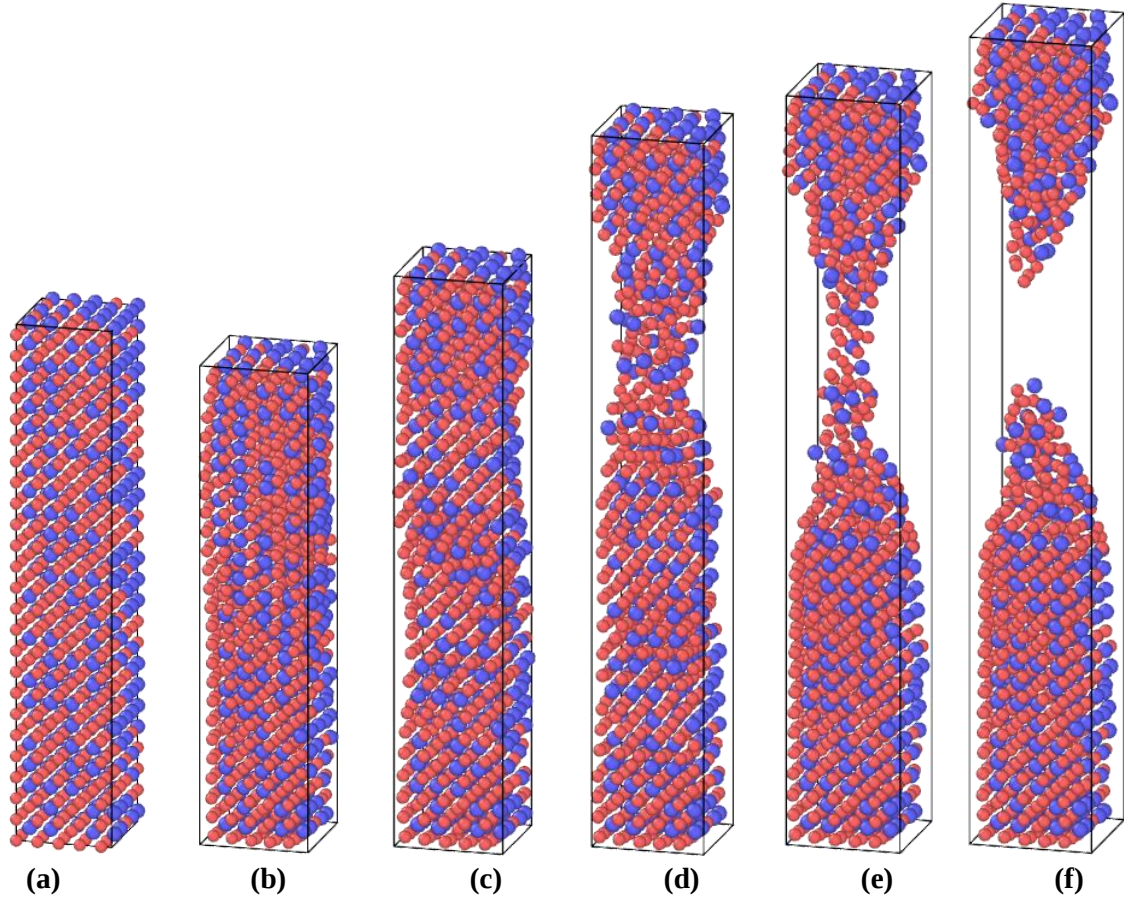
Model No	Örgü parametresi cinsinden ölçüler		Ölçüler (nm)	
	x x y	z	x ve y	z
t1	5 x 5	25	1,44	7,2
t2	6 x 6	25	1,73	7,2
t3	7 x 7	25	2,02	7,2
t4	8 x 8	25	2,30	7,2
t5	9 x 9	25	2,59	7,2
t6	10 x 10	25	2,88	7,2
t7	11 x 11	25	3,17	7,2
t8	12 x 12	25	3,46	7,2
t9	13 x 13	25	3,74	7,2
t10	14 x 14	25	4,03	7,2
t11	15 x 15	25	4,32	7,2

Tablo 4.2. Modellerin sahip olduđu atom sayıları.

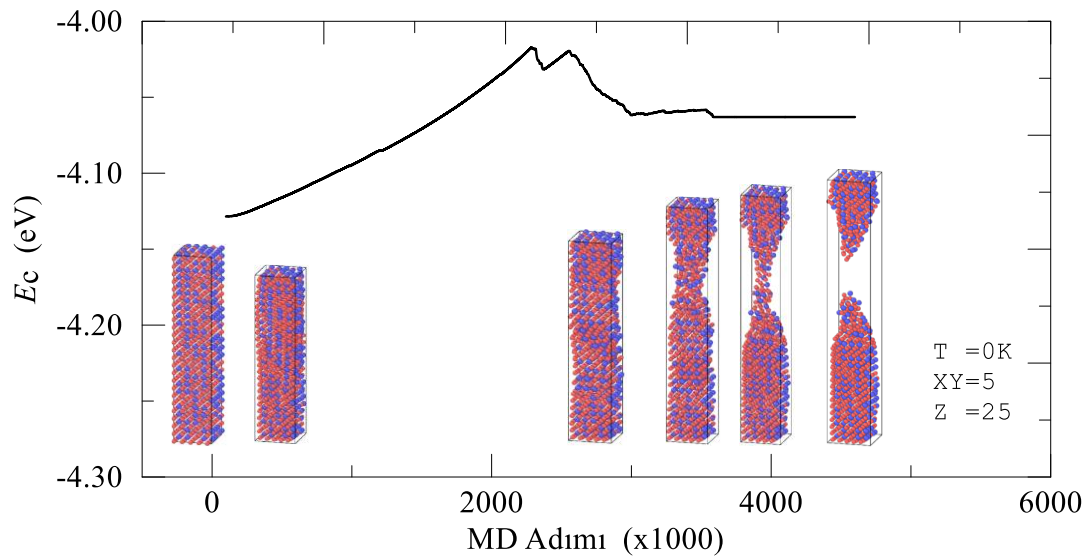
Model No	Üst Bölge Atomları	Ara Bölge Atomları	Alt Bölge Atomları	Sınır Bölge Atomları	Ni Atom Sayısı	Al Atom Sayısı	Toplam Atom Sayısı
t1	125	975	150	275	875	375	1250
t2	180	1404	216	396	1260	540	1800
t3	245	1911	294	539	1715	735	2450
t4	320	2496	384	704	2240	960	3200
t5	405	3159	486	891	2835	1215	4050
t6	500	3900	600	110	3500	1500	5000
t7	605	4719	726	1331	4235	1815	6050
t8	720	5616	864	1584	5040	2160	7200
t9	845	6591	1014	1859	5915	2535	8450
t10	980	7644	1176	2156	6860	2940	9800
t11	1125	8775	1350	2475	7875	3375	11250

Tipik bir MD çekme deneyinde nano çubuk davranışı Şekil 4.1 de verilmiştir (Tipik olarak verilen sonuçlar Model 1 (t1) den elde edilmiştir). Bu şekilde dinamik davranış öncesinde hazırlanmış ilk model nano tel, ilk dinamik davranışla birlikte başlangıç sıcaklığına uygun olacak şekilde termal dengeye yerleşmiştir (Şekil 4.1a). Bu dengelenme sonrasında tel boyunda %10 a yakın bir kısalma gözlenmektedir. Daha sonra çekme sürecinin başlamasıyla birlikte boyca bir uzama görülmekte ve bu uzama nano tel kopuncaya kadar devam etmektedir (Şekil 4.1c-f). Yapılan bütün çekme deneyleri bu tipik davranışı sergilemekte olup, elastik ve plastik davranışları ile kopma süreçlerinde, modele, sıcaklığa ve çekme hızına bağlı olarak çeşitli farklılıklar gözlenmektedir. Çekme deneylerinde kullanılan LAMMPS giriş dosyasının bir örneği Ek-1 de sunulmuştur. Tipik çalışmadan elde edilen MD adımına (zamana) karşı kohesif enerji değişimi Şekil 4.2 de, yüzde zorlanma değerine karşı kohesif enerji değişimi Şekil 4.3 de ve zor-zorlanma davranışı Şekil 4.4 de verilmiştir.

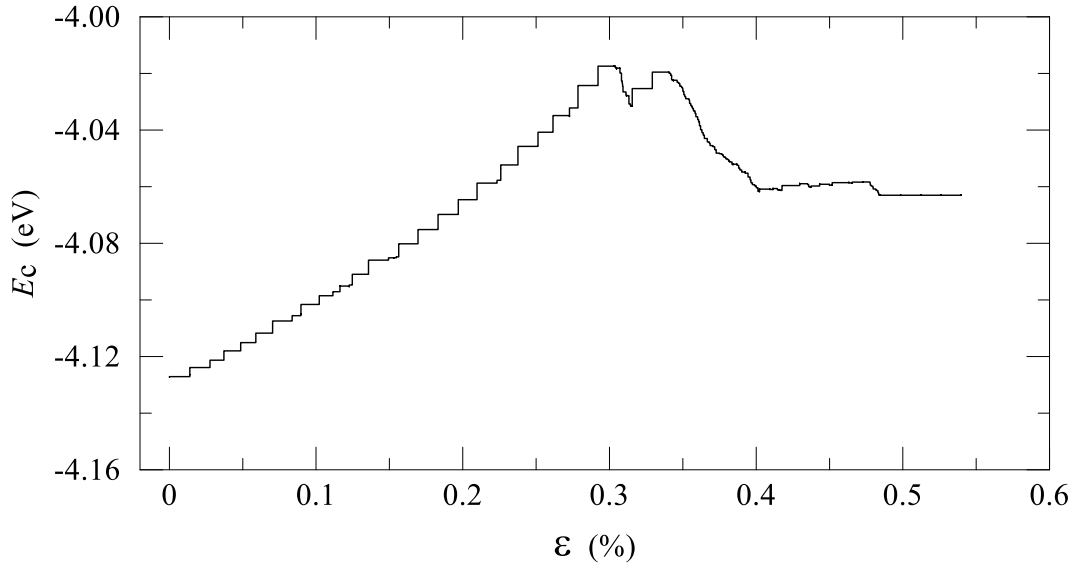
Üretilen modellerin OVITO programı kullanılarak taban kesitlerinden alınan görüntüleri Şekil 4.5 de verilmiştir.



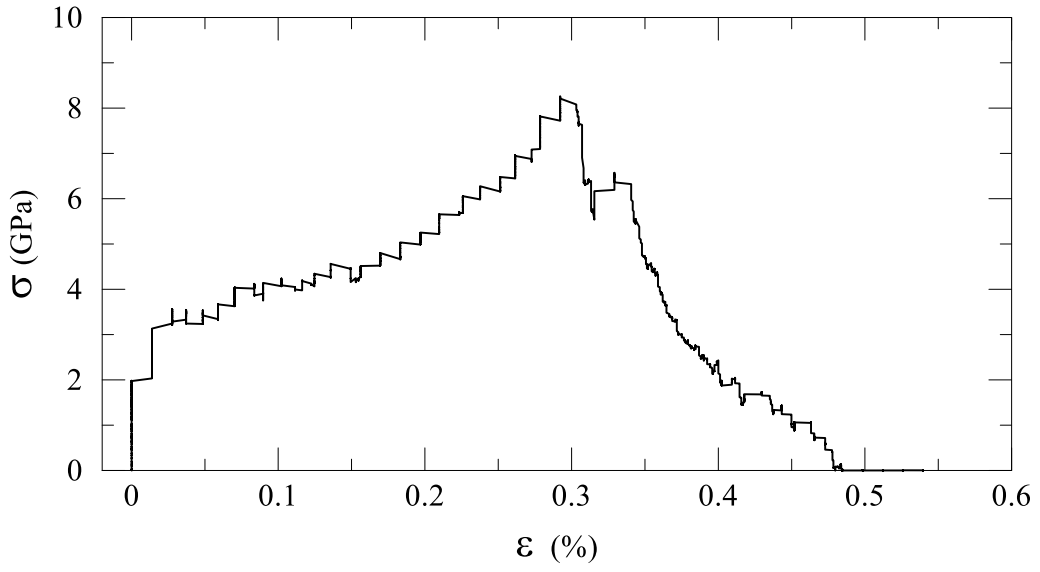
Şekil 4.1. Tipik bir MD çekme deneyinde nano tel davranışı. Kırmızı küreler Ni atomlarını ve mavi küreler Al atomlarını temsil etmektedir. a) Başlangıç yapı, b) termal dengedeki yapı, c) - f) çekme sonucu yapılarıdır.



Şekil 4.2. Tipik bir MD çekme deneyinde MD adımına karşı kohesif enerji değişimi.

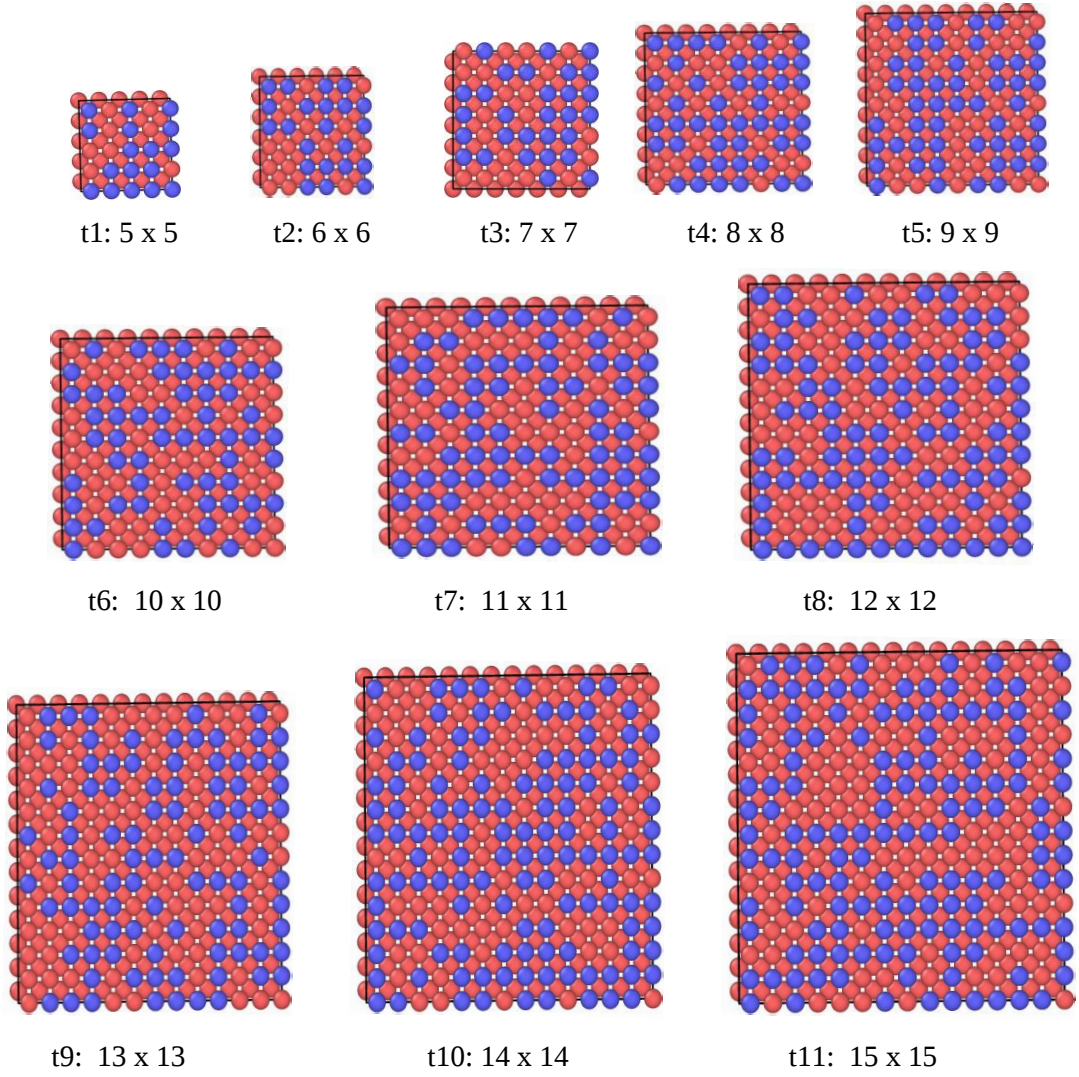


Şekil 4.3. Tipik bir MD çekme deneyinde yüzde zorlanmaya karşı kohesif enerji değişimi.



Şekil 4.4. Tipik bir MD çekme deneyinde zor-zorlanma değişimi.

Tüm modeller üzerinde yapılan çalışmalar; sıcaklığın etkisi, kalınlığın etkisi ve çekme hızının etkisi olarak üç gruba ayrılarak verilmiş ve tartışılmıştır.



Şekil 4.5. Modellerin taban kesitlerinden görünüşleri. Ölçüler birim hücre sayısı cinsindendir. Kırmızılar Ni, maviler Al atomlarını temsil etmektedir.

4.2. LAMMPS MD Çalışmaları

Tüm model sistemlerin teorik germe deneyleri, Ek-1 de verilen tipik giriş dosyasının LAMMPS programına giriş dosyası olarak yüklenmesiyle gerçekleştirilmiştir. Ek-1 de verilen giriş dosyasındaki ilk dört satırda tanımlanan simülasyon parametrelerinde herhangi bir değişiklik yapılmamıştır. Böylece, tüm modeller için; birimler ‘*metal*’ birim sisteminde, 3 boyutta hesaplama, sadece z doğrultuda periyodik sınır şartlarının tanımlandığı ve ‘*atomic*’ atom sitilinin tanımlandığı bir simülasyon çalışması yapılmıştır. Örgü modelinin tanımlandığı 5. ve 6. komut satırlarında örgü tipi BCC ve örgü parametresi 2,88 Å olarak, atom konumları için LATGEN programı ile elde edilen dosya yolu

(Ni70Al_XY5Z25.pos) tanımlanmıştır. Her model sistemin çalışılmasında yeni bir atom konum dosyası tanımlanarak model yapılar değiştirilmiştir. 7. ve 8. komut satırlarında atomlararası etkileşme tipi ve kuvvet alanı verilerinin bulunduğu dosya yolu tanımlanmıştır. Her model sistem aynı atomik etkileşmelere sahip olarak kabul edildiğinden bu komutlarda değişiklik yapılmamıştır. Simülasyon hesaplama kutusundaki Ni ve Al atomları, üst ve alt sabit tabaka atomları ve ara bölge atomları ayrı gruplar olarak tanımlanmış ve bu gruplar üzerinden çeşitli termodinamik ve yapısal hesaplamaların yapılabilmesine imkan sağlanmıştır. Çalışmaların tamamında integrasyon zaman adımı büyüklüğü '*timestep*' 0,001 (1 fs) değerinde alınmış (25. komut satırı) ve atomların başlangıç hızları 0,01 K sıcaklığına uygun alınarak (26. komut satırı), her model sistem için önce 100000 (100 ps) adımlık bir NVT simülasyonu yapılmıştır (39. komut satırından 49. komut satırına kadar olan bölge). Böylece, her model sistemin germe deneyi öncesinde termodinamik olarak dengelenmesi ve başlangıç şartları için minimum enerjili yapısını kazanması sağlanmıştır.

Termodinamik olarak dengelenen her model sistem için tipik giriş dosyasındaki 51. komut satırında bulunan üst sabit atom bölgesinin hızlarının z bileşeni değiştirilerek modellerin germe hızına bağlı davranışlarının gözlenmesi sağlanmıştır. Sıcaklığa bağlı davranışların incelenmesinde ise 56. komut satırında bulunan '*temp*' değerleri değiştirilmiştir. Bu çalışmalar sırasında sınırlarda bulunan atom grubuna NVE simülasyonu uygulanmıştır. Her bir model için uygulanan simülasyon süresi, çekme hızına bağlı olarak kopmanın gözlenebileceği kadar uzun tutulmuş ve 58. komut satırında bulunan run komutu yardımıyla ayarlanmıştır. En uzun çalışma süresi 6000000 integrasyon adımından oluşmaktadır.

Çekme işlemi tamamlanan her model için son olarak 50000 (50 ps) integrasyon adımı fazladan çalışılarak sistemin son kararlı yapısının elde edilmesi.

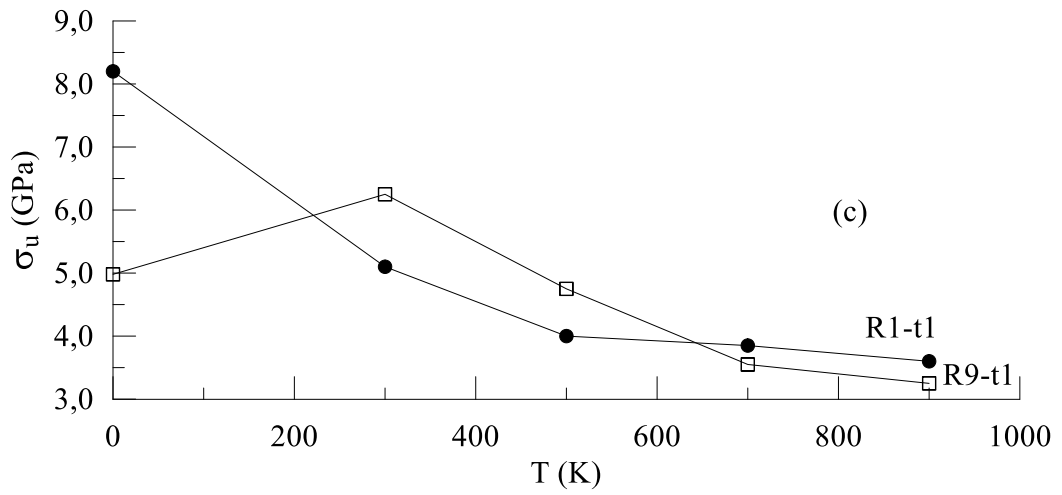
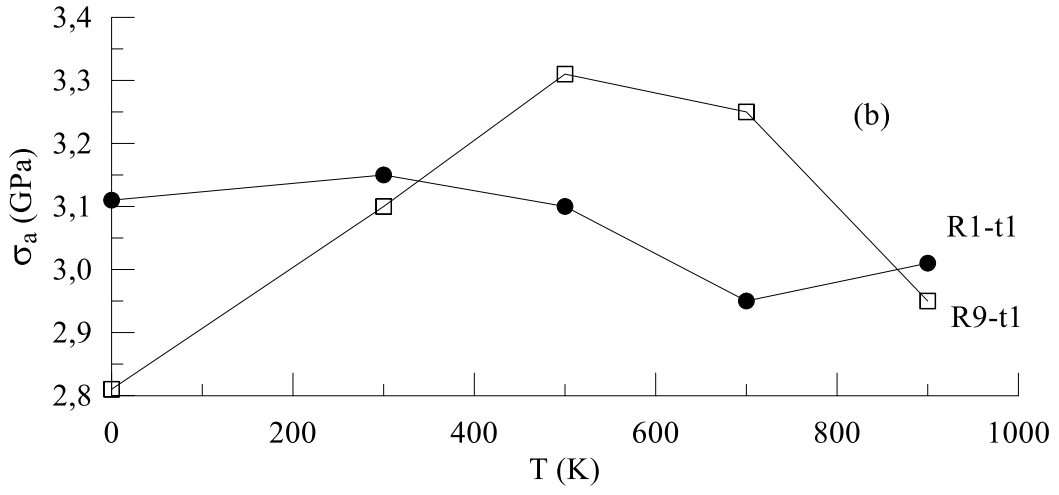
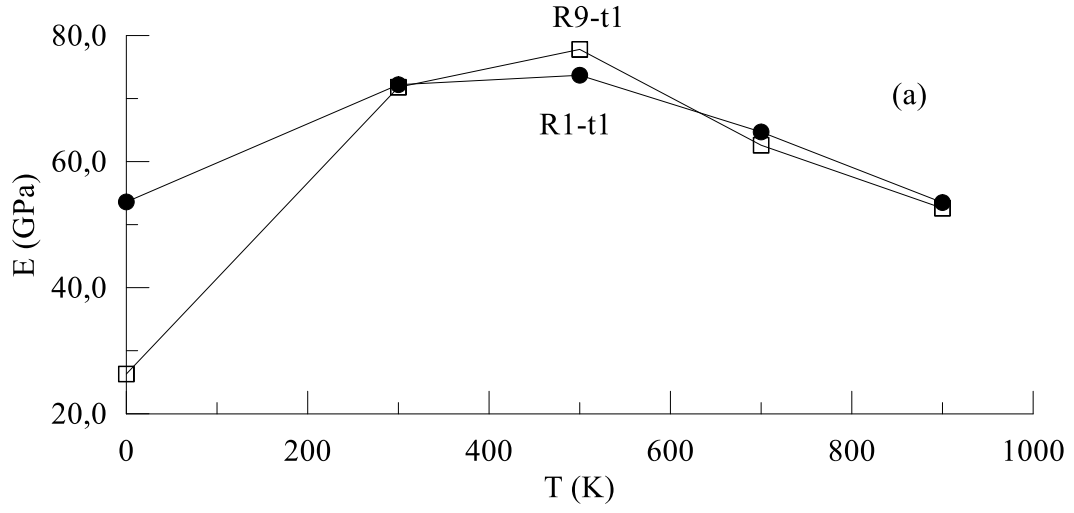
Her model sisteme 0,01 K ve 300 K sıcaklığında 1 m/s – 10 m/s (R1 – R10) aralığında çekme hızı uygulanmıştır. Ancak 500 K, 700 K ve 900 K sıcaklıklarındaki çalışmalar sadece 1 m/s ve 10 m/s çekme hızlarında yapılmıştır.

Çalışmaların gerçek hesaplama süreleri oldukça uzun olduğundan, model sistemlerin z eksenindeki yönelimlerine bağlı, z eksen uzunluğuna bağlı ve alaşım kompozisyonuna bağlı zor-zorlanma davranışları incelenmemiştir. Bu çalışmalar ileri çalışmalar olarak gelecekte yapılmak üzere bırakılmıştır. Yapılan çalışmaların kontrol listesi Ek-2 de sunulmuştur.

4.3. Sıcaklığın Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi

t1 numunesi için Young modülünün sıcaklığa bağlı değişimleri R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.6a da verilmiştir. Bu şekilden R1 hızında çekilen t1 numunesinin Young modülü değeri 0K sıcaklığı için yaklaşık 52 GPa iken 300 ile 500 K sıcaklık aralığında 70 GPa seviyesine çıkmış, ancak sıcaklığın daha da artırılarak 900 K e yükseltilmesi halinde Young modülü tekrar 50 GPa seviyelerine düşmüştür (R1-t1 eğrisi). Çekme hızının R9 a yükseltilmesi halinde aynı numune için Young modülü 28 GPa (0K) değerinden 75 GPa (500K) değerine çıkmıştır. Sıcaklığın 900 K e yükseltilmesi halinde R9 hızıyla çekilen t1 numunesinde ise Young modülü tekrar azalarak 50 GPa seviyelerine gerilemiştir. Burada R9-t1 eğrisinden de görüldüğü gibi yüksek hızla çekilen numunenin Young modülünün tekrar başlangıç seviyesine dönmediği ve 0 K ile 900 K sıcaklıkları arasında 22 GPa lık bir fark olduğu gözlenmiştir. Böylece, 300 K den düşük sıcaklıklarda çekme hızının Young modülü üzerinde önemli bir etkisinin olduğu, ancak yüksek sıcaklıklarda bu etkinin kaybolduğu anlaşılmıştır. Bu sonuç, düşük sıcaklıklarda yüksek hızlarla çekilen numunelerde boyca artışın daha fazla olacağını göstermektedir.

t1 numunesi için akma zorunun sıcaklığa bağlı değişimleri R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.6b de verilmiştir. Bu şekilden R1 hızında çekilen t1 numunesi akma zoru yaklaşık 3,1 GPa iken 3,0 GPa değerine sıcaklığın 0 K den 900 K e yükselmesiyle düşmüştür. Burada akma zoru değişimin 0,1 GPa kadar olduğu görülmektedir. Düşük hızlarda akma zoru değişimi sıcaklığın artmasıyla çok fazla değişmemiş ve aynı seviyelerde kalmıştır. R9 hızında çekilen t1 numunesi için akma zoru sıcaklığın 0 K -500 K arasında bulunması halinde 2,8 GPa ile 3,3 GPa arasında bir değişim gösterdiğini, daha sonra sıcaklığın 500 K den 900 K e çıkmasıyla 3,3 GPa dan 2,95 GPa değerine gerilediği görülmektedir. Bu değişimin 0 K – 500 K sıcaklık aralığında arttığı söylenebilir. 500 K den yüksek sıcaklıklarda ise akma zoru 3,3 GPa seviyelerinden 2,95 GPa seviyelerine yaklaşmıştır. Bu durum; yüksek çekme hızlarında 0 K - 500 K sıcaklık değerlerine kadar akma zorunda artma sonra tekrar bir düşüş ifade etmektedir. Bunun sebebi olarak termal genleşme, yapı kusurları, malzemede oluşan kaymalar gösterilebilir.



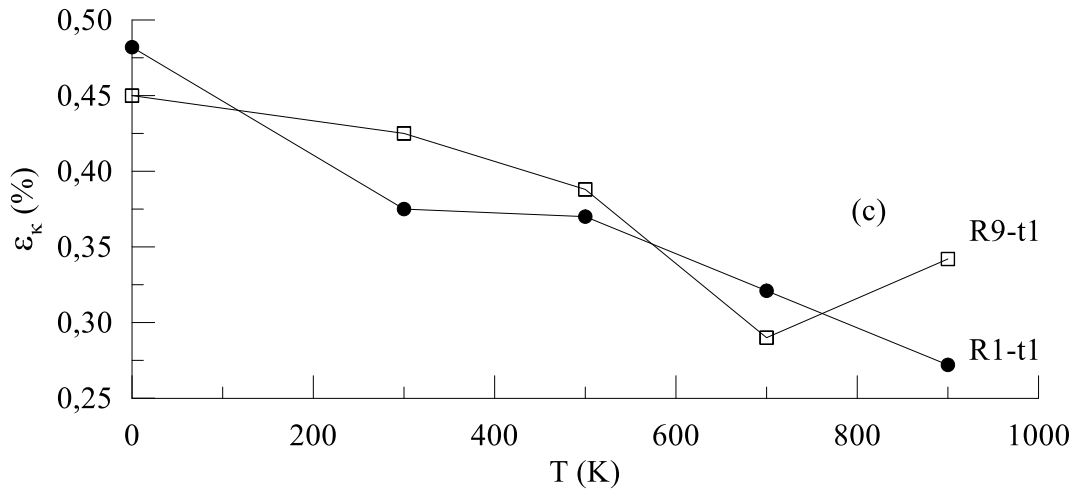
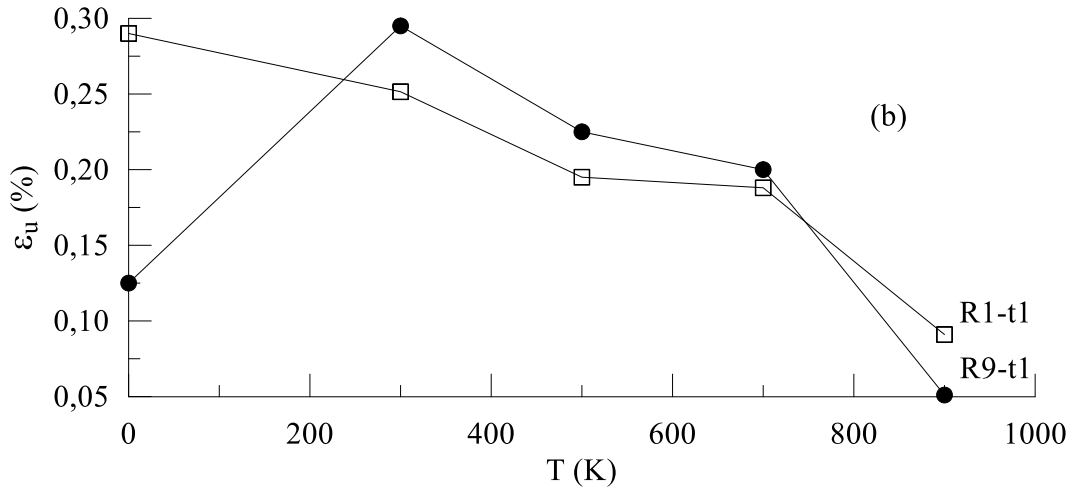
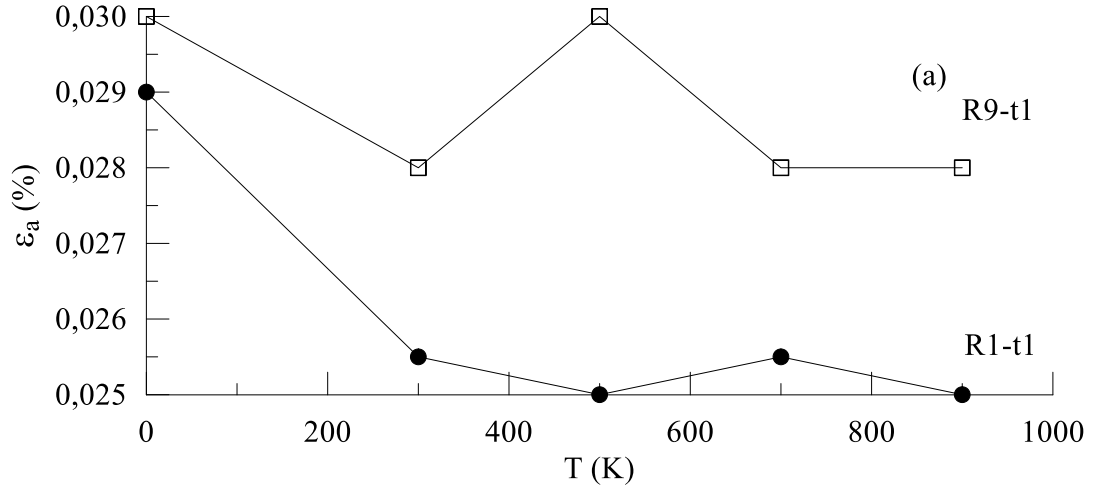
Şekil 4.6. t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında **(a)** Young Modulünün, **(b)** Akma zorunun ve **(c)** Nihai Gerilme zorunun – Sıcaklığa bağlı değişimleri.

t1 numunesi için nihai gerilme zorunun sıcaklığa bağlı değişimleri R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.6c de verilmiştir. R1 çekme hızıyla çekilen t1 numunesi sıcaklığın artmasıyla (0 K – 900 K) nihai gerilme zoru 8,1 GPa seviyelerinden 3,9 GPa seviyesine kadar gerilemiştir. Nihai gerilme zorunun sıcaklık değişimiyle ters orantılı olduğu ve üstel olarak azaldığı görülmüştür. Sıcaklığın artmasıyla numunenin plastik davranış gösteren bölgesinde bir daralama gözlemlendiğini söyleyebiliriz. R9 çekme hızıyla çekilen t1 numunesi 300 K sıcaklığına kadar nihai gerilme zoru değeri 5,0 GPa dan 6,4 GPa seviyelerine çıktığı ama sonraki sıcaklık değerlerinde tekrar azalarak 3,2 GPa a kadar gerilediği gözlemlenmiştir.

t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.7a da Akma zorlanması– Sıcaklığa bağlı değişimleri. Akma zorlanması değerleri %0.004 lerdeki değişimler anlamlı bulunmamıştır. Akma zoru değişimleri daha önemli bulunmuştur.

t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.7b de Nihai Gerilme zorlanması – Sıcaklığa bağlı değişimleri. R1 çekme hızıyla çekilen t1 numunesi; nihai gerime zoru-sıcaklık grafiğinde görüldüğü gibi plastik davranış gösteren bölgede sıcaklığın artmasıyla bir daralama gözlemlenmiştir diyebiliriz. R9 hızındaki davranışta nihai gerime zoru-sıcaklık grafiğinde oluşan durumla benzerdir.

t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında Şekil 4.7c de Kopma değeri – Sıcaklığa bağlı değişimleri. R1 ve R9 hızlarında çekilen t1 numunesinin kopma değerleri sıcaklığın artmasına bağlı olarak küçülmüştür. Yani sıcaklık arttıkça daha çok uzamadan kopmuştur.



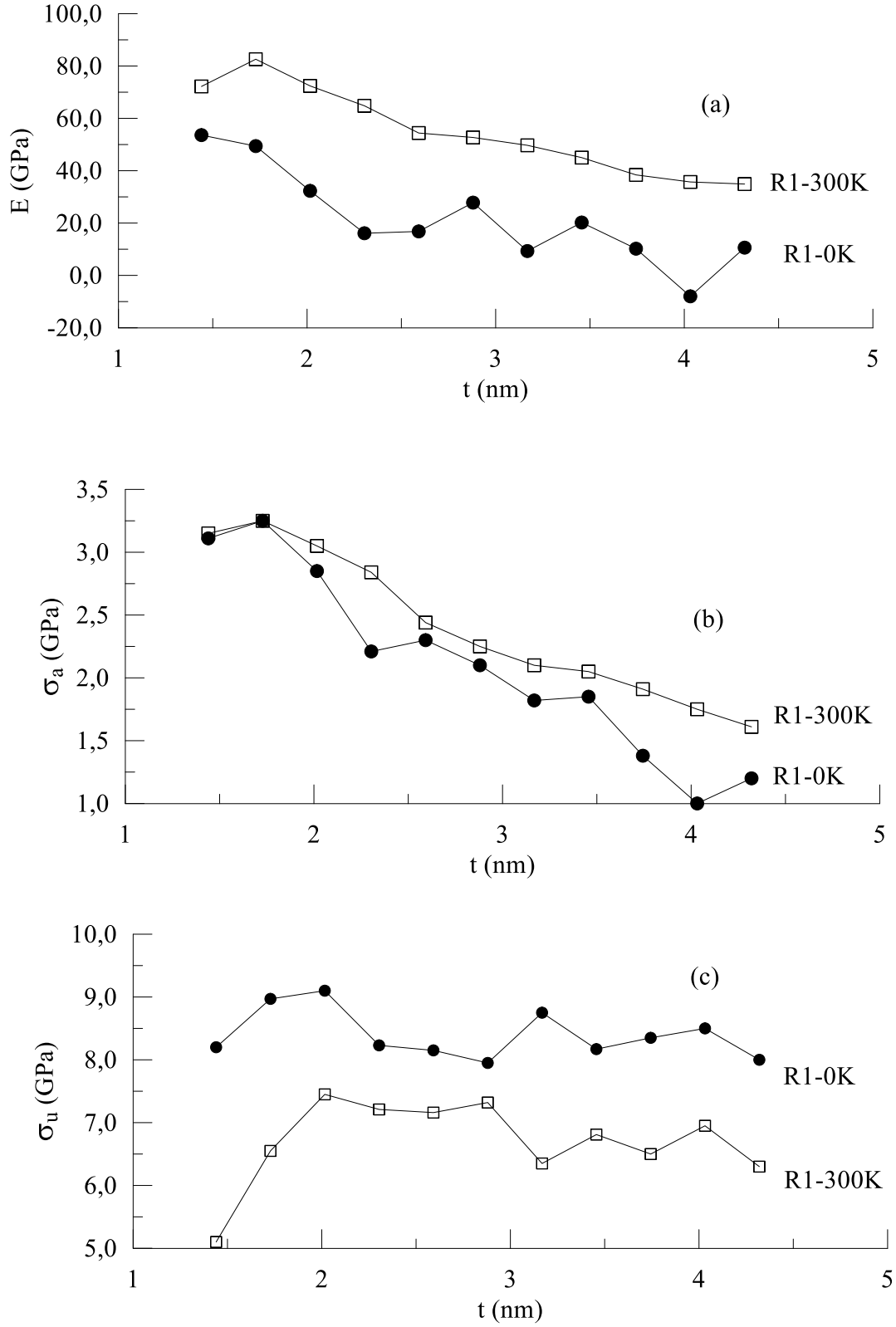
Şekil 4.7. t1 numuneleri için, R1 ve R9 çekme hızlarında **(a)** Akma zorlanması, **(b)** Nihai Gerilme zorlanması ve **(c)** Kopma değeri – Sıcaklığa bağlı değişimleri.

4.4. Kalınlığın Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi

R1 çekme hızı için Young modülünün kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıklarında Şekil 4.8a verilmiştir. Bu şekilden 0 K sıcaklığında bulunan ve R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin Young modülü değeri, kalınlığın artmasıyla 52 GPa iken yaklaşık 11 GPa seviyesine gerilemiştir. Young modülünün kalınlığın artışıyla ters orantılı olarak değiştiği gözlenmektedir. R1 çekme hızında sıcaklığın 300 K e çıkmasıyla, 71 GPa olan Young modülü değeri 31 GPa değerine gerilemiştir. Bu iki durumda Young modülü ile numune kalınlığı arasında ters orantı olduğu gözlenmiştir. Young modülünün azalması zorlanmanın zordan büyük olduğunu gösterir. Buradan, numune ne kadar kalınlaşırsa dayanıklılığın o kadar arttığı söylenebilir. Numune kalınlığının artması numune içinde zor ile oluşacak ikizlenme miktarının da artmasına neden olacaktır. Numune içinde meydana gelecek deformasyon ikizleri numune esnekliğini azaltıp sertliği artırmaktadır. Yalnız R1 çekme hızında sıcaklık değerleri 300 K den büyük değerlere ulaştıkça Young modülünün değişim farkı da azalmaktadır. Bu durum sıcaklığın artmasıyla dayanıklılığın azaldığını gösterir.

R1 çekme hızı için akma zorunun kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıklarında Şekil 4.8b de verilmiştir. Bu şekilden 0 K sıcaklığında bulunan ve R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin akma zoru değeri 3,1 GPa dan 1,25 GPa değerine gerilemiştir. Sıcaklığın 300 K olduğu ve R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin akma zoru değerleri 3,1 GPa iken 1,55 GPa seviyelerine gerilemiştir. Akma zoru değerindeki azalış, numunenin elastik davranış bölgesinin daraldığını ve numunenin kalıcı deformasyon bölgesine geçişinin daha erken ve kolay olacağını göstermektedir.

R1 çekme hızı için nihai gerilme zorunun kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıklarında Şekil 4.8c de verilmiştir. Bu şekilden 0 K sıcaklığında bulunan ve R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin nihai gerilme zoru, 8,0 GPa dan başlayıp tekrar yaklaşık 8,0 GPa gibi bir aralıkta kalmıştır. Sıcaklık 300 K değerine çıktığında ise nihai gerilme zoru 5,0 GPa değerinden 6,5 GPa değerleri arasındadır. Kalınlığın artmasıyla nihai gerilme zoru önemli miktarda değişim göstermemektedir.

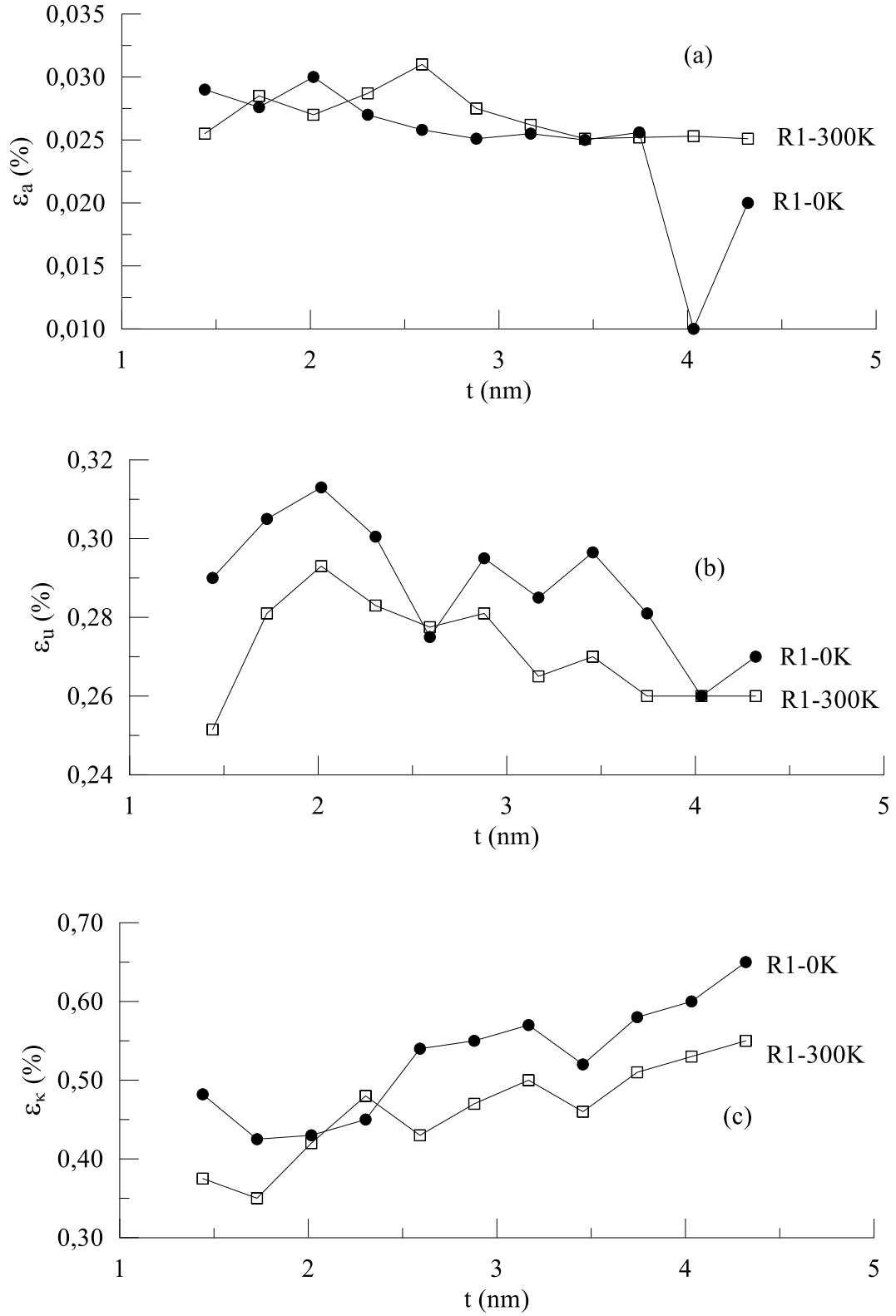


Şekil 4.8. R1 çekme hızları için, 0K ve 300K sıcaklıklarında **(a)** Young modülünün, **(b)** Akma zorunun ve **(c)** Nihai Gerilme zorunun – Kalınlığa bağlı değişimleri.

R1 çekme hızı için akma zorlanmasının kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıklarında Şekil 4.9a da verilmiştir. Bu şekilden R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin akma zorlanması değerleri 0 K ve 300 K sıcaklık değerlerinde kalınlığın artmasıyla birlikte akma zorlanması değeri %0,03 ile %0,025 değerleri aralığında kalmıştır. Bu değerlerden anlaşılıyor ki numunenin geçici deformasyon bölgesinden kalıcı deformasyon bölgesine geçişi, akma zoru değerindeki değişimi daha önemli kılıyor.

R1 çekme hızı için nihai gerilme zorlanmasının kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıklarında Şekil 4.9b da verilmiştir. Bu şekilden R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin nihai gerilme zorlanması değerleri 0 K sıcaklık değerinde %0,29 dan %0,27 lere gerilemiştir. 300 K sıcaklık değerinde ise; %0,25 ile %0,26 değerleri arasında değişmiştir. Burada her iki sıcaklık değerinde 3. numune değerine kadar bir artış gözleniyor ama 3. numuneden sonra tekrar bir azalma söz konusudur. Kalınlığın artması, R1 çekme hızının sabit kalmasıyla nihai gerilme zorunun 3. numuneden sonra azalmasına sebep olmuştur.

R1 çekme hızında kopma zorlanmasının kalınlığa bağlı değişimleri 0 K ve 300 K sıcaklıkları için Şekil 4.9c de verilmiştir. 0 K ve 300 K sıcaklıklarında R1 çekme hızıyla çekilen numunelerin kalınlıklarının artmasıyla kopma değerlerinin büyüdüğü ve kopmanın geciktiği gözlenmiştir. Sıcaklık değeri 0 K değerinde iken kopma değerleri daha büyüktür, ama 300 K de ise biraz daha düşüktür. Yani sıcaklık artışı kopma noktasını daha küçük değerlere getirdiği görülmektedir. Kopma değeri sıcaklık artışıyla ters orantılıdır.



Şekil 4.9. R1 çekme hızları için, 0K ve 300K sıcaklıklarında **(a)** Akma zorlanması, **(b)** Nihai Gerilme zorlanması ve **(c)** Kopma değeri – Kalınlığa bağlı değişimleri.

4.5 Çekme hızının Zor-Zorlanma Davranışı Üzerine Etkisi

0 K sıcaklığında t1 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10a da verilmiştir. 0 K sıcaklığında t1 numunesinde, Young modülü 4. çekme hızına kadar artış göstermiştir. Sonra 10. çekme hızına kadar ise üstel bir azalma söz konusudur. Bu grafikte çekme hızı artışı numune üzerindeki zorlanmayı arttırdığını söyleyebiliriz bundan dolayı zor/zorlanma olan Young modülü çekme hızı arttıkça azalmıştır.

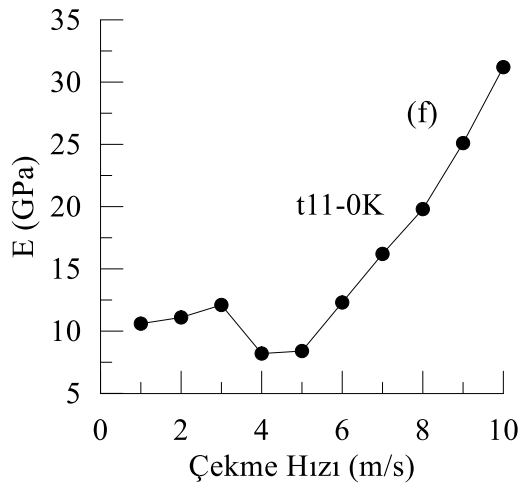
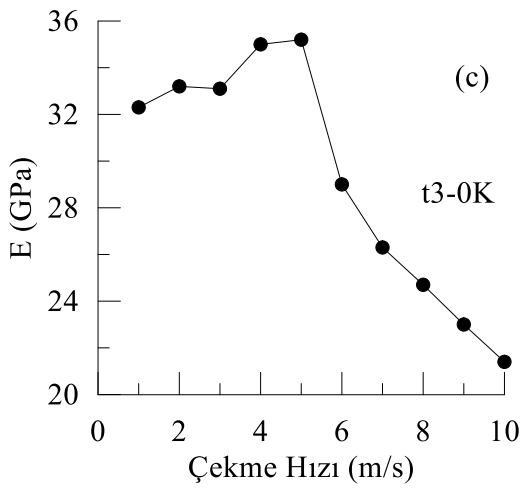
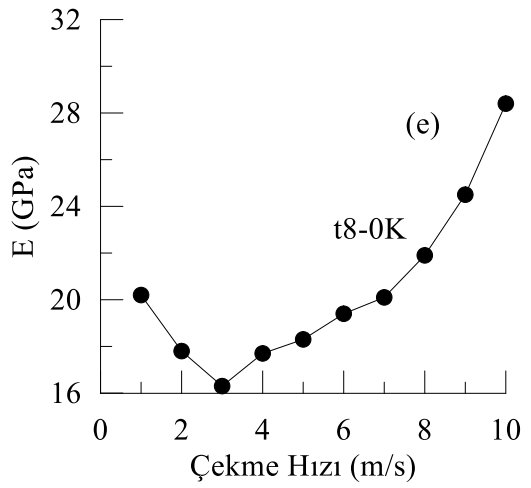
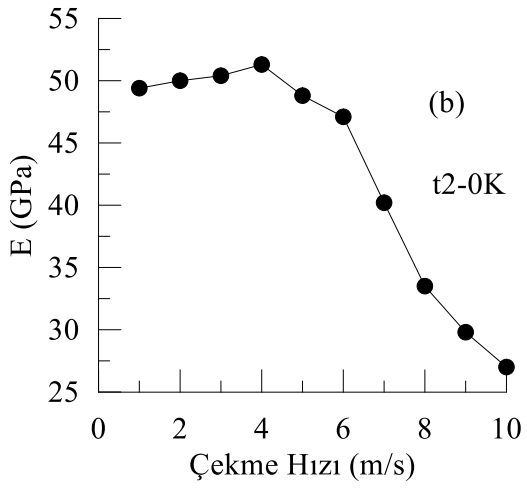
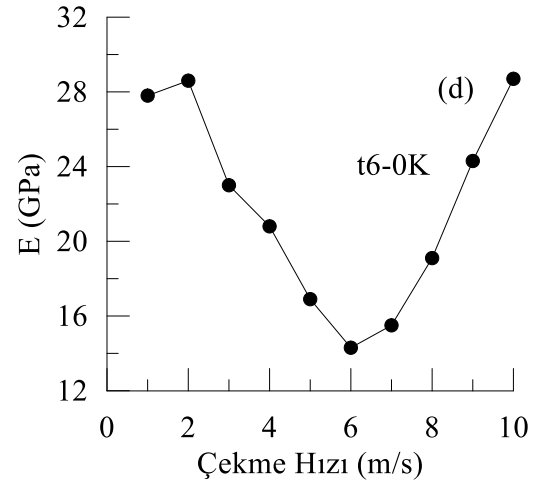
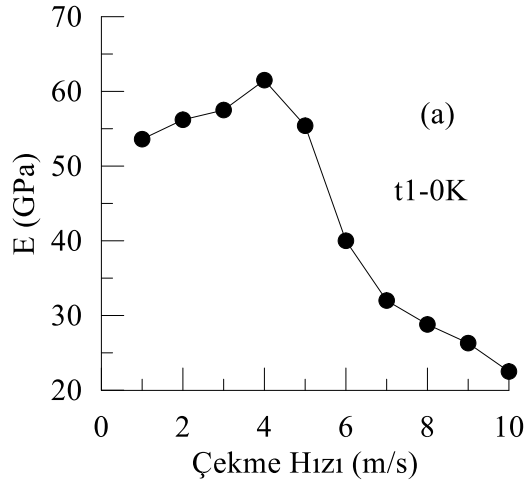
0 K sıcaklığında t2 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10b de verilmiştir. 0 K sıcaklığında t2 numunesinde Young modülündeki değişim t1 numunesine benzer bir şekilde değişim göstermiştir. Sadece 4. çekme hızındaki yükseliş biraz düşmüştür. Young modülü değerleri de sayısal değer olarak yaklaşık aynı değerlerde değişmiştir.

0 K sıcaklığında t3 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10c de verilmiştir. 0 K sıcaklığında t3 numunesinde Young modülü 5. çekme hızına kadar 32 GPa ile 36 GPa değerine kadar artış göstermiştir. 5. çekme hızından sonra ise 21 GPa seviyelerine kadar gerileyen Young modülü değeri gözlenmiştir. Kalınlığın ve çekme hızının birlikte artışı Young modülünü 50 GPa başlangıç değerinden 30 GPa değerlerine getirmiştir.

0 K sıcaklığında t6 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10d de verilmiştir. 0 K sıcaklığında t6 numunesinde 6. çekme hızına kadar 28 GPa değerinden 14 GPa değerine kadar azaldığı görülmüştür. Bu durum diğer üç kalınlıkta oluşan durumla aynı durumdur. Ama 6. çekme hızından 10. çekme hızına kadar ise 14 GPa değerinden 28 GPa değerine tekrar arttırmıştır. Bu durumda da zor/zorlanma olan Young modülü değerinin arttığını söyleyebiliriz. Kalınlığın büyümesi numunede atomik düzeydeki kuvvet dengesizliğinin zorlanmayı azalttığını, bu etkininde Young modülünü arttırmıştır diyebiliriz.

0 K sıcaklığında t8 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10e de verilmiştir. 0 K sıcaklığında t8 numunesinde t6 numunesinde oluşan durumu 2.çekme hızında daha belirgin hale getirip, 2. çekme hızından sonra 16 GPa dan 28 GPa değerine çıkarmıştır.

0 K sıcaklığında t11 numunesinin Young modülünün çekme hızına bağlı değişimi Şekil 4.10f de verilmiştir. 0 K sıcaklığında t11 numunesi de t8 numunesine benzer bir durum oluşmuştur.



Şekil 4.10. 0 K sıcaklığında, (a) t1 , (b) t2, (c) t3, (d) t6, (e) t8, (f) t11, kalınlığında, Young Modülü - çekme hızına bağlı değişimleri.

5. KAYNAKLAR

- [1] **Uldrich, J., Newberry, D.**, 2005, *Nano Teknoloji-Sıradaki Küçük Şey Aslında Çok Büyük*, Çeviri: Tolga Alıcı, Ledo Yayınları 5, 1. Baskı.
- [2] **Gates, T.S., Odegard, G.M., Frankland, S.J.V., Clancy, T.C.**, 2005, Computational materials: Multi-scale modeling and simulation of nanostructured materials, *Composites Science and Technology*, 65(15-16), 2416- 243.
- [3] **Liu, H. B., Perez, R., Canizal, G., Ascencio, J. A.**, 2002, Stability and phase transition of sodium nanoclusters, *Surface Sci.*, 518, 14-20.
- [4] **Sonğur, L.**, Nano Yapılı Amorf Metallerin Durum Denklemlerinin Moleküler Dinamik Yöntemi İle Belirlenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 2007.
- [5] **Landman, U. and Luedtke, W.D.**, 2004, Small is different: energetic, structural, thermal and mechanical properties of passivated nanocluster assemblies, *Faraday Discuss*, 125, 1-22.
- [6] **Kayır, Y.Z. ve G. Baççıl, E.**, 2010, Nano teknoloji nedir?, 15. Uluslararası Metalurji ve Malzeme Kongresi, 11-13 Kasım 2010, İstanbul.
- [7] **Golovnev, I.F., Golovneva, E.I., Fomin, V.M.**, 2006, The influence of a nanocrystal size on the results of molecular-dynamics modeling, *Comp. Matter. Sci.*, 36, 176-179.
- [8] **Dresselhaus, M.S., Lin, Y.M., Rabin, O., Black, M.R., Kong, J., Dresselhaus, G.**, 2010, Nanowires: in *Springer Handbook of Nano-technology*, Ed.: B. Bhushan, 3rd Edition, Springer-Verlag. New York.
- [9] **Wolf, E.L.**, 2004, *Nanophysics and Nanotechnology*, WILEY-VCH Verlag GmbH &Co. KGaA, Weinheim
- [10] **Smith, W.F.**, 1996, *Principles of Materials Science and Engineering*, McGraw-Hill Inc., New York, USA.
- [11] **Savaşkan, T.**, 2004, *Malzeme Bilgisi ve Muayenesi*, Akademi Ltd. Şti. Yayınları, No:15, Trabzon.
- [12] **Nouailhat, A.**, 2008. *An Introduction to Nanoscience and Nanotechnology*, ISTE Ltd and John Wiley & Sons, Inc. Britain and the United States.
- [13] **Ramesh, K.T.**, 2009. *Nanomaterials Mechanics and Mechanisms*, The Johns Hopkins University Baltimore, USA.
- [14] **Deng, X., Joseph, V.R., Mai w., Wang Z.L., and Jeff Wu C. F.**, 2009, Statistical approach to quantifying the elastic deformation of nanomaterials, *Pnas* , 29, 11845–11850.
- [15] **Zhu, Y., Xu, F., Qin,Q., Fung, W. Y., and Lu, W.**, 2009, Mechanical Properties of Vapor-Liquid-Solid Synthesized Silicon Nanowires, *Nanoletters*, 11, 3934-3939.
- [16] **Wood, E.L., Avant, T., Kim, G.S., Lee, S.K., Burchman, Z., Hughes, J.M., Sansoz, F.**, 2014 , Size effects in bimetallic nickel–gold nanowires: Insight from atomic force microscopy nanoindentation, *Acta Materialia*, 66, 32–43.

- [17] **Kobler, A., Beuth, T., Klöffel, T., Prang, R., Moosmann, M., Scherer, T., Walheim, S., Hahn, H., Kübel, C., Meyer, B., Schimme, T. and Bitzek, B.,** Nanotwinned silver nanowires: Structure and mechanical properties, *Acta Materialia*, 92, 299–308.
- [18] **Park, H.S. and Klein, P.A.,** Surface stress effects on the resonant properties of metal nanowires: The importance of finite deformation kinematics and the impact of the residual surface stress, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56, 3144–3166
- [19] **Xu, F., Qin, Q., Mishra, A., Gu, Y., and Zhu, Y.,** Mechanical Properties of ZnO Nanowires Under Different Loading Modes, *Nano Res*, 3, 271–280.
- [20] **Li, H. and Sun, F.,** 2012, Recent Advances in Mechanical Properties of Nanowires, Intech, <http://dx.doi.org/10.5772/52592>
- [21] **Bruus, H.,** 2004, Introduction to nanotechnology, MIC – Department of Micro and Nanotechnology Technical University of Denmark, Denmark.
- [22] **Gogotsi, Y.,** 2006, *Nanomaterials handbook*, Taylor & Francis Group, London New York.
- [23] **McDowell, M.T., Leach, A. M., and Gall, K.,** 2008, Bending and tensile deformation of metallic nanowires, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 16, 045003 (13pp)
- [24] **Sansoz, F. and Deng, C.,** 2012, Size-Dependent Plasticity in Twinned Metal Nanowires, ICF12, Ottawa 2009.
- [25] **Bhatt, J. C., and Kholiya, K.,** 2014, Effect of size on the elastic and thermodynamic properties of nanomaterials, *Indian Journal of Pure & Applied Physics*, 52, 604-608.
- [26] **Kunz, A., Pathak, S., and Greer, J. R.,** 2011, Size effects in Al nanopillars: Single crystalline vs. bicrystalline, *Acta Materialia*, 59, 4416–4424.
- [27] **Tim Wübber, DFG.,** 2013, *Nanomaterials*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim
- [28] **Liu, Wei-Ting, Hsiao, Chun-I., Hsu, Wen-Dung.,** 2014, Role of surface on the size-dependent mechanical properties of copper nano-wire under tensile load: A molecular dynamics simulation, *Applied Surface Science*, 289, 47– 52.
- [29] **Zhu, T., and Gao, H.,** 2012, Plastic deformation mechanism in nanotwinned metals: An insight from molecular dynamics and mechanistic modeling, *Scripta Materialia*, 66, 843–848
- [30] **Li, Xian-Fang, Zhang, H., Lee, K. Y.,** 2014, Dependence of Young's modulus of nanowires on surface effect, *International Journal of Mechanical Sciences*, 81, 120–125
- [31] **Haile, J. M.,** 1992, *Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods*, John Wiley & Sons, Inc., Kanada.
- [32] **Rapaport, D.C.,** 2004, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press.

- [33] **Özgen, S.**, 1997, Sayısal hesaplama yöntemlerinin şekil hatırlamalı alaşımlarda difüzyonsuz dönüşümlere uygulanması, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [34] **Sun, D. Y., and Gong, X.G.**, 2002, A new constant-pressure molecular dynamics method for finite systems, *J. Phys. Condens Matter*, 14, L487-L493.
- [35] https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_software_for_molecular_mechanics_modeling, 28 Haziran, 2015.
- [36] <http://lammps.sandia.gov/>: 28 Haziran, 2015.
- [37] <http://www.gromacs.org/>: 28 Haziran, 2015.
- [38] <http://imd.itap.physik.uni-stuttgart.de/>: 28 Haziran, 2015.
- [39] <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>: 28 Haziran, 2015.
- [40] **Daw, S.M., Baskes, M.I.**, 1984, Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals, *Physical Review B*, 29, 6443- 6453.
- [41] **Finnis, M.W. and Sinclair, J.E.**, 1984, A Simple empirical N-body potential for transition metals, *Philos. Mag., A*, 50(1), 45-55.
- [42] **Johnson, R.A.**, 1988, Analytic nearest-neighbor model for fcc metals, *Phys. Rev. B*, 37, 3924.
- [43] **Voter, A.F. and Chen, S.P.**, 1987, Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni3Al, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Eds.: Siegel, R. W., Weertman, J. R., and Sinclair, R., MRS-82,175-180.
- [44] **Sutton, A.P., Chen, J.**, 1990, Long-range Finnis-Sinclair potentials, *Philos. Mag. Lett.*,61, 139-146.
- [45] **Mishin, Y., Mehl, M. J., Papaconstantopoulos, D. A., Voter, A. F. and Kress, J. D.**, 2001, Structural stability and lattice defects in copper: *Ab initio*, tight-binding, and embedded-atom calculations, *Physical Rev. B*, 63, 224106.
- [46] **PurjaPan, G.P., and Mishin, Y.**, 2009, Development of an interatomic potential for the Ni-Al system, *Philosophical Magazine*, 34-36, 3245–3267
- [47] **Yang, Z., Lu, Z., Zhao, Y.P.**, 2009, Atomistic simulation on size-dependent yield strength and defects evolution of metal nanowires, *Computational Materials Science*, 46, 142-150.
- [48] **Baskes, M.I.**, 1992, Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities, *Phys. Rev. B* 46, 2727.
- [49] **Cagin T., Che, J., Qi, Y., Zhou, Y., Demiralp, E., Gao, G., and Goddard III, W. A.**, 1999, Computational Materials Chemistry at the Nanoscale, *Journal of Nanoparticle Research*, 1, 51–69.
- [50] **Hocker, S., Schmauder, S. and Kumar, P.**, 2011, Molecular dynamics simulations of Ni/NiAl interfaces, *Eur. Phys. J. B* 82, 133–141.

- [51] **Ludwig, M. and Gumbsch, P.**, 1995, An empirical interatomic potential for B2 NiAl, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 3 533.
- [52] **Zhan, H.F., Gu, Y.T.**, 2012, Theoretical and numerical investigation of bending properties of Cu nanowires, *Computational Materials Science*, 55, 73-80.
- [53] <https://code.google.com/p/latgen/>: 5 Temmuz 2014.
- [54] **Giovanni, P.**, 2015, Top-down fabrication of silicon nanowire devices for thermoelectric applications: properties and perspectives, *Eur. Phys. J. B*, 88: 121
- [55] **Goswami, R. and Chattopadhyay, K.**, 2004, Melting of Nanoparticle embedded in a Zn matrix, *Acta Materialia*, 52 (19) ,5503–5510.
- [56] **Nanda K.K.**, 2009, Size-dependent melting of nanoparticles: Hundred years of thermodynamic model, *Pramana - J Phys.*, 72 (4) , 617-628.
- [57] **Diao, J., Gall, K., Dunn, M.L.** 2004, Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires, *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, 1935-1962.
- [58] **Ma, Liang-Cai., Zhang, Jian-Min., Xu, Ke-Wei.**, 2013, Structural and electronic properties of ultrathin copper nanowires: A density-functional theory study, *Physica B*, 410,105–111
- [59] **Alavi, A., Mirabbaszadeh, K., Nayebi, P., and Zaminpayma, E.**, 2010, Molecular dynamics simulation of mechanical properties of Ni–Al nanowires, *Computational Materials Science*, 50, 10–14
- [60] **Guo, J., Wen, B., Melnik, R., Yao, S., and Li, T.**, 2011, Molecular dynamics study on diamond nanowires mechanical properties: Strain rate, temperature and size dependent effects, *Diamond & Related Materials*, 20, 551–555
- [61] **Pan, Z., Li, Y., and Wei, Q.**, 2008, Tensile properties of nanocrystalline tantalum from molecular dynamics simulations, *Acta Materialia*, 56, 3470–3480
- [62] **Wen, Yu-Hua., Zhu, Zi-Zhong., and Zhu, Ru-Zeng.**, 2008, Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects, *Computational Materials Science*, 41, 553–560
- [63] **Wu, H.A.**, 2006, Molecular dynamics study of the mechanics of metal nanowires at finite temperature, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 25, 370–377
- [64] **Mishin, Y., and Farkas, D.**, 1999, Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations, 5, 3393-3407.
- [65] **Mishin, Y.**, 2004, Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni–Al system, *Acta Materialia* ,52, 1451–1467.
- [66] <http://www.ctcms.nist.gov/potentials/> : 5 Haziran 2015.
- [67] <http://www.grid.org.tr/> : 5 Haziran 2015.
- [68] <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/> : 5 Haziran 2015.
- [69] <http://www.ovito.org/index.php> : 5 Haziran 2015.
- [70] <http://math.lbl.gov/voro++/> : 5 Haziran 2015.
- [71] **Miracle, D. B., and Darolia, R.**, 2000, NiAl and its Alloys, *Structural Applications of Intermetallic Compounds*, John Wiley & Sons Ltd., 55-74.

EK - 1 Tipik Bir LAMMPS Giriş Dosyası

Simülasyon çalışmalarında kullanılan örnek bir LAMMPS giriş dosyası. Model sistemlerin başlangıç atom konumları 6. komut satırında, kuvvet alanı verileri dosyası 8. komut satırında, atomların başlangıç hızları 26. komut satırında, integrasyon zaman adımı büyüklüğü 25. komut satırında, sistem dengeleme sıcaklığı 39. komut satırında, dengeleme çalışma süresi 49. komut satırında, model çalışma sıcaklığı 56. komut satırında, çekme hesaplama süresi 58. komut satırında tanımlanmaktadır.

****** Simülasyon Temel Parametrelerinin Kurulumu*

```
001  units      metal
002  dimension  3
003  boundary   s s p      ! z doğrultusunda periyodiklik var.
004  atom_style atomic
```

*# *** Örgü Modelinin Kurulması*

```
005  lattice    bcc 2.88
006  read_data  Ni70Al_XY5Z25.pos
```

*# *** Kuvvet Alanının Tanımlanması*

```
007  pair_style eam/alloy
008  pair_coeff * * Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy Ni Al
```

*# *** Örgü İçi Grupların ve Hesaplama Değişkenlerinin Tanımlanması*

```
009  group      Ni type 1
010  group      Al type 2

011  variable   L equal 72.0
012  variable   dz equal 7.20

013  variable   z1 equal 0.0
014  variable   z2 equal ${dz}
015  region     Lower block INF INF INF INF ${z1} ${z2} units box
016  group      Lower region Lower

017  variable   z1 equal ${L}-${dz}
018  variable   z2 equal ${L}
019  region     Upper block INF INF INF INF ${z1} ${z2} units box
020  group      Upper region Upper

021  group      boundary union Lower Upper
022  group      middle_atoms subtract all boundary

023  neighbor    2.0 bin
024  neigh_modify delay 2
025  timestep    0.001
```

```

026 velocity    all create 0.01 511124 rot yes mom yes

# *** Çeşitli Nicelikleri Hesaplama Komutları

027 Compute     peatom all pe/atom
028 compute     per all reduce sum c_peatom
029 variable    Ecoh equal c_per/atoms

030 compute     peratom all stress/atom NULL pair virial

031 compute     fz all reduce sum c_peratom[1] c_peratom[2]
                                c_peratom[3] c_peratom[4] c_peratom[5] c_peratom[6]
032 compute     p  all reduce sum c_peratom[1] c_peratom[2]
                                c_peratom[3]

# *** Stres Tensörünün Tanımı ve Hesaplanması

033 variable    sigmavolume equal c_fz[3]/vol

# *** Zorlanma Değişkeninin Tanımlanması

034 variable    strain equal (lz-v_L)/v_L

# *** Çeşitli Termodinamikleri Hesaplama Komutu

035 variable    press equal -(c_p[1]+c_p[2]+c_p[3])/(3*vol)

036 thermo      100
037 thermo_style custom step v_EcoH lz vol v_strain v_sigmavolume
                                temp etotal press v_press
038 dump        id all atom 5000 dump_NiAl.strain.gz

# *** NVT Topluluğu için Hesaplama .

039 fix         relax all nvt temp 0.01 0.01 .01
040 timestep    0.001

041 compute     RDF all rdf 500 1 1 1 2 2 2
042 fix         10 all ave/time 1 10000 10000 c_RDF file rdf.out
                                mode vector

043 compute     msd_Ni Ni msd com yes
044 compute     msd_Al Al msd com yes
045 compute     msd_ma middle_atoms msd com yes

046 fix         msdNi Ni ave/time 1 1000 1000 c_msd_Ni[1]
                                c_msd_Ni[2] c_msd_Ni[3] c_msd_Ni[4] file msd_Ni.out
047 fix         msdAl Al ave/time 1 1000 1000 c_msd_Al[1]
                                c_msd_Al[2] c_msd_Al[3] c_msd_Al[4] file
msd_Al.out
048 fix         msdma middle_atoms ave/time 1 1000 1000 c_msd_ma[1]
                                c_msd_ma[2] c_msd_ma[3] c_msd_ma[4] file msd_ma.out

# *** Termodinamik Dengeleme işleminin Yapılması

049 run         100000
050 unfix      relax

```

```

# *** Alt Tabaka Atomlarını Sabitle, Üst Tabaka Atomlarını Sabit
#      Hızla Yukarıya Doğru Çek - Germe İşlemini Yap

051 variable    upper_vel equal 0.01  ! Ang/ps birimlidir.
052 fix        zeroing_force_on_lower Lower setforce 0.0 0.0 0.0
053 fix        zeroing_force_on_upper Upper setforce 0.0 0.0 0.0
054 velocity   Lower set 0.0 0.0 0.0          units box
055 velocity   Upper set 0.0 0.0 ${upper_vel} units box

056 fix        fix1 middle_atoms nvt temp 0.01 0.01 0.01
057 fix        fix2 boundary nve

058 run        6000000

# *** Germe İşlemini Tamamla ve Bir Süre Daha Sabit Şartlarda
#      Dengeleme Yap

059 velocity   Upper set 0 0 0
060 run        50000

# *** Simülasyonu Tamamla

061 print " ***** SIMULASYON TAMAMLANDI ***** "

```

EK-2. Yapılan Çalışmalara Ait Kontrol Listeleri

T=0.01 K

Z= 25

Yönelim : z-001

Model no	XY	Çekme Hızı									
		0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10
1	5	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2	6	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
3	7	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4	8	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
5	9	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
6	10	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
7	11	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
8	12	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
9	13	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
10	14	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
11	15	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X

T=300 K

Z= 25

Yönelim : z-001

Model no	XY	Çekme Hızı									
		0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10
1	5	X		X		X		X		X	
2	6	X		X		X		X		X	
3	7	X		X		X		X		X	
4	8	X		X		X		X		X	
5	9	X		X		X		X		X	
6	10	X		X		X		X		X	
7	11	X		X		X		X		X	
8	12	X		X		X		X		X	
9	13	X		X		X		X		X	
10	14	X		X		X		X		X	
11	15	X		X		X		X		X	

T=500 K

Z= 25

Yönelim : z-001

		Çekme Hızı									
Model no	XY	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10
1	5	X								X	
2	6	X								X	
3	7	X								X	
4	8	X								X	
5	9	X								X	
6	10	X								X	
7	11	X								X	
8	12	X								X	
9	13	X								X	
10	14	X								X	
11	15	X								X	

T=700 K

Z= 25

Yönelim : z-001

		Çekme Hızı									
Model no	XY	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10
1	5	X								X	
2	6	X								X	
3	7	X								X	
4	8	X								X	
5	9	X								X	
6	10	X								X	
7	11	X								X	
8	12	X								X	
9	13	X								X	
10	14	X								X	
11	15	X								X	

T=900 K

Z= 25

Yönelim : z-001

		Çekme Hızı									
Model no	XY	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10
1	5	X								X	
2	6	X								X	
3	7	X								X	
4	8	X								X	
5	9	X								X	
6	10	X								X	
7	11	X								X	
8	12	X								X	
9	13	X								X	
10	14	X								X	
11	15	X								X	

ÖZGEÇMİŞ

HAMDULLAH KUŞÇA

Fırat Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Bölümü
23119, ELAZIĞ

Tel: 0 (538) 4246671
e-mail: kusca_hamdullah@hotmail.com
kusca.hamdullah@gmail.com
hamdullah.kusca@dogakoleji.com

Kişisel Bilgiler :

Doğum Tarihi : 25.07.1988
Doğum Yeri : DİYARBAKIR/HANİ
Uyruğu : T.C.
Medeni Hali : EVLİ

Eğitim :

İlköğretim : 1994-2002 Hürriyet ilköğretim okulu, Bağlar/Diyarbakır

Lise : 2002-2005 Namık Kemal Lisesi, Bağlar/Diyarbakır

Lisans : 2008-2012 Fırat Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik
Bölümü, Elazığ.