



**T.C.
BATMAN ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI**

DOKTORA TEZİ

**TEK KRİSTALLİ BAKIR, SİLİSYUM VE Al-Si, Cu-Ni ALAŞIM
MALZEMELERİNDE NANOİNDENTASYON UYGULAMALARI
VE ETKİLERİNİN İNCELENMESİ**

İsmail AK

**Mayıs-2025
BATMAN**

**T.C.
BATMAN ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI**

DOKTORA TEZİ

**TEK KRİSTALLİ BAKIR, SİLİSYUM VE Al-Si, Cu-Ni ALAŞIM
MALZEMELERİNDE NANOİNDENTASYON UYGULAMALARI
VE ETKİLERİNİN İNCELENMESİ**

İsmail AK

**Danışman
Prof. Dr. Hamit ADİN**

Diğer Jüri Yeleri

**Prof. Dr. Şemsettin TEMİZ Prof. Dr. Mustafa OKUMUŞ
Doç. Dr. Ertan KÖSEDAĞ Doç. Dr. Tolga TOPKAYA**

**Mayıs-2025
BATMAN**

TEZ KABUL VE ONAYI

İsmail AK tarafından hazırlanan “TEK KRİSTALLİ BAKIR, SİLİSYUM VE AL-Sİ, CU-Nİ ALAŞIM MALZEMELERİNDE NANOİNDENTASYON UYGULAMALARI VE ETKİLERİNİN İNCELENMESİ” adlı tez çalışması 22/05/2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Batman Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı’nda DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Başkan

Prof. Dr. Şemsettin TEMİZ

Danışman

Prof. Dr. Hamit ADİN

Üye

Prof. Dr. Mustafa OKUMUŞ

Üye

Doç. Dr. Ertan KÖSEDAĞ

Üye

Doç. Dr. Tolga TOPKAYA

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Dr. Öğr. Üyesi Ömer Murat ÖTER
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYANI

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını beyan eder, aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal sorumluluğu kabullendiğimi bildiririm.

ETHICAL DECLARATION

I declare that all the information in this thesis has been obtained within the framework of ethical behavior and academic rules, and that the source of any statements and information that do not belong to me in this study prepared in accordance with the thesis writing rules has been fully cited, and I declare that I accept all kinds of legal responsibility in case of any contrary situation.

İmza
İsmail AK
Tarih: 22.05.2025

ÖZET

DOKTORA TEZİ

TEK KRİSTALLİ BAKIR, SİLİSYUM VE Al-Si, Cu-Ni ALAŞIM MALZEMELERİNDE NANOİNDENTASYON UYGULAMALARI VE ETKİLERİNİN İNCELENMESİ

İsmail AK

Batman Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Makine Mühendisliği Ana Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Hamit ADİN

2025, 184 Sayfa

Günümüzde teknolojinin hızla gelişmesi, cihazların mikro ve nano ölçeklerde tasarlanıp üretilmesini mümkün kılmıştır. Bu nedenle, malzemelerin mikro ve nano düzeyde karakterizasyonu büyük önem taşımaktadır. Bu çalışmada, döküm yöntemiyle üretilen Cu-Ni ve Al-Si alaşımları ile Cu[100] ve Si[100] tek kristallerinin sertlik, elastisite modülü ve yüzey deformasyonu gibi mekanik özelliklerini incelemek amacıyla nanoindentasyon testleri ve moleküler dinamik (MD) simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Nanoindentasyon deneyleri, Berkovich tipi uçlar kullanılarak 5000 μN ve 10000 μN yükler altında nano test cihazlarıyla uygulanmıştır. MD simülasyonlarında ise girinti hızı 500 m/s olarak belirlenmiştir. Döküm yöntemiyle elde edilen Cu-Ni alaşımlarına yönelik nanoindentasyon testleri, elastisite modülünün 101,89 GPa ile 139,27 GPa arasında değiştiğini ortaya koymuştur. Buna karşılık, MD simülasyonlarında bu değerlerin 126,30 GPa ile 186,34 GPa aralığında olduğu gözlemlenmiştir. Girinti izinin en derin olduğu örnek tek kristalli Cu[100] metali iken, en sık girinti Cu-%10Ni alaşımında kaydedilmiştir. Al-Si alaşımlarında ise silisyum içeriğinin artmasıyla girinti yer değiştirmelerinin arttığı, uygulanan kuvvetlerin azaldığı ve dislokasyon yoğunluğunun düştüğü belirlenmiştir. Ayrıca, daha büyük tane boyutlarına sahip Cu-%10Ni alaşımının 2,40 GPa sertlik değerine sahip olduğu, buna karşın daha küçük taneli Cu-%20Ni alaşımında bu değer 3,90 GPa'ya yükseldiği hesaplanmıştır. Al-Si alaşımlarında silisyumun heterojen dağılımı ile Mg, Fe ve Ag gibi elementlerin varlığı, pop-in ve pop-out davranışlarını etkileyerek mekanik özelliklerde farklılıklara neden olmuştur. Ancak Al-%20Si alaşımında kalıcı dislokasyon oluşumu gözlemlenmemiştir. Elde edilen deneysel bulgular ile MD simülasyon sonuçları birbiriyle uyumlu bulunmuş; MD simülasyonlarının gerçek zamanlı atomik ölçekli deformasyonları analiz etmede uygulanabilir ve güvenilir olduğu doğrulanmıştır. Bu bağlamda, MD simülasyonlarının metal alaşımlarında elastisite modülü ve sertlik gibi mekanik özelliklerin belirlenmesinde hızlı ve düşük maliyetli bir yöntem olduğu sonucuna varılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Mikroyapısal Analiz, Nanoindentasyon, Sertlik, Elastisite Modülü, MD simülasyon, Lammgs, Dislokasyon

ABSTRACT
DOCTORAL THESIS
TEZ BAŞLIĞININ İNGİLİZCESİNİ BURAYA YAZINIZ

İsmail AK

Batman University Graduate Education Institute

Mechanical Engineering Department of Science

Advisor: Prof. Dr. Hamit ADİN

2025, 184 Pages

Nowadays, rapid developments in technology have made it possible to design and manufacture devices at micro and nano scales. Therefore, characterization of materials at micro and nano levels is of great importance. In this study, nanoindentation tests and molecular dynamics (MD) simulations were carried out in order to investigate the mechanical properties such as hardness, elastic modulus and surface deformation of Cu-Ni and Al-Si alloys and Cu[100] and Si[100] single crystals produced by casting method. Nanoindentation experiments were applied with nano test devices under 5000 μN and 10000 μN loads using Berkovich type tips. Indentation speed was determined as 500 m/s in MD simulations. Nanoindentation tests for Cu-Ni alloys obtained by casting method revealed that the elastic modulus varied between 101.89 GPa and 139.27 GPa. On the other hand, it was observed that these values were between 126.30 GPa and 186.34 GPa in MD simulations. The deepest indentation mark was recorded in single crystal Cu[100] metal, while the shallowest indentation was recorded in Cu-%10Ni alloy. In Al-Si alloys, it was determined that indentation displacements increased, applied forces decreased and dislocation density decreased with increasing silicon content. In addition, it was calculated that Cu-%10Ni alloy with larger grain sizes had a hardness value of 2.40 GPa, whereas this value increased to 3.90 GPa in Cu-%20Ni alloy with smaller grain sizes. The heterogeneous distribution of silicon in Al-Si alloys and the presence of elements such as Mg, Fe and Ag affected the pop-in and pop-out behaviors and caused differences in mechanical properties. However, no permanent dislocation formation was observed in Al-%20Si alloy. The experimental findings and MD simulation results were found to be consistent with each other; it was confirmed that MD simulations are applicable and reliable in analyzing real-time atomic scale deformations. In this context, it was concluded that MD simulations are a fast and low-cost method for determining mechanical properties such as elastic modulus and hardness in metal alloys.

Keywords: Microstructural Analysis, Nanoindentation, Hardness, Elasticity Modulus, MD simulation, Lammmps, Dislocation

ÖN SÖZ

“Tek Kristalli Bakır, Silisyum ve Al-Si, Cu-Ni Alaşım Malzemelerinde Nanoindentasyon Uygulamaları ve Etkilerinin İncelenmesi” başlıklı doktora tezi çalışması; Giriş, Kaynak Araştırması, Yöntem, Araştırma Sonuçları ve Tartışma ile Sonuçlar ve Öneriler olmak üzere beş bölümden oluşmaktadır. Giriş bölümünde; bakır-nikel (Cu-Ni), alüminyum-silisyum (Al-Si) alaşımları ile [100] kristalografik yöneline sahip tek kristalli Cu[100] metali ve Si[100] yarı iletkeninin kullanım alanları ve önemi ele alınmıştır. Kaynak araştırması bölümünde; Cu ve Al esaslı alaşımlar üzerinde gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ile moleküler dinamik (MD) simülasyonları kullanılarak yapılan indentasyon çalışmalarına yer verilmiştir. Yöntem bölümünde; nanoindentasyon deneylerinde kullanılacak Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının döküm süreçleri, sıcaklık ölçümlerinde termal kamera kullanımı, alaşımların yüzey pürüzlülüğünün giderilmesi ve parlatılması, yüzey pürüzlülük testleri, numunelerin dağlanma işlemleri, optik mikroskop ile mikroyapısal analizler, taramalı elektron mikroskobu (SEM) ile görüntüleme, enerji dağıtıcı X-ışını (EDX) yöntemiyle elementel analizler, nanoindentasyon test cihazı, kullanılan takım ucu ve deney koşulları ile ilgili bilgiler sunulmuştur. Ayrıca, MD simülasyonlarında kullanılan yazılım programı, atomlar arası potansiyel enerji modeli ve oluşturulan girdi dosyalarının yüksek başarılı hesaplama (HPC) sistemlerinde yürütülmesi süreci ayrıntılı olarak açıklanmıştır. Çalışmada; Cu[100], Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni, Cu-%20Ni ile Si[100], Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarının hem deneysel yöntemlerle hem de moleküler dinamik simülasyonlarla gerçekleştirilen nanoindentasyon sonuçları karşılaştırılmıştır. Sonuçlar ve öneriler bölümünde elde edilen bulgulara ve genel değerlendirmelere yer verilmiştir. Bu doktora tez çalışmasında, başta danışmanım Prof. Dr. Hamit Adin olmak üzere tez izleme komitesi üyeleri Prof. Dr. Mustafa Okumuş ve Doç. Dr. Tolga Topkaya’ya değerli katkılarından dolayı teşekkür ederim. Hayatım boyunca desteklerini esirgemeyen kıymetli abilerime, babama ve anneme; sabrı, sevgisi ve sonsuz desteğiyle her zaman yanımda olan sevgili eşime gönülden teşekkür eder, bu çalışmayı onlara ithaf ederim.

İsmail AK
BATMAN-2025

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
ÖN SÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xv
1. GİRİŞ	1
1.1. Cu-Ni Alaşımları ve Tek Kristalli Cu[100] Metalinin Kullanım Alanları	4
1.1.1. Cu-Ni alaşımlarında korozyon direnci ve dayanıklılık	5
1.1.2. Cu-Ni alaşımların elektriksel iletkenliği	7
1.1.3. Tek kristalli Cu[100] metalinin kullanım alanları	7
1.2. Al-Si Alaşımları ve Tek Kristalli Si[100] Kullanım Alanları ve Önemi	10
1.3. Bilimsel Çalışmalara ve Sanayideki Üretim Aşamalarına Katkısı	14
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	16
3. YÖNTEM	27
3.1. Al-Si ve Cu-Ni Alaşımlarının İmalatı	27
3.1.1. Cu-Ni alaşımların döküm yöntemi ile üretilmesi	29
3.1.2. Al-Si alaşımların döküm yöntemi ile üretilmesi	30
3.2. Cu-Ni ve Al-Si Alaşımlarının Yüzey Parlatma İşlemi	31
3.2.1. Yüzey pürüzlülük testi	32
3.3. Numunelerin Dağlanması	33
3.4. Optik Mikroskop ile Al-Si ve Cu-Ni Alaşımlarının Analizleri	34
3.5. Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve Enerji Dağıtıcı X-ışını (EDX)	35
3.6. Nano İndentasyon Deneyleri	35
3.6.1. Nanoindentasyon cihazı	36
3.6.2. Nanoindentasyon deneylerinde kullanılan takım ucu	37
3.6.3. Nanoindentasyon ölçüm şartları	38
3.6.4. Atomik kuvvet mikroskobu	39
3.6.5. Nanoindentasyon yöntemi	40
3.6.6. Oliver-Pharr yöntemi	41
3.7. MD Simülasyon	43
3.7.1. LAMMPS.....	43
3.7.2. LAMMPS kullanım alanları	44
3.8. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi(YFT)	44
3.8.1. Yoğunluk Fonksiyonel teorisi(YFT) ile potansiyel enerji hesaplanması	45
3.8.2. Potansiyel enerji hesaplama adımları	46
3.9. MD Simülasyon ile Gerçekleştirilen İndentasyon İşlemlerinde Kullanılan Atomlar Arası Potansiyeller.....	47
3.9.1. Gömülü atom modeli (GAM) potansiyeli.....	48
3.9.2. Hareket denklemleri.....	49
3.10. MD Simülasyon Girdi Dosyasının Oluşturulması ve Çalışma Prensipleri	50

3.10.1.	MD Simülasyon yöntemi için simülasyon yapısı ve girdi dosyasının oluşturulması.....	50
3.10.2.	Simülasyon yapısı	51
3.10.3.	Simülasyon hücresi	51
3.10.4.	Simülasyon modeli için alaşımların oluşturulması	52
3.10.5.	Simülasyon girdi dosyası	54
3.10.6.	VPN ve SSH ile bağlantısı ile girdi dosyasının çalıştırılması	58
3.10.7.	Girdi dosyalarının yüksek başarımlı bilgisayarda hesaplanması	58
3.10.8.	Sonuç verilerinin UHEM sisteminden alınması	59
3.11.	MD simülasyon sonucu sertlik, indirgenmiş elastisite modülü ve elastisite modülü değerlerin hesaplanması	59
4.	BULGULAR VE TARTIŞMA.....	62
4.1.	Optik Mikroskop ile Al-Si ve Cu-Ni Alaşımların Mikro Yapısal Analizlerinin Yapılması	62
4.1.1.	Cu-Ni ve Al-Si alaşımların mikroyapı analizi	62
4.2.	Alaşımların SEM ve EDX Analizi.....	64
4.2.1.	Cu-Ni alaşımların SEM analizleri.....	64
4.2.2.	Cu-Ni alaşımların EDX analizleri.....	64
4.2.3.	Al-Si alaşımların SEM analizi	65
4.2.4.	Al-Si alaşımların EDX analizleri.....	67
4.3.	Nano İndentasyon Deney Sonuçları ve Analizi	69
4.3.1.	Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımların nanoindentasyon deney sonuçları ve analizi.....	69
4.3.2.	Cu-Ni alaşımları ve Tek kristalli Cu[100] metalinin nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme eğrileri	75
4.4.	Si [100] ve Al-Si Alaşımların Nanoindentasyon Deney Sonuçları ve Analizi.....	83
4.4.1.	Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si[100] için nanoindentasyon deneyi sonucu yük-yer değiştirme grafiği	87
4.4.2.	Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü değerleri	91
4.5.	Moleküller Dinamik Simülasyon Sonuçları ve Analizi	93
4.5.1.	Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımların MD simülasyon sonuçları ve analizi	94
4.5.2.	Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların MD simülasyon deney sonuçları ve analizi	123
4.5.3.	Al-%10Si alaşımların MD simülasyon sonuçları ve analizi	131
4.6.	Nanoindentasyon Deneyleri ile MD Simülasyonların Karşılaştırılması.....	148
4.6.1.	Tek kristalli Cu [100], Cu-Ni alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri ile MD simülasyonların karşılaştırılması	148
4.6.2.	Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri ile MD simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması	153
5.	SONUÇLAR VE ÖNERİLER	160
5.1.	Sonuçlar	160
5.2.	Öneriler	163
6.	KAYNAKLAR	164

ÇİZELGELER LİSTESİ

Çizelge 1.1. Tek kristalli Cu [100] metalinin kristal yapısı	8
Çizelge 1.2. Tek kristalli Si[100]'nin kristal yapısı (Material, technologie & kristalle GmbH)	11
Çizelge 1.3. Laboratuvar deneyleri ve MD simülasyonların avantaj ve dezavantajları.....	15
Çizelge 3.1. Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarını oluşturan bileşen ağırlıkça yüzdelikleri	28
Çizelge 3.2. Cu-Ni alaşımlarının yüzey pürüzlülük değerleri (Ra)	33
Çizelge 3.3. Al-Si alaşımlarının yüzey pürüzlülük değerleri (Ra).....	33
Çizelge 4.1. Cu-Ni alaşımlarının ve tek kristalli Cu[100] metalin girinti verileri	79
Çizelge 4.2. Cu-Ni alaşımlarının ve tek kristalli Cu[100] metalin girinti verileri	80
Çizelge 4.3. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin 5000 μ N yük altında sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü	80
Çizelge 4.4. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin 10000 μ N yük altında sertlik ve indirgenmiş elastisite modül değerleri	80
Çizelge 4.5. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin, 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu elastisite modülü değerleri	82
Çizelge 4.6. Al-Si alaşımlarının ve tek kristalli Si [100] için girinti verileri.....	88
Çizelge 4.7. Al-Si alaşımlarının ve tek kristalli Si [100] için girinti verileri.....	88
Çizelge 4.8. Al-Si alaşımları ile tek kristalli Si [100] için sertlik ve indirgenmiş elastisite modül değerleri	92
Çizelge 4.9. Al-Si alaşımları ile tek kristalli Si [100] için sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü değerleri	92
Çizelge 4.10. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100]'ye ait elastisite modül ve indirgenmiş elastisite modül değerleri	92
Çizelge 4.11. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri.....	99
Çizelge 4.12. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	99
Çizelge 4.13. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	100
Çizelge 4.14. Cu-%5Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	104
Çizelge 4.15. Cu-%5Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	104
Çizelge 4.16. Cu-%10Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	108
Çizelge 4.17. Cu-%10Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	108
Çizelge 4.18. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri.....	112
Çizelge 4.19. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar	112
Çizelge 4.20. Cu-%15Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	113
Çizelge 4.21. Cu-%15Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	113
Çizelge 4.22. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri.....	117
Çizelge 4.23. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar	117
Çizelge 4.24. Cu-%20Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	118
Çizelge 4.25. Cu-%20Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	118

Çizelge 4.26. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	120
Çizelge 4.27. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri	121
Çizelge 4.28. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	126
Çizelge 4.29. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	126
Çizelge 4.30. Al-%5Si alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve Burgers vektörlerinin yönelimleri	130
Çizelge 4.31. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar	131
Çizelge 4.32. Al-%5Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri.....	131
Çizelge 4.33. Al-%5Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	131
Çizelge 4.34. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve Burgers vektörlerinin yönelimleri.....	135
Çizelge 4.35. MD simülasyon sonucu Al-%15Si alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar	135
Çizelge 4.36. Al-%10Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	135
Çizelge 4.37. Al-%10Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	135
Çizelge 4.38. Al-%15Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	139
Çizelge 4.39. MD simülasyon sonucu Al-%15Si alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar	139
Çizelge 4.40. Al-%15Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	139
Çizelge 4.41. Al-%15Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	139
Çizelge 4.42. Al-%20Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	142
Çizelge 4.43. Al-%20Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri.....	142
Çizelge 4.44. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri	144
Çizelge 4.45. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilen elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri.....	144

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1. Tek kristalli Cu [100], a) FE-SEM görüntüsü b) Morfolojinin şematik gösterimi. c) Alt düzlem gösterimi (Kondo ve ark., 2006).	8
Şekil 1.2. [100] kristalografik yönelimli kübik yapı (Peter ve ark., 2023)	8
Şekil 1.3. [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır (Yang ve ark., 2023)	8
Şekil 1.4. Tek kristalli Cu[100] metalinin Laue X-ışını görüntüsü (Mateck)	9
Şekil 1.5. Tek kristalli Si[100]'nin kristalografik yapısı (Vogl ve ark., 2015)	11
Şekil 1.6. Tek kristalli Si[100]'nin SEM görüntüsü (Mishra ve ark., 2008).....	12
Şekil 1.7. Tek kristalli Si[100] (Mateck)	12
Şekil 3.1. Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarını oluşturan bileşenler.....	28
Şekil 3.2. KPS-160/1 tipi ara frekanslı indüksiyon fırını.....	28
Şekil 3.3. Kokil kalıp	28
Şekil 3.4. Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımların faz diyagramındaki yeri	29
Şekil 3.5. Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımların faz diyagramındaki yeri..	30
Şekil 3.6. Zımparalama ve parlatma cihazı.....	32
Şekil 3.7. Zımparalama ve parlatma cihazı.....	32
Şekil 3.8. TMR-200 yüzey pürüzlülük cihazı	33
Şekil 3.9. Dağlama işleminde kullanılan HNO ₃ ve NH ₄ OH kimyasal malzemeler	34
Şekil 3.10. Nikon LV150N endüstriyel tip mikroskop	34
Şekil 3.11. Tescan Mira3 marka taramalı elektron mikroskobu	35
Şekil 3.12. a) Nanoindentasyon test cihazı b) nanoindentasyon deney bölüm	36
Şekil 3.13. a) Berkovich ucun SEM görüntüsü (Zhang,2019), b) Berkovich ucun geometrik şekli (Engbretson ve ark., 2021).....	37
Şekil 3. 14. Nanoindentasyon deneylerinde uygulanan yük a) 5000 µN b) 10000 µN	38
Şekil 3.15. Atomik Kuvvet mikroskobu (AKM)	39
Şekil 3.16. Nanoindentasyon sonucu oluşan yük-yer değiştirme eğrisi (Oliver ve Pharr, 1992) 41	
Şekil 3.17. Nanoindentasyon deneyi sonucu malzeme yüzeyinde oluşan iz görüntüsünün şematik gösterimi (Oliver ve Pharr, 1992).....	41
Şekil 3.18. MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon şeması	50
Şekil 3.19. Simülasyon modeli	54
Şekil 3.20. UHEM ve TRUBA sisteminine iş yükleme şeması.....	58
Şekil 4.1. Cu-Ni alaşımının mikroyapısal görüntüsü	62
Şekil 4.2. Al-Si alaşımların mikroyapı görüntüsü.....	63
Şekil 4.3. Al-%20Si alaşımın mikroyapısı.....	63
Şekil 4.4. a) Cu-%5Ni b) Cu-%10Ni c) Cu-%15Ni d) Cu-%20Ni alaşımların SEM görüntüsü	64
Şekil 4.5. a) Cu-%5Ni b) Cu-%10Ni c) Cu-%15Ni d) Cu-%20Ni alaşımların 400 µm ² alandaki EDX analiz sonuçları.....	65
Şekil 4.6. a) Al-%5Si b) Al-%10Si c) Al-%15Si d) Al-%20Si alaşımların SEM görüntüsü..	67
Şekil 4.7. a) Al-%5Si b) Al-%10Si c) Al-%15Si d) Al-%20Si alaşımların 400 µm ² alandaki EDX analiz sonuçları	68
Şekil 4.8. a) Cu-%5Ni alaşımın 5000 µN b) Cu-%5Ni alaşımın 10000 µN c) Cu-%10Ni alaşımın 5000 µN d) Cu-%10Ni alaşımın 10000 µN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	70
Şekil 4.9. a) Cu-%5Ni alaşımın 5000 µN b) Cu-%5Ni alaşımın 10000 µN c) Cu-%10Ni alaşımın 5000 µN d) Cu-%10Ni alaşımın 10000 µN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	70
Şekil 4.10. a) Cu-%5Ni alaşımın 5000 µN b) Cu-%5Ni alaşımın 10000 µN c) Cu-%10Ni alaşımın 5000 µN d) Cu-%10Ni alaşımın 10000 µN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	71
Şekil 4.11. Cu-%10Ni alaşımın 10000 µN yüklerden sonra 3 boyutlu görüntüsü.....	72
Şekil 4.12. a) Cu-%15Ni alaşımın 5000 µN b) Cu-%15Ni alaşımın 10000 µN c) Cu-%20Ni alaşımın 5000 µN d) Cu-%20Ni alaşımın 10000 µN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	72

Şekil 4.13. a) Cu-%15Ni alaşımlarının 5000 μN b) Cu-%15Ni alaşımlarının 10000 μN c) Cu-%20Ni alaşımlarının 5000 μN d) Cu-%20Ni alaşımlarının 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	72
Şekil 4.14. a) Cu-%15Ni alaşımlarının 5000 μN b) Cu-%15Ni alaşımlarının 10000 μN c) Cu-%20Ni alaşımlarının 5000 μN d) Cu-%20Ni alaşımlarının 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	73
Şekil 4.15. Cu-%15Ni alaşımlarının 10000 μN yükten sonra AFM görüntüsü	73
Şekil 4.16. Tek kristalli Cu[100] metali yüzeyine uygulanan (a) 5000 μN , (b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	73
Şekil 4.17. Tek kristalli Cu[100] metali yüzeyine uygulanan 5000 μN ve 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	74
Şekil 4.18. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin yük-yer değiştirme grafiği.....	75
Şekil 4.19. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin yük-yer değiştirme grafiği.....	76
Şekil 4.20. Cu-%5Ni alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	77
Şekil 4.21. Cu-%10Ni alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	77
Şekil 4.22. Cu-%15Ni alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	78
Şekil 4.23. Cu-%20Ni alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	78
Şekil 4.24. Tek kristalli Cu[100] metalin nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	79
Şekil 4.25. Cu-Ni alaşımlarının mikroyapı analizi sonucu tane yapısı	81
Şekil 4.26. Cu-Ni alaşımlarının a) 5000 μN , b) 10000 μN indentasyon kuvvetinde tane yapısı ile sertlik değerleri arasındaki ilişki	81
Şekil 4.27. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu [100] metalinin nanoindentasyon deneyleri sonucu sertlik değerleri	81
Şekil 4.28. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu [100] metalinin nanoindentasyon deneyleri sonucu elastisite modülü değerleri	82
Şekil 4.29. a) Al-%5Si alaşımlarının 5000 μN b) Al-%5Si alaşımlarının 10000 μN c) Al-%10Si alaşımlarının 5000 μN d) Al-%10Si alaşımlarının 10000 μN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri	83
Şekil 4.30. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%5Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%10Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri	83
Şekil 4.31. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%5Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%10Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri	84
Şekil 4.32. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri	84
Şekil 4.33. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri	85
Şekil 4.34. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri	85
Şekil 4.35. Tek kristalli Si[100] üzerine a) 5000 μN , b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	85
Şekil 4.36. Tek kristalli Si[100] üzerine a) 5000 μN , b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri.....	86
Şekil 4.37. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	87
Şekil 4.38. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	87
Şekil 4.39. Al-%5Si alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	88
Şekil 4.40. Al-%10Si alaşımlarının nanoindentasyon deneyi sonucu yük-yer değiştirme grafiği	89
Şekil 4.41. Al-%15Si alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	89
Şekil 4.42. Al-%20Si alaşımlarının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	90
Şekil 4.43. Tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon yük-yer değiştirme grafiği	90
Şekil 4.44. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için sertlik değerleri	92
Şekil 4.45. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için elastisite modül değerleri	93
Şekil 4.46. MD simülasyonlar için oluşturulan simülasyon modeli	94
Şekil 4.47. Tek kristalli Cu [100] metalinin simülasyon modeli	95
Şekil 4.48. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	95
Şekil 4.49. Tek kristalli Cu[100] metalinin indentasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	96

Şekil 4.50. MD simülasyon sonucu tek kristalli Cu[100] metalinin yüzeyinde oluşan deformasyonlar.....	97
Şekil 4.51. MD simülasyon sonucu Cu[100] metalinin iç yapısında oluşan dislokasyonlar	97
Şekil 4.52. MD simülasyon sonucu Cu[100] metalinin iç yapısında oluşan dislokasyonlar	98
Şekil 4.53. Cu-%5Ni alaşımlarının simülasyon modeli	100
Şekil 4.54. Cu-%5Ni alaşımlarının MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	101
Şekil 4.55. Cu-%5Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları.....	102
Şekil 4.56. MD simülasyon sonucu Cu-%5Ni alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar.....	103
Şekil 4.57. MD simülasyon sonucu Cu-%5Ni malzemesinin içyapısı ve girinti iz görüntüsü .	103
Şekil 4.58. Cu-%10Ni alaşımlarının simülasyon modeli	104
Şekil 4.59. Cu-%10Ni alaşımlarını için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	105
Şekil 4.60. Cu-%10Ni alaşımlarının indentasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	106
Şekil 4.61. MD simülasyon sonucu Cu-%10Ni alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar...	107
Şekil 4.62. MD simülasyon sonucu Cu-%10Ni alaşımlarının iç yapısı ve girinti iz görüntüsü....	107
Şekil 4.63. Cu-%15Ni alaşımlarının simülasyon modeli	108
Şekil 4.64. Cu-%15Ni alaşımlarını için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	109
Şekil 4.65. Cu-%15Ni MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	110
Şekil 4.66. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar...	111
Şekil 4.67. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımlarının iç yapısı ve girinti iz görüntüsü.....	111
Şekil 4.68. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımlarında oluşan dislokasyonlar	112
Şekil 4.69. Cu-%20Ni alaşımlarının simülasyon modeli	114
Şekil 4.70. Cu-%20Ni alaşımlarını için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	114
Şekil 4.71. Cu-%20Ni alaşımlarında MD simülasyon sonucu oluşan pop-in ve pop-out olayları	115
Şekil 4.72. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar...	116
Şekil 4.73. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımlarının iç yapısı ve girinti iz görüntüsü.....	116
Şekil 4.74. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımlarında oluşan dislokasyonlar	117
Şekil 4.75. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	119
Şekil 4.76. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu sertlik değerleri	122
Şekil 4.77. Tek kristalli Cu [100] metali, Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu elastisite modül değerleri	123
Şekil 4.78. Tek kristalli Si [100] için oluşturulan simülasyon modeli.....	124
Şekil 4.79. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyonu sonucu elde edilen yük-yer değiştirme grafiği	124
Şekil 4.80. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	125
Şekil 4.81. MD simülasyonu sonucu tek kristalli Si [100] yüzeyinde oluşan deformasyonlar.	126
Şekil 4.82. Al-%5Si alaşımlarının simülasyon modeli.....	127
Şekil 4.83. Al-%5Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	127
Şekil 4.84. Al-%5Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	128
Şekil 4.85. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşım yüzeyinde oluşan deformasyonlar	129
Şekil 4.86. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşımlarının iç yapısı ve dislokasyonlar	129
Şekil 4.87. Al-%5Si malzemesinin dislokasyon yönleri ve Burgers vektörleri.....	130
Şekil 4.88. Al-%10Si alaşımlarının simülasyon modeli.....	132
Şekil 4.89. Al-%10Si alaşımlarını için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	132
Şekil 4.90. Al-%10Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu a) pop-in olayları b) pop-out olayları	133
Şekil 4.91. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar	134
Şekil 4.92. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımlarının iç yapısı ve dislokasyonlar	134
Şekil 4.93. Al-%15Si alaşımlarının simülasyon modeli.....	136
Şekil 4.94. Al-%15Si alaşımlarını için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği.....	136
Şekil 4.95. Al-%15Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	137
Şekil 4.96. MD simülasyon sonucu Al-%15Si alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar ...	138
Şekil 4.97. MD simülasyon sonucu Al-%15Si malzemesinin içyapısı ve girinti iz görüntüsü.	138
Şekil 4.98. Al-%20Si alaşımlarının simülasyon modeli.....	140
Şekil 4.99. Al-%20Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	140

Şekil 4.100. Al-%20Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları	141
Şekil 4.101. MD simülasyon sonucu Al-%20Si alaşımlarının yüzeyinde oluşan deformasyonlar ..	141
Şekil 4.102. MD simülasyon sonucu Al-%20Si alaşımlarının iç yapısı ve girinti iz görüntüsü	142
Şekil 4.103. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği	143
Şekil 4.104. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilen elastisite modül değerleri.....	146
Şekil 4.105. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilen sertlik değerleri.....	147
Şekil 4.106. Tek kristalli Cu [100] ve Cu-Ni alaşımlarının a) 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirmesi b) MD simülasyon sonucu 10000 μ N altında yük-yer değiştirmesi.....	149
Şekil 4.107. 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu Cu [100] ve Cu-Ni alaşımlarının sertlik değerleri	152
Şekil 4.108. 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu tek kristalli Cu [100] ve Cu-Ni alaşımlarının elastisite modül değerleri	153
Şekil 4.109. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının a) 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirmesi b) MD simülasyon sonucu 10000 μ N altında yük-yer değiştirmesi.....	155
Şekil 4.110. 5000 μ N ve 10000 μ N yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon deneyleri sonucu tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının sertlik değerleri	157
Şekil 4.111. 5000 μ N ve 5000 μ N yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının elastisite modül değerleri .	159

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

$r^{(j)}$	: Başlangıçtaki j'inci adımdaki pozisyon
$r^{(j+1)}$	: j+1'inci adımdaki atom pozisyonu
$v^{(i)}$	: i'nci parçaçığın hız vektörü
%	: Yüzde değeri
∇V	: Atom parçacıkların konumlarına göre alınmış gradyanı
τ_c	: Dislokasyonun dışarı çıkması için gerekli olan stres
Å	: Ångström
A	: İndenter temas alanı
Al	: Alüminyum
Al-Si	: Alüminyum-Silisyum
Al ₂ O ₃	: Alüminyum oksit
b	: Burgers vektörünün büyüklüğü
Cu	: Bakır
Cu-Ni	: Bakır-Nikel
E _i	: İndenter malzemesinin elastisite modülü
E _m	: Malzemenin elastisite modülü
E _r	: İndirgenmiş elastisite modülü
$Exc(p)$	: Değişim-korelasyon enerjisi (yaklaşım gerektirir)
$F(\rho i)$	: Elektron yoğunluğuna bağlı enerji terimi
Fe	: Demir
fs	: Femtosecond
H	: Sertlik
h	: Toplam derinlik
h _c	: İndenter temas derinliği
h _f	: İndenter iz derinliği
h _{max}	: Maksimum indenter derinliği
HNO ₃	: Nitrik asit
$J(p)$	: Klasik elektrostatik Coulomb enerjisi
kWh	: Kiloovat saat
m _i	: Atom kütlesi
Mn	: Mangan
N	: Newton
N	: Sistemdeki toplam atom sayısı
NH ₄ OH	: Amonyak hidroksit
Ni	: Nikel
P _{max}	: Maksimum yük
ps	: Picosecond
r	: Atomların pozisyon vektörleri
Ra	: Ortalama yüzey pürüzlülüğü(μm)
r_{ij}	: Atom i ile atom j arasındaki uzaklık
S	: Boşaltma eğrisinin eğimi
Si	: Silisyum
SiC	: Silisyum karbür
t _c	: Dalganın bir çarpanının, bant genişliği ve kılavuz uzunluğu
$Ts(p)$	: Kohn-Sham elektronlarının kinetik enerjisi

U	: Potansiyel enerji
V	: Van der Waals kuvvetleri
<i>Vext(p)</i>	: Dış potansiyel (çekirdek-elektron etkileşimi)
<i>Vr_{ij}</i>	: Atom <i>i</i> ile atom <i>j</i> arasındaki potansiyel enerji
V_i	: İndenter malzemesinin poisson oranı
μ	: Kılavuzun etkili kırılma indisi
μm	: Mikrometre
ρ_i	: Atom <i>i</i> 'nin elektron yoğunluğu
V_m	: Malzeme poisson oranı

Kısaltmalar

AFM	: Atomik kuvvet mikroskopu
ARGE	: Araştırma geliştirme
HMK	: Hacim merkezli kübik
GAM	: Gömülü atom yöntemi
EDX	: Enerji Dağılımı X-ışını Spektroskopisi
EMOL	: Elektrik, Manyetik ve Optik Özellikler Ölçüm Laboratuvarı
YMK	: Yüzey merkezli kübik
FE-SEM	: Alan emisyonlu taramalı elektron mikroskop
YPB	: Yüksek performanslı bilgisayar
Lammps	: Büyük ölçekli atomik/moleküler kütleli paralel simülatör
MD	: Moleküller dinamik
mm	: Milimetre
Nm	: Nanometre
OVITO	: Açık Görselleştirme Aracı (Open Visualization Tool)
QM	: Kuantum mekaniği
SEM	: Taramalı Elektron Mikroskopu
TÜBİTAK	: Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu

1. GİRİŞ

Teknolojinin ilerlemesi ile imalat sanayinde mekanik, elektronik ve tıp biliminde kullanılan malzemelerin boyutu küçülmüştür. Nano boyuttaki malzemeler yüksek aktivite katalizörleri, optik uygulamalar için özel malzemeler, süper iletkenler, aşınmaya dayanıklı katkı maddeleri, yüzey aktif maddeler, ilaç taşıyıcıları ve özel teşhis araçları gibi birçok teknolojik ve tıbbi ürünün hazırlanması için zemin hazırlamıştır. Öte yandan, nano malzemelerin boyut seviyesinde kontrolü sayesinde; nano taşıyıcılar, sensörler, nano makineler ve yüksek yoğunluklu veri depolama hücreleri gibi benzersiz işlemler yapan minyatür cihazların üretimine izin verilmiş olur. Bu da nano ölçekte çalışmanın gerekliliğine yol açmıştır. Nanoteknoloji, malzemelerin 1-100 nm ölçek aralığında atomik hassasiyette incelenip uygulanmasıdır. Başka bir deyişle metrenin milyarda biri nispetinde malzemelerle çalışma olarak tanımlayabiliriz. Nano teknolojinin kelime anlamı; nano ölçekte Şekil ve ebatları kontrol edilen malzeme, cihaz ve sistemlerin tasarım, karakterizasyon, üretim ve uygulamalarıdır. Nano boyutlu malzeme; nano kristaller, nanopartiküller, nanotüpler, nanoteller, nano çubuk veya nano-ince filmlere ilginin ana nedeni, hacimsel yapılarının aksine, belirli boyut aralığında istisnai özellikler ve işlevler göstermeleridir (Goldstain, 2007; Liveri, 2006). Nanoskopik boyutlara sahip malzemeler, sadece cihaz teknolojisi ve ilaç üretimi gibi alanlarda potansiyel teknolojik uygulamalara sahip olmakla kalmaz, aynı zamanda, bir malzemenin özelliklerinin, kütle ve moleküler ölçekler arasındaki bu geçiş rejiminde değişebilmesi bakımından da büyük ilgi görür. Nano boyuttaki malzemenin özellikleri kuantum mekaniği ile belirlendiğinden, bu boyuttaki malzemenin fizik özellikleri makro ölçeğe göre farklılık gösterir. Yüzey ve yüzey altı deformasyon sorunlarının çözülmesi; malzeme özelliklerinde önemli değişikliklere ve daha iyi performans ve işlevsellikler sağlayabilir. Sonlu elemanlar metodu, makro ölçekte birçok problemin analizinde kullanılmaktadır. Fakat Sonlu elemanlar metodu, temas ve sürtünme gibi birçok fiziksel özelliğin atomik detaylarını ortaya koyamamıştır. Nanoindentasyon, malzemelerin mekanik özelliklerini nano ölçekte ölçmek için güçlü bir araçtır. Son yıllarda, Cu-Ni alaşımlarının özelliklerini incelemek için nanoindentasyon kullanımına artan bir ilgi vardır. Bu alaşımlar korozyona karşı yüksek dirençleri, iyi elektriksel ve termal iletkenlikleri ve yüksek mukavemet ve

süneklikleri ile bilinir ve bu da onları çok çeşitli uygulamalar için uygun hale getirir (Baheti ve ark., 2015). Alaşımlama, metalik malzemeler için iş sertleştirme kapasitesini artırmanın basit ama etkili bir yolu olarak kabul edilmiştir (Tian ve ark., 2016; Qu ve ark., 2009; Goang ve ark., 2013). Bakır-nikel olarak da bilinen bakır-nikel alaşımları, esas olarak bakır ve nikelden oluşan bir alaşım grubudur. Cu-Ni alaşımlarında, yüksek mekanik dayanım elde etmek için Ni eklenmektedir (Zhao ve ark., 2003). Bu alaşımlar, yüksek korozyon direnci, iyi mukavemet ve süneklik ve mükemmel termal ve elektrik iletkenliği gibi çok çeşitli özelliklere sahiptir. Deniz mühendisliği, madeni para basımı ve elektrikli ekipmanlar gibi çeşitli uygulamalarda yaygın olarak kullanılırlar. Dökme bakır-nikel alaşımları, erimiş metalin katılaştığı ve kalıbın şeklini aldığı bir kalıba dökülmesiyle üretilir. Döküm işlemi, karmaşık ve girift şekillerin iyi bir boyutsal doğrulukla üretilmesine olanak tanır. Bazı araştırma grupları (Tian ve ark., 2016; Qu ve ark., 2009; Rohatgi ve ark., 2001) Al içeriğinin Cu-Al alaşımlarının iş sertleştirme davranışı üzerindeki etkisini araştırmış ve iş sertleştirme kapasitesinin artan Al içeriği ile arttığını bulmuştur. Yüksek bir iş sertleştirme kapasitesi akmayı geciktirebilir ve sonuçta deformasyon sırasında çatlamaya ve daha yüksek sünekliğe yol açabilir. Bu nedenle, bazı yaklaşımlar (Cao ve ark., 2018) metalik malzemelerin iş sertleştirme kapasitesini geliştirmeyi amaçlamaktadır. Diğer bir alaşım malzemesi olan Al-Si alaşımları, düşük termal genleşme katsayısı, iyi döküm performansı, düşük yoğunluk, yüksek sıcaklık dayanımı, yüksek aşınma direnci ve iyi korozyon direnci gibi mükemmel özellikleri nedeniyle önemli ve yaygın olarak kullanılan döküm alaşımlarıdır (Slattery ve ark., 2009; Miller ve ark., 2000). Alüminyum ve alüminyum alaşımları gibi hafif malzemeler, gaz emisyonları ve küresel ısınma ile ilgili endişeler nedeniyle mühendislik uygulamaları için özel ilgi görmüştür. Elektrikli otomobil parçalarında alüminyum alaşımlarının kullanımı önemli ölçüde artmıştır. Alüminyum-silisyum alaşımları, yüksek akışkanlıkları, korozyon dirençleri ve düşük büzülme oranları nedeniyle motor blokları, silindir kafaları, şasi ve süspansiyon bileşenleri gibi yorulma açısından kritik yapısal uygulamalarda geniş kullanım alanı bulmaktadır. Bu tercih, mekanik ve teknolojik özelliklerin olağanüstü karışımından kaynaklanır ve onları otomotiv yakıt ekonomisini geliştirmek için ideal hale getirir (Van Fleteren, 1996). Alüminyum dökümlerin yorulma özellikleri, kimyasal bileşim, ısıtma işlemi veya katılma süresinin sınırlı etkisi ile öncelikle döküm kusurlarının varlığından etkilenir. Bu ilişki, dendrit kol aralığı ve ötektik silisyum ve intermetalik fazların morfolojisi ve boyutları gibi gözlemlerle açıkça görülmektedir (Debayeh ve ark., 1996; Buffiere ve ark., 2001; Gao ve ark., 2004; Linder ve ark., 2006; Nicoletto ve ark.,

2007). Oluşan döküm hataları kimyasal bileşime, ısıtılma veya katılaşma süresine duyarlılıkları nispeten küçükken, döküm hatalarına oldukça bağımlıdır (Sonsino ve Ziese, 1993; Lados ve Apelian, 2004). Bir malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik, elastisite modülü, uygulanan stres altındaki deformasyon davranışını değerlendirmek oldukça önemlidir. Nanoindentasyon yöntemi ile yapılan deneyler ile Sertlik, elastisite modülü ve malzemelerin plastik deforme olabilirliğini değerlendirilmesi son yıllarda oldukça popüler olmuştur. Son birkaç on yılda, nanoindentasyon test yöntemleri geliştirilmiştir (Paul ve ark., 2021; Ohmura ve Wakeda, 2021; Liu ve ark., 2021; Endoh ve ark., 2021; Meng ve ark., 2021; Xiang ve ark., 2021; Man ve ark., 2020; Zhu ve ark., 2020; Pöhl ve ark., 2020; Wang ve ark., 2020). Çelikler, tungsten, bakır ve NiTi alaşımları dahil olmak üzere çeşitli malzemelerin değerlendirilmesi için hızla yaygınlaşmaktadır (Zhang ve ark., 2019; Xio ve ark., 2019; Sun ve ark., 2019; Laursen ve ark., 2020). Bu, üstün malzemelerin geliştirilmesi için yararlı olan nano ölçekli deformasyon hakkında yeni metalurjik bilgiler üretmiştir. Nanoindentasyon testleri, düşük yükler altında bile (milinewton mertebesinde) nano ölçekli taneciklerle sıkıştırma ve boşaltma sırasında plastik deformasyon davranışı hakkında ayrıntılı bilgi sağlayan yük-deplasman eğrileri oluşturulmaktadır. Nanoindentasyon test tekniklerinin erken gelişimi sırasında Oliver ve Pharr yük-yer değiştirme eğrilerinden elastik modülü belirlemek için bir yöntem önermiştir (Oliver ve Pharr, 1992; Oliver ve Pharr, 2004). Nanoindentasyon testlerinin yük-yer değiştirme eğrilerinde bazen "pop-in olayları" olarak adlandırılan sıkıştırma sırasında deformasyon direncinde ani düşüşler gözlemlenmektedir (Sekido ve ark., 2011). Bu olay dislokasyon çekirdeklenme davranışı ile yakından ilişkilidir ve elastikten elasto-plastik deformasyona geçiş noktasını gösterir (Gouldstone ve ark., 2020). Böylece, nanoindentasyon testi hem elastik hem de plastik deformasyon çalışmalarında uygulanabilmektedir. Nanoindentasyon deneyleri sırasında atomik ölçekteki deformasyon mekanizmalarını anlamak oldukça zordur. Bu yüzden atomistik simülasyonlar malzemeleri 'araştırmak' için harika bir araç olarak ortaya çıkmıştır (Sinnott ve ark., 2010). Kelchner ve arkadaşlarının yaptığı çalışmayla moleküler dinamik (MD) simülasyonlarının dönüm noktası niteliğindeki katkısı sayesinde, bu yöntem indentasyon işlemleri sırasında plastisite mekanizmalarını incelemek amacıyla kapsamlı bir şekilde kullanılmaktadır (Kelchner ve ark., 1998). Moleküler dinamik simülasyonlar, girinti sürecinin izlenmesine olanak tanır ve dislokasyonların oluşumu, reaksiyonu ve yok oluşu, ikizlenme, oluşan plastik bölgenin genişlemesi dislokasyonların oluşması hakkında atomistik bir görüntü elde etme avantajı sunmaktadır. Bu tür

simülasyonlar günümüzde özellikle f.c.c. ve b.c.c. metaller olmak üzere birçok malzeme için gerçekleştirilmiştir (Lilleodden ve ark., 2003; Ma ve Yang, 2003; Liang ve ark., 2004; Van ve ark., 2003; Asenjo ve ark., 2006; Ju ve ark., 2007; Ziegenhain ve Urbassek, 2009; Ziegenhain ve Urbassek, 2010; Kumar ve ark., 2013; Alcalá ve ark., 2012; Hagelaar ve ark., 2006; Ruestes ve ark., 2014; Gao ve ark., 2015). Bununla birlikte, h.c.p. metallerin çalışılmasına yönelik katkılar hala nadirdir (Verkhovtsev ve ark., 2013). Metal olmayan malzemelerin moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile çok az çalışmalar yapılmıştır. (Kim ve Oh, 2006; Mylvaganam ve ark., 2009; Goel ve ark., 2014; Lodes ve ark., 2011; Szlufarska ve ark., 2005; Chen ve ark., 2007; Szlufarska ve ark., 2007; Mishra ve ark., 2009; Lee ve ark., 2008). Moleküler dinamik simülasyon ile yapılan çalışmalarda elde edilen yük-yer değiştirme eğrileri, deneysel olarak ölçülen özelliklerin atomistik kökenleriyle ilişkilendirilmesine olanak tanımış; bu yöntem, dislokasyon çekirdeklenmesi ve kayma süreçlerinin tanımlanmasında önemli bir rol oynamıştır (Gouldstone ve ark., 2007). Bir yandan, moleküler dinamik (MD) simülasyonları, ortamda su katmanları, oksitler ve hidrokarbonlar gibi kontaminantları içermeyen ideal yüzeyleri modelleme imkânı sunmaktadır. Öte yandan, uzunluk ve zaman ölçeklerindeki uyumsuzluk, simülasyon sonuçlarının deneysel verilerle karşılaştırılmasında önemli bir engel teşkil etmektedir. MD simülasyonları, yalnızca onlarca nanometre ölçeğinde boyut ve derinliğe sahip örnekleri inceleyebilirken; geleneksel nanoindentasyon yöntemleri, mikrometre düzeyinde yanal boyutlara ve yüzlerce nanometre derinliğe sahip örneklerin analizinde kullanılmaktadır. Çalışmanın bu bölümünde, üretimleri gerçekleştirilen Al-Si ve Cu-Ni alaşımları ile [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır ve silisyum yüzeylerinde, nano-test cihazı ve moleküler dinamik simülasyon ile Berkovich uç kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyleri hakkında genel bilgiler sunulmuştur.

1.1. Cu-Ni Alaşımları ve Tek Kristalli Cu[100] Metalinin Kullanım Alanları

Cu-Ni alaşımları, endüstriyel uygulamalardan bilimsel araştırmalara kadar birçok alanda kritik bir rol oynamaktadır. Bu alaşımların temel bileşenlerinden biri olan nikel, her ne kadar element olarak keşfi gecikmiş olsa da nikelin alaşımlarda kullanımı, bileşim detaylarına dair sınırlı bilgiye rağmen, en az iki bin yıl öncesine dayanmaktadır. Bu durum, bakırla birlikte ağırlıkça %10'a kadar nikel içeren antik sikke buluntuları ile desteklenmektedir (Brückmann, 1983). Orta Çağ'da Sakson madenciler, nikel içeren

kırmızı pirit cevherlerini (NiAs) “coppernickel” olarak adlandırmışlardır. Bu adlandırma, söz konusu minerallerin bakır ve demir sülfürlerinin yanı sıra arsenit içermesi ve görünüşte bakır içerse de bakır elde etme girişimlerinin başarısızlıkla sonuçlanması nedeniyle ortaya çıkmıştır. 'Nikel' terimi de bu süreçte, cevherin ‘büyülenmiş’ olduğu inancına dayalı olarak, Almanca’daki “kupfernickel” (bakır + kötü ruh/goblin) ifadesinden türemiştir. 20. yüzyılın başlarında İngiltere’de %80 Cu ve %20 Ni içeren alaşımlar için 'bakır-nikel' terimi kullanılırken, Almanya’da 'Cu-Ni alaşımları' terimi genellikle %50’den az nikel içeren malzemeleri tanımlamak amacıyla yaygın biçimde benimsenmiştir. Cu-Ni alaşımları, tarihsel olarak çoğunlukla cevherlerin işlenmesi yoluyla üretilmiş olmakla birlikte, günümüzde sahip oldukları çeşitli özgün uygulamalar nedeniyle önemli bir araştırma ve kullanım alanı oluşturmaktadır. Bakır ve nikel elementleri periyodik tabloda sırasıyla 29 ve 28 numaralı atomlara sahip olup, atomik ağırlıkları sırasıyla 63.54 g/mol ve 68.71 g/mol’dür. Cu-Ni alaşımları, tüm bileşim aralığında yüzey merkezli kübik (FCC) kristal yapıya sahiptir. Kristal kafes parametresi, bakır için 3.615×10^{-8} cm ve nikel için 3.523×10^{-8} cm olup, alaşımların atomik konsantrasyonuna bağlı olarak bu değerler arasında yaklaşık olarak doğrusal bir değişim gösterir. Cu-Ni alaşımları, ana bileşen olarak bakır ve ikincil bileşen olarak nikelin, diğer elementlerle ya da yalnızca ikili sistem hâlinde oluşturduğu alaşımlardır. Bu bağlamda, çinko içeriği genellikle %1’in altında tutulur. Diğer alaşım elementleri mevcut olduğunda, nikel bakırdan sonra en yüksek oranda bulunan bileşen konumundadır. Ticari Cu-Ni alaşımları çoğunlukla %8,5 ila %45 nikel içerir ve istenen özelliklerin geliştirilmesi amacıyla genellikle manganez, demir ve kalay gibi elementler ilave edilir. Döküm yoluyla elde edilen Cu-Ni alaşımlarında ise, ek olarak niyobyum ve silisyum gibi elementlerin kullanımı yaygındır.

1.1.1. Cu-Ni alaşımlarında korozyon direnci ve dayanıklılık

Cu-Ni alaşımı üstün korozyon önleme ve mukavemet özelliklerine sahiptir (Mizushima ve ark., 1996). Cu-Ni alaşımları vanalar, bağlantı parçaları, kondenser ve ısı eşanjörü boruları gibi çeşitli deniz suyu uygulamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır. İyi işlenebilirliklerine ek olarak, mükemmel termal ve elektriksel özelliklere ve özellikle biyolojik kirlenmeye karşı dirence sahiptirler. Cu-Ni alaşımları, bakır alaşımları arasında korozyona karşı yüksek dayanıklılığa sahip bir grup malzeme olarak bilinir. Bu alaşımlar, neme, oksitleyici olmayan asitlere, alkalilere, tuz çözeltilerine, organik asitlere ve gazlara

karşı son derece dirençlidir. Ayrıca, gerilme korozyonu çatlaması riskleri düşüktür, seçici korozyon eğilimleri minimaldir ve çukur korozyonu nadiren görülür. Bu yüksek dayanıklılık, genellikle yüzeyde oluşan kararlı bir koruyucu kaplama sayesinde, özellikle alaşımın metal bileşimi ile ilişkilendirilmektedir. Korozyon direnci ve değiştirilebilir mekanik özellikleri nedeniyle Cu-Ni alaşımları, özellikle deniz ortamında çeşitli uygulamalarda kullanılmıştır (Kear ve ark., 2004). Cu-Ni alaşımı, deniz suyu kaynaklı korozyona karşı olağanüstü bir direnç sunmaktadır. Düşük sıcaklık dayanımına sahiptir ve aynı anda korozyon ve aşınma direnci sunmaktadır. Bu nedenle Cu-Ni alaşımı, denizcilik endüstrisinde uzun ömür ve düşük bakım maliyeti sağlamaktadır. Cu-Ni alaşımların termal iletkenliği Cu-Ni alaşımları için önemli bir özelliktir ve bu alaşımların çeşitli uygulamalarda kullanıldığı birçok endüstriyel ve mühendislik süreçte rol oynar. Cu-Ni alaşımlarının ısı iletkenliği özellikleri, tipik olarak bakır ve nikel oranına, alaşım bileşimine ve işleme yöntemlerine bağlı olarak değişebilir. Örnek olarak, bakır-nikel alaşımlarından biri olan Cu70Ni30 (bakır %70, nikel %30) alaşımını ele alalım. Bu alaşım, bakır ve nikelin özel bir oranını içerir ve deniz suyuna dayanıklılığı nedeniyle denizcilik endüstrisinde yaygın olarak kullanılır. Cu70Ni30 alaşımı, aynı zamanda denizaltıların ve gemi motorlarının soğutma sistemlerinde tercih edilen bir malzemedir. Bu alaşımın ısı iletkenliği, ısıyı iyi iletebilme özelliği sayesinde bu tür uygulamalarda faydalıdır. Ayrıca, bakır-nikel alaşımları endüstriyel ısı değişim cihazlarında da kullanılır. Örneğin, ısı değiştiriciler, bu alaşımların yüksek ısı iletkenliği sayesinde ısıyı bir akışkan içinde transfer etmek için kullanılabilir. Cu-Ni alaşımlarının ısı iletkenliği özellikleri, ısı transfer verimliliğini artırmak için önemli bir rol oynamaktadır.

Cu-Ni alaşımları için termal iletkenliğine sahip bazı örnekler:

- Cu-%10Ni alaşımı: Bu alaşımın adı, %90 bakır ve %10 nikel içeriğini ifade eder. Bu alaşım, denizcilik endüstrisinde yaygın olarak kullanılır ve yüksek termal iletkenliği sayesinde ısı transferi uygulamalarında etkili bir şekilde kullanılmaktadır.
- Cu-%30Ni alaşımı: %70 bakır ve %30 nikel içeren bu alaşım, termal iletkenlik açısından oldukça iyi bir performans sergiler. Boru hatları, denizcilik tesisleri ve ısı değiştiriciler gibi uygulamalarda sıkça kullanılmaktadır.
- Cu-Ni levhalar ve çubuklar: Cu-Ni alaşımlarından yapılmış levhalar ve çubuklar, ısı iletimi gerektiren birçok uygulamada kullanılır. Bu malzemeler, yüksek termal iletkenliği sayesinde mükemmel ısı transferi sağlamaktadır.

- Cu-Co-Ni: Bu alaşımlar, bakır ve nikelin yanı sıra kobaltı da içerir. Kobalt, termal iletkenliği artırır ve bu alaşımları ısı iletimi uygulamalarında etkili kılmaktadır.

1.1.2. Cu-Ni alaşımların elektriksel iletkenliği

Bakır, doğal olarak mükemmel bir elektriksel iletkenken, nikel de bu özelliği destekler. Bu iki elementin bir araya getirildiği Cu-Ni alaşımı, elektrik mühendisliği ve elektronik uygulamalarda yüksek performanslı bir iletim sağlar. Bu nedenle, elektrik kabloları, elektrik devreleri ve diğer elektronik bileşenlerde kullanılmaktadır.

Cu-Ni alaşımların elektriksel iletkenlikte kullanıldığı alanlar aşağıda gösterilmiştir.

- Elektrik ve elektronik endüstrisi: Cu-Ni alaşımları, elektrik ve elektronik cihazların birçok bileşeni için tercih edilen bir malzemedir. Lehimleme işlemlerinde, elektriksel bağlantı noktalarında ve devre kartlarında yaygın olarak kullanılmaktadır.
- Kablo ve tel üretimi: Bakır ve nikelin bir araya getirilmesi, kablo ve tel üretiminde yüksek performanslı iletkenlerin elde edilmesini sağlar. Bu alaşımlar, iletim kayıplarını en aza indirir ve enerji verimliliğini artırmaktadır.
- Denizcilik endüstrisi: Cu-Ni alaşımları denizcilik endüstrisinde, özellikle gemilerin elektriksel sistemlerinde ve denizaltı kablolarında yaygın olarak kullanılır. Bu alaşımlar, yüksek tuzluluk seviyelerine dayanıklıdır ve korozyona karşı direnç göstermektedir.
- Kimya endüstrisi: Kimya endüstrisinde, asitlere ve diğer kimyasallara dayanıklı elektriksel bileşenlerin üretiminde Cu-Ni alaşımları kullanılmaktadır.

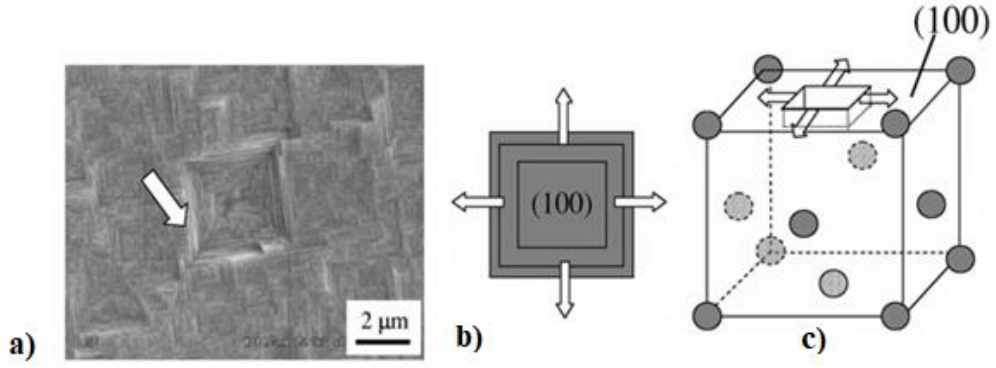
1.1.3. Tek kristalli Cu[100] metalinin kullanım alanları

Tek kristalli Cu[100] metali, kristalografi ve malzeme biliminde büyük bir öneme sahiptir. Özellikle [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır, çeşitli uygulamalarda kritik bir rol oynamaktadır. [100] kristalografik yönelim, bir kristalin atom düzeninin bir yönlendirilmiş düzlem veya hizada bulunduğu bir kristal yapıyı ifade eder. Tek kristalli bakırın [100] kristalografik yönelimi, bakır kristal yapılarının atomların dizilişinin $\langle 100 \rangle$ yönünde olduğu bir özelliği temsil eder. Şekil 1.1 ve Çizelge 1.1'de

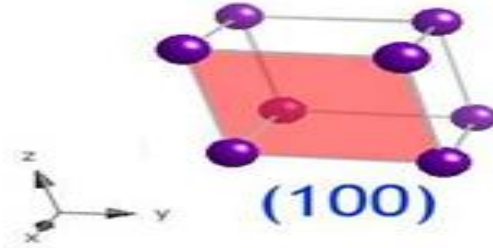
[100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır metalinin kristalografik yönelimi, kristal yapısı, kafes sabiti ve yoğunluğu verilmiştir(Material, technologie & kristalle GmbH).

Çizelge 1.1. Tek kristalli Cu [100] metalinin kristal yapısı

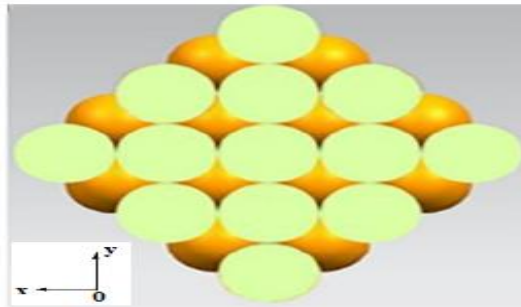
Numune	Oryantasyon	Yapı	Kafes Sabiti (nm)	Yoğunluk (g/cm ³)
Bakır	[100]	Kubik (YMK)	0,361	8.96



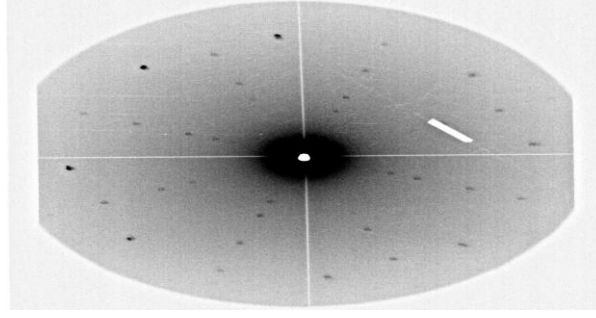
Şekil 1.1. Tek kristalli Cu [100], a) FE-SEM görüntüsü b) Morfolojinin şematik gösterimi. c) Alt düzlem gösterimi (Kondo ve ark., 2006).



Şekil 1.2. [100] kristalografik yönelimli kübik yapı (Peter ve ark., 2023)



Şekil 1.3. [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır (Yang ve ark., 2023)



Şekil 1.4. Tek kristalli Cu[100] metalinin Laue X-ışını görüntüsü (Mateck)

Şekil 1.4’ de görüldüğü üzere Laue X-ışını geri saçılma yöntemi ile [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır metalinin görüntüsü alınmıştır. Bu yöntem, kristal yapıların incelenmesi için kullanılan bir tekniktir. Bu yöntemde, monokromatik bir X-ışını ışın demeti bir kristalden geçirilir ve kristal örnek tarafından saçılan X-ışınları kaydedilir. Bu saçılan X-ışınları, kristalin içyapısına dair bilgiler içermektedir.

Laue X-ışını geri saçılma yöntemi aşağıdaki adımlardan oluşmaktadır:

- Monokromatik X-ışını üretimi: İlk olarak, bir X-ışını kaynağı kullanılarak monokromatik bir X-ışını demeti üretilir. Monokromatik olmaları, tüm X-ışınlarının aynı enerjiye sahip olmaları anlamına gelmektedir.
- Kristalden geçirme: Bu monokromatik X-ışını demeti bir kristalden geçirilir. Kristal, düzenli bir şekilde dizilmiş atomlardan oluşur. X-ışınları, kristalin bu düzenli yapılarından geçerken saçılmaktadır.
- Geri saçılma: Kristaldeki atomlar, X-ışınlarını geri saçar. Bu geri saçılan X-ışınları, orijinal monokromatik demetle karşılaştırılarak kaydedilmektedir.
- Laue deseni oluşturma: Saçılan X-ışınları, bir ekran veya dedektör tarafından kaydedilir. Bu kayıtlar, Laue deseni olarak adlandırılan bir deseni oluşturur. Laue deseni, kristalin içyapısına dair bilgiler içerir çünkü saçılan X-ışınları, kristaldeki atomların düzenli konumlarına bağlı olarak değişiklik göstermektedir.
- Veri analizi: Elde edilen Laue deseni, matematiksel ve bilgisayar tabanlı yöntemler kullanılarak analiz edilir. Bu analiz, kristalin atomik düzenini ve oryantasyonunu belirlemeye yardımcı olmaktadır.

Laue X-ışını geri saçılma yöntemi, özellikle kristal yapıların belirlenmesi için kullanılır. Bu, malzeme bilimi, kimya ve biyokimya gibi birçok bilim alanında önemli bir araştırma tekniğidir.

[100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Cu[100] metalinin kullanım alanları aşağıdaki maddelerden oluşmaktadır:

- Elektronik ve mikroçip üretimi: [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır, elektronik endüstrisinde mikroçipler, yarıiletken cihazlar ve entegre devrelerin üretiminde kullanılır. Bu yönelim, elektriksel ve termal iletimde üstün performans sağlamaktadır.
- Lazer ve optik uygulamalar: Tek kristalli bakırın [100] yönelimi, yüksek hassasiyetli lazer sistemlerinde kullanılır. Optik aletlerde, lazer ışığını yönlendirmek ve odaklamak için bu kristalin özellikleri önemlidir.
- Süper iletkenlik araştırmaları: Süperiletkenlik çalışmalarında, [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır, süperiletkenlik özelliklerinin incelenmesinde kullanılır. Bu, enerji iletimi ve manyetik alan uygulamaları için büyük önem taşımaktadır.
- Nanoteknoloji: Nanoteknoloji alanında, [100] tek kristalli bakır, nanoyapılardaki büyüme ve karakterizasyon çalışmalarında kullanılır. Atom ölçeğindeki malzeme işlemeye ve incelemeye katkı sağlamaktadır.
- Yüksek hızlı veri iletimi: [100] kristalografik yönelimli tek kristalli bakır, yüksek frekansta veri iletimi uygulamalarında yaygın olarak kullanılır. Bu, veri aktarımının hızlı ve güvenilir olmasını sağlamaktadır.

1.2. Al-Si Alaşımları ve Tek Kristalli Si[100] Kullanım Alanları ve Önemi

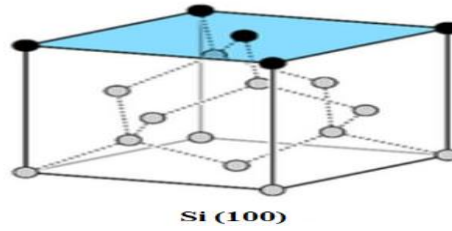
Alüminyum-silisyum (Al-Si) alaşımları, modern mühendislikte önemli bir rol oynamakta olan ve çok çeşitli uygulamalarda kullanılan malzemelerdir. Bu alaşımlar, alüminyumun hafifliğini ve dayanıklılığını silisyumun özellikleri ile birleştirerek çeşitli sektörlerde geniş bir kullanım yelpazesi sunar. Al-Si alaşımları, bu özel kombinasyon sayesinde elektronikten otomotiv endüstrisine, havacılıktan inşaata kadar birçok alanda talep görmektedir. Al-Si alaşımlarının temel özelliklerinden biri, düşük yoğunluğa sahip olmalarıdır. Bu, özellikle hafiflik ve taşınabilirlik önemli olduğu durumlarda tercih edilmelerini sağlamaktadır. Ayrıca, bu alaşımlar mükemmel korozyon direncine sahiptirler, bu da uzun ömürlü ve dayanıklı malzemeler olarak kullanılmalarını desteklemektedir. Mekanik özellikler açısından, Al-Si alaşımları yüksek mukavemet ve sertlik seviyeleri sunar. Bu özellikleri sayesinde, yapısal parçalarda kullanıldıklarında

mükemmel performans sergilemektedirler. Özellikle otomotiv sektöründe motor parçaları, pistonlar ve dişli kutuları gibi kritik bileşenler için ideal bir seçenek olarak kabul edilirler. Al-Si alaşımları ayrıca iyi ısı iletimi ve elektriksel iletkenlik özelliklerine sahiptirler. Bu, elektronik ve elektrik uygulamalarında tercih edilmelerini sağlar. Ayrıca, bu alaşımların döküm kabiliyeti yüksektir, bu da karmaşık Şekillerin ve parçaların üretimini kolaylaştırmaktadır. Bu özel malzeme, hafiflik, mukavemet ve dayanıklılığı bir araya getirerek birçok endüstrinin ihtiyaçlarına cevap vermektedir. Al-Si alaşımlarının sürekli olarak geliştirilmesi ve optimize edilmesi, gelecekte daha fazla uygulama ve inovasyon potansiyeli sunmaktadır. Çizelge 1.3' te [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Si'nin kristal yapısının değerleri gösterilmiştir.

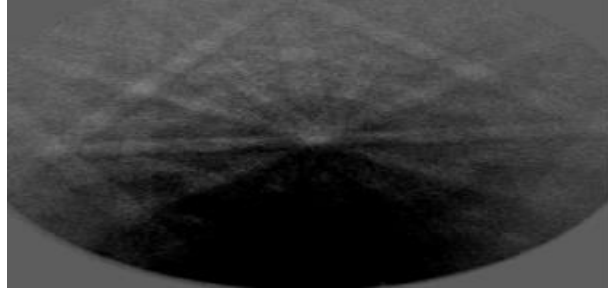
Çizelge 1.2. Tek kristalli Si[100]'nin kristal yapısı (Material, technologie & kristalle GmbH)

Numune	Oryantasyon	Yapı	Kafes Sabiti (nm)	Yoğunluk (g/cm ³)
Silisyum	[100]	Kübik	0.543	2.329

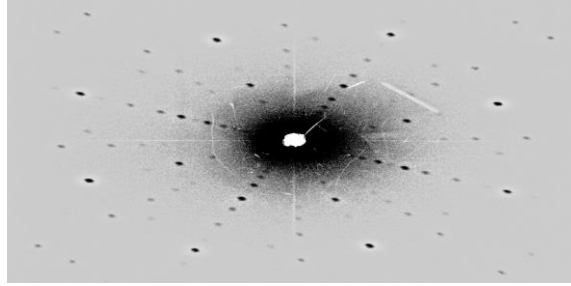
Tek kristalli silisyum (Si), [100] kristalografik yönelime sahip yarı iletken bir malzeme olarak özellikle mikroelektronik endüstrisinde temel bir rol oynamaktadır. Bu yönelime sahip silisyum kristalleri, başta transistörler olmak üzere birçok mikroelektronik bileşenin yapısında yaygın olarak kullanılmaktadır. Silisyumun düzenli kristal yapısı, yüksek elektriksel iletkenlik ve kontrollü yarıiletken özellikler sunarak bilgisayar çipleri ve diğer elektronik aygıtların temelini oluşturur. Şekil 1.5'te, [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli silisyumun kristalografik yapısı gösterilmektedir.



Şekil 1.5. Tek kristalli Si[100]'nin kristalografik yapısı (Vogl ve ark., 2015)



Şekil 1.6. Tek kristalli Si[100]'nin SEM görüntüsü (Mishra ve ark., 2008)



Şekil 1.7. Tek kristalli Si[100] (Mateck)

Şekil 1.7' de görüldüğü üzere Laue X-ışını geri saçılma yöntemi ile [100] kristalografik yönelimli tek kristalli silisyum yarı metalinin görüntüsü alınmıştır. Bu yöntem, kristal yapıların incelenmesi için kullanılan bir tekniktir. Bu yöntemde, monokromatik bir X-ışını ışın demeti bir kristalden geçirilir ve kristal örnek tarafından saçılan X-ışınları kaydedilir. Bu saçılan X-ışınları, kristalin iç yapısına dair bilgiler içermektedir. Al-Si alaşımları, genellikle hafif, güçlü ve korozyona dayanıklı özellikleri nedeniyle bir dizi farklı endüstride kullanılmaktadır. Al-Si alaşımlarının kullanım alanları ve bazı örnekler:

- Otomotiv endüstrisi: Al-Si alaşımları, motor parçaları, şanzıman gövdeleri, silindir kafaları ve tekerlekler gibi otomotiv bileşenlerinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu alaşımlar, hafif olmaları ve yüksek mukavemetleri sayesinde yakıt verimliliğini artırmaya yardımcı olmaktadır.
- Uçak endüstrisi: Havacılık sektöründe, Al-Si alaşımları motor parçaları, gövdeler ve diğer yapısal bileşenlerde kullanılmaktadır. Hafif olmaları, uçakların toplam ağırlığını azaltırken güçlü olmaları da mühendislik açısından önemlidir.
- Elektrik ve elektronik Endüstrisi: Bu alaşımlar, elektrik devreleri, konektörler ve elektronik kasa bileşenleri gibi uygulamalarda kullanılmaktadır. Yüksek iletkenlikleri ve işlenebilirlikleri nedeniyle tercih edilmektedir.

- Ambalaj endüstrisi: Al-Si alaşımları, gıda endüstrisinde kullanılan kaplama malzemelerinde ve ambalaj sektöründe kullanılmaktadır. Bu alaşımların korozyona karşı dayanıklılığı ambalaj malzemeleri için önemlidir.
- İnşaat malzemeleri: Al-Si alaşımları, inşaat sektöründe pencereler, kapı çerçeveleri ve diğer yapısal bileşenlerde kullanılmaktadır. Hafiflikleri ve dayanıklılıkları, yapı malzemeleri için tercih edilmelerine neden olmaktadır.

Al-Si alaşımları, geniş bir endüstri yelpazesinde kullanılır ve genellikle alüminyumun hafifliği ile silisyumun eklenmesiyle elde edilen avantajlı özelliklerini bir araya getirir. Bu özellikleri sayesinde, farklı endüstrilerde yaygın şekilde tercih edilmektedir. Tek kristalli Si[100], elektronik endüstrisinde geniş bir kullanım alanına sahiptir. Tek kristalli silisyumun atomik yapısı homojen ve düzenli bir şekildedir.

Tek kristalli silisyumun kullanım alanları:

- Yarı iletken ve elektronik endüstrisi: Silisyum, yarı iletken özellikleri nedeniyle mikroçipler, transistörler, entegre devreler ve diğer elektronik bileşenlerin yapımında yaygın olarak kullanılmaktadır. Tek kristalli Si, özellikle mikroelektronik üretiminde, yüksek performanslı ve hassas cihazların üretiminde temel bir malzeme olarak kullanılmaktadır.
- Güneş enerjisi: Tek kristalli Si, fotovoltaik (güneş hücresi) panellerinin yapımında ana malzeme olarak kullanılır. Güneş hücreleri, güneş enerjisini elektriğe dönüştürmek için kullanılan cihazlardır ve bu alanda tek kristalli silisyum oldukça etkilidir.
- Lazer teknolojisi: Tek kristalli Si, lazerlerin yapımında da kullanılır. Yüksek saflıkta ve homojenliğindeki kristaller, lazerlerin istikrarlı ve yüksek performanslı olmasını sağlar.
- İleri teknoloji uygulamaları: Silisyum'un yarı iletken özellikleri, ileri teknoloji alanlarında, mikroelektronik cihazlardan sensörlere kadar geniş bir yelpazede kullanılmasını sağlar.

Tek kristalli Si, elektronığın temel malzemelerinden biri olarak kabul edilir ve bu özellikleri sayesinde modern teknolojinin birçok yönünde kullanılmaktadır.

1.3. Bilimsel Çalışmalara ve Sanayideki Üretim Aşamalarına Katkısı

Cu[100], Cu-Ni, Si[100] ve Al-Si alaşımları endüstride yaygın olarak kullanılmaktadır. Cu[100] ve Cu-Ni alaşımları, yüksek elektriksel ve termal iletkenlikleri nedeniyle elektronik ve yarı iletken endüstrisinde, ayrıca dayanıklılık ve korozyon direnci gerektiren denizcilik, otomotiv ve havacılık sektörlerinde tercih edilirken, mekanik özelliklerinin geliştirilmesi özellikle yüksek sıcaklıkta çalışan parçalar için önemlidir. Si[100] yarı iletken endüstrisinde en yaygın kullanılan kristal yönelimlerinden biri olup, entegre devreler, mikroeletromekanik sistemler (MEMS) ve güneş panellerinde kullanılır; sertlik, elastisite modülü ve yüzey özelliklerinin belirlenmesi üretim süreçlerinin optimizasyonu açısından kritik öneme sahiptir. Al-Si alaşımları, otomotiv ve havacılık sektöründe hafiflik ve yüksek mukavemet avantajları sunarak motor parçaları, pistonlar ve silindir kapaklarında aşınma direnci ve döküm özellikleri nedeniyle yaygın olarak kullanılır. Nanoindentasyon yöntemi, mikrometre ve nanometre ölçeğinde malzeme sertliği ve elastisite modülü gibi mekanik parametreleri belirlemede hassas ölçümler sağlayarak kaplamalar, ince filmler ve alaşımların yerel deformasyon davranışlarını analiz etmeye olanak tanır ve özellikle mikroelettronik ile biyomalzeme uygulamalarında kritik bir test yöntemi olarak öne çıkmaktadır. Bu yöntemle elde edilen veriler, nano ve mikro ölçekli imalat süreçlerinde kalite kontrol ve malzeme optimizasyonu için önemli olup, sertlik, elastisite modülü ve akma dayanımı gibi mekanik özelliklerin belirlenmesinde kullanılır. Moleküler dinamik (MD) simülasyonları ise nanoindentasyon deneylerini atomik seviyede destekleyerek atomik deformasyon mekanizmalarını incelemeyi, fiziksel testlerin yerine sanal ortamda malzeme özelliklerini analiz ederek maliyet ve zaman tasarrufu sağlamayı ve yüksek sıcaklık, yüksek basınç veya aşındırıcı ortamlar gibi zorlu koşulları laboratuvar ortamından simüle etmeyi mümkün kılmaktadır. Özellikle Cu[100], Cu-Ni, Si[100] ve Al-Si alaşımlarının nanoindentasyon mekanizmalarının anlaşılmasında MD simülasyonları kritik bir rol oynayarak malzeme tasarımı ve süreç optimizasyonunu daha hızlı ve verimli hale getirmektedir. Çizelge 1.3 'te nanoindentasyon ve MD Simülasyon ile gerçekleştirilen deneylerin analizleri, karşılaştırılması ve birleştirilmesi ile ilgi avantaj ve dezavantajlar sunulmuştur.

Çizelge 1.3. Laboratuvar deneyleri ve MD simülasyonların avantaj ve dezavantajları

Yöntem	Avantajlar	Dezavantajlar
Laboratuvar deneyleri	Gerçek deneysel veriler sunar, doğrudan ölçüm yapılabilmektedir.	Sınırlı atomik bilgi sağlar, cihaz hassasiyeti gerektirir.
MD Simülasyon analizleri	Atomik düzeyde deformasyon mekanizmalarını açıklar, çok sayıda senaryo test edilebilir.	Gerçekçi modelleme için uygun parametreler gerektirir, yüksek hesaplama gücü ister.
Birleştirilmiş Yöntemler	Hem deneysel hem de atomistik verileri içerir, mekanik özelliklerin kapsamlı analizi sağlanır.	Büyük veri analizi ve yüksek işlem kapasitesi gerektirir

Nanoindentasyon ve moleküler dinamik simülasyonlarının birleşimi, ürün geliştirme sürecini hızlandırarak yeni malzemelerin daha kısa sürede geliştirilmesini sağlamaktadır, simülasyonlar sayesinde fiziksel deneylerin sayısı azaltılarak laboratuvar maliyetlerinden tasarruf edilir ve havacılık ile otomotiv sektörlerinde Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının mukavemet-ağırlık oranlarının optimize edilmesiyle yakıt verimliliği ve performans avantajı elde edilmektedir. Yarı iletken endüstrisinde Si[100] yüzeylerinin mekanik özelliklerinin hassas şekilde belirlenmesi, mikroçip üretiminde hata payını azaltarak verimi artırırken, aşınmaya, sıcaklığa ve korozyona dayanıklı malzemelerin geliştirilmesi, ticari ürünlerin ömrünü uzatarak daha sürdürülebilir bir üretim yaklaşımı sunmaktadır. Bu bağlamda, nanoindentasyon ve MD simülasyonlarının entegrasyonu Cu[100], Cu-Ni, Si[100] ve Al-Si alaşımlarının mekanik özelliklerinin belirlenmesini tasarımını daha verimli hale getirip endüstriyel üretim süreçlerini optimize ederek, ekonomik ile ticari faydalar sağlamaktadır. Özellikle havacılık, otomotiv, elektronik ve biyomalzeme sektörlerinde bu yöntemlerin kullanımı, daha hafif, daha dayanıklı ve daha yüksek ve rekabet avantajı kazandırmaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Al-Si ve Cu-Ni alaşımları, endüstriyel uygulamalarda geniş bir kullanım alanına sahiptir. Bu alaşımların mekanik özelliklerinin karakterizasyonu, malzemenin performansını anlamak ve iyileştirmek için önemlidir. Nanoindentasyon, malzeme mekaniğinin karakterizasyonu için güçlü bir araç olup, özellikle mikro ve nanoyapılarda yapılan incelemelerde büyük bir öneme sahiptir. Bu yöntem, malzeme yüzeyine uygulanan mikroskobik bir yük ile malzemenin sertlik, elastisite, viskozite, yorulma direnci gibi mekanik özelliklerini belirlemek için kullanılır. Al-Si ve Cu-Ni alaşımlarının nanoindentasyon ile incelenmesi, malzeme özelliklerinin karakterizasyonu ve performansın anlaşılması için oldukça değerlidir. Al-Si alaşımları, otomotiv ve havacılık endüstrilerinde kullanılan yüksek mukavemetli malzemelerdir ve nanoindentasyon, birim hacim başına düşen yük altında malzemenin tepki verme şeklinin ve sertliğinin belirlenmesine olanak sağlar. Cu-Ni alaşımları ise denizcilik, elektrik ve elektronik endüstrilerinde kullanılır ve özellikle tuzlu su ortamında dayanıklılıklarının belirlenmesi nanoindentasyon ile mümkün olur. Bu yöntem, malzeme bilimi ve mühendislik alanlarında kullanılan birçok farklı malzemenin mekanik özelliklerini anlamak için temel bir araç olarak kabul edilir. Yüksek çözünürlüklü nanoindentasyon cihazları, malzemelerin mikro ve nanoyapılarındaki değişiklikleri inceleyerek, malzeme tasarımı ve üretiminde önemli bir rol oynar. Al-Si ve Cu-Ni gibi alaşımların nanoindentasyon ile karakterizasyonu, bu alaşımların mekanik özelliklerinin anlaşılması ve iyileştirilmesi için kritik öneme sahiptir. Moleküler dinamik (MD) Simülasyon ile yapılan indentasyon yöntemi, atom ve moleküllerin hareketini modelleyerek malzemelerin davranışlarını anlamada kritik bir rol oynar. MD simülasyon yöntemi, indentasyon deneyleriyle birleştirildiğinde, malzemenin mekanik özelliklerini belirlemede önemli bir araç haline gelir. Bu birleşim, malzeme yüzeyine uygulanan kuvvet altında malzeme tepkisini inceleyerek sertlik, elastisite, deformasyon mekaniği ve plastisite gibi mekanik özellikleri anlamak için kullanılır. Bu birleşik metodoloji, malzeme mühendisliği, nanoteknoloji ve endüstriyel uygulamalarda malzeme karakterizasyonunda geniş bir potansiyele sahiptir. MD simülasyon ile indentasyon deneylerinin birleştirilmesi, malzeme davranışının daha derinlemesine anlaşılmasını sağlar ve malzeme tasarımı, geliştirme süreçleri ve

endüstriyel uygulamalar için değerli bir analitik araç sunmaktadır. Nanoindentasyonun bu alaşımların endüstriyel kullanımlarına ve dayanıklılıklarına yönelik araştırmalarda, malzeme mühendisliği ve ileri teknoloji uygulamalarında önemli bir araç olarak kabul edilmektedir.

Bochicchio ve ark. (2013), Al-Mg ve Al-Cu alaşımlarında dislokasyon yayılma mekanizmasını nanoindentasyon kullanarak incelemişlerdir. Alaşımlarda Mg veya Cu atomlarının varlığının dislokasyon yayılmasını etkilediği ve Al ve Cu atomları arasındaki uyumsuzluğun Cu atomlarının alaşım yüzeyinin altında kümeler halinde birikmesine neden olduğunu göstermişlerdir.

Ehtemam-Haghighi ve ark. (2017), Fe ve Ta içeren Ti-tabanlı alaşımların mekanik özelliklerini araştırmıştır. Nanoindentasyon testlerinin sonuçları, çalışılan tüm alaşımların daha yüksek sertlik ve daha iyi aşınma direnci sergilediğini göstermiştir. Alaşımlar arasında, β fazının en düşük konsantrasyonuna sahip olan Ti-8Fe, en yüksek indirgenmiş elastik modül değerine sahipken, baskın bir β fazı mikro yapısına sahip olan Ti-10Fe-10Ta, çalışılan alaşımlar arasında en küçük, en düşük indirgenmiş Young modülü değerine sahip olduğunu göstermişlerdir.

Rahman ve ark., (2015), nikel bazlı süperalaşımı (ERBO-1) nanoindentasyon yöntemiyle incelemiştir. Re'nin dendritik çekirdeğe segregasyonunun, γ ve γ_0 fazlarına kıyasla daha düşük sertliğe ve daha düşük sertliğe sahip TCP fazlarının (μ fazı) çökmesine yol açtığını bulmuştur. Modül μ fazının kapalı paket kristal yapısı ve yüksek miktarda W, Re, Mo, Cr gibi refrakter elementler içermesi nedeniyle daha sert olduğu tespit etmişlerdir.

Wang ve ark. (2000), nanoindentasyon ile dökme Zr-Al-Ti-Cu-Ni amorf alaşımının kristalleşme ve nanoindentasyon davranışını incelemişlerdir. Farklı kristalleşme yollarının karmaşıklığına rağmen, Zr bazlı BAA'daki ana nihai kristalleşmiş ürünün Zr_2Cu olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca, daha yüksek sıcaklıkta uzun süreli izotermal tavlama işlemi sırasında Zr_2Ni 'den Zr_2Cu 'ya bir faz dönüşümünün gerçekleştiği gözlemlenmiştir.

Huanga ve ark. (2011), NiTi ince film malzemesinin karakterizasyonunu nanoindentasyon yöntemiyle araştırmıştır. Sıcaklıklar Martensit film östenit filminden daha yumuşaktır. Aynı yükte, martensit filmin maksimum çentik derinliği östenit filminkinden daha büyüktür, bu da filmin aynı yük altında daha fazla akacağını gösterir. Buna bağlı olarak, martenzit filmlerin Young modülü ve sertlik değerleri östenit filmlerden daha küçük olduğunu göstermişlerdir.

Zhang ve ark. (2006), nanoindentasyon sonucunda tek kristalli Cu-Al-Ni'nin Şekil hafızalı alaşımını incelemiştir. Bu çalışmada, tek kristalli Cu-Al-Ni'nin belirli bir maksimum gerilime kadar döngüsel yükleme ile sözde elastik bir davranış (yani Şekil değiştirip orijinal şekline geri dönebileceği) sergilediğini göstermişlerdir.

Chudoba ve ark. (2006), Berkovich ve Cube-Corner tipi indenter ile nanoindentasyon sonuçlarını karşılaştırılmışlardır. Aynı kalibrasyon prosedürlerinin indenter şeklinden bağımsız olarak uygulanabileceği doğrulanmıştır. Ayrıca, indentasyon modülü sonuçlarının diğer yöntemlerle elde edilen referans değerlerle iyi bir uyum içinde olduğu ve çok sert bir sementte karbürün elastisite modülünün referans değeri ile iyi bir uyum olduğunu göstermişlerdir. Ayrıca, safir ve erimiş silikadaki çatlakların modül sonuçları üzerinde önemli bir etkisi olmadığını göstermişlerdir.

Groenou ve ark. (1989), tek kristal MnZn ferrit iş parçası üzerinde üç kristalografik düzlemde $[(1\ 0\ 0), (0\ 1\ 1) \text{ ve } (1\ 1\ 1)]$ küresel girinti ile kayma modellerini araştırmışlardır.

Khan ve ark. (1992), Vickers ve küresel girintiler (0,4 mm çap) kullanarak $(1\ 0\ 0)$, $(0\ 1\ 1)$ ve $(1\ 1\ 1)$ üzerinde tek bir kristal MgO'nun girintisindeki deformasyon davranışını ve sertliğini incelemiş ve kristal yöneliminin girinti çatlak desenleri üzerinde belirgin bir etkisi olduğunu açıklamıştır.

McElhaney ve ark. (1998), Berkovich indenter ile polikristal bakır ve tavllanmış $(1\ 1\ 1)$ tek kristal bakırda gerinimle sertleştirilmiş taneler üzerinde nanoindentasyon deneyleri gerçekleştirmişlerdir. Malzeme yüzeyinde yığılma ve batma etkileri göstererek indenter ile numune arasında öngörülen temas alanının indenterin kesit alanından farklı olmasına neden olduğunu göstermişlerdir. Bu etkiyi hesaba katmak için bir indenter uç şekli kalibrasyon tekniği geliştirdiklerini göstermişlerdir.

Lim ve Chaudhri (2002), küresel bir indenter (yarıçap 200 μm) kullanarak polikristal bakırın tek tek tanelerinin $[(1\ 1\ 0) \text{ ve } (1\ 1\ 1)]$ yüzeyleri] mikroindentasyon sertliğini araştırmış ve farklı yönelimlere sahip bakırın indentasyon sertliğinin çok benzer olduğunu tespit etmişlerdir.

Nix ve Gao (1998), geometrik olarak gerekli dislokasyonları (GND'ler) dikkate alarak kristal malzemeler için girinti boyutu etkisini modellemiştir. Bu modeli gerinim gradyan plastisitesi için matematiksel bir ilişki türetmek için kullanmışlar ve literatürde bildirilen nanoindentasyon sonuçlarıyla iyi bir uyum göstermişlerdir.

Voyiadjis ve çalışma arkadaşları (Dorgan ve Voyiadjis, 2003; Rashid vd., 2004; Voyiadjis ve Abu Al-Rub, 2005; Abu Al-Rub ve Voyiadjis, 2004, 2006), yerel ve yerel

olmayan terimler arasında bağlantıya izin vermek için değişken uzunluk ölçeğine sahip bir gerilme gradyanı tek kristal plastiklik teorisi geliştirmiştir. Elde ettikleri sonuçlar, iridyum gibi malzemeler üzerindeki deneysel verilerle iyi uyum göstermektedir.

Huang ve ark. (2006), keskin bir konik indenter kullanarak nanoindentasyon ve mikroindentasyon arasındaki sertliğe karşı derinlik verilerindeki farklılıkları araştırmıştır. Nanoindentasyon ve mikroindentasyon arasındaki GND dağılımlarındaki olası farklılıklar, içsel kafes direnci, yüzey pürüzlülüğü ve GND'lerle ilişkili uzun menzilli gerilmeler dahil olmak üzere tutarsızlıktan sorumlu birkaç faktör olduğunu göstermişlerdir.

Cheong ve ark., (2005), mikroyapısal ve deformasyonla ilgili uzunluk ölçeklerinin Cu ve Al polikristallerinin davranışı üzerindeki etkisini simüle etmek için yerel olmayan bir kristalografik model kullanmış ve deneysel gözlemlerle tutarlı simülasyon sonuçları elde etmiştir.

Qu ve ark., (2006), küresel çentiklemede çentik boyutu etkisini Taylor dislokasyon modelinden oluşturulan mekanizma tabanlı gerinim gradyan plastisitesi ile araştırmışlardır. Elde ettikleri sonuçlar, küresel bir indenter kullanarak indentasyon sertlik değerlerinin hesaplamışlardır.

Qu ve ark., (2006), Taylor dislokasyon modelinden oluşturulan mekanizma tabanlı gerinim gradyan plastisitesi aracılığıyla küresel çentikte çentik boyutu etkisini araştırmıştır. Elde ettikleri sonuçlar, küresel bir girinti kullanarak girinti sertliği değerlerinin, (Nix ve Gao, 1998) tarafından keskin bir konik girinti için verilen değerlerden farklı olduğunu göstermiş, bu da girinti geometrisinin girinti sertliği üzerinde güçlü bir etkisi olduğunu göstermiştir.

Zamiri ve ark., (2007), tek kristal akma yüzeyinin modifikasyonu yoluyla hesaplama açısından verimli bir kristal plastisite teorisi geliştirmiştir. Clayton ve McDowell (2003) çok ölçekli hacim homojenizasyonuna dayalı polikristal elastoplastisitenin kinematik bir formülasyonunu geliştirmiştir. Gurtin ve Anand (2004 ve 2005) plastik spin yokluğunda izotropik viskoplastisite için bir gerinim gradyanı tek kristal plastisite teorisi geliştirmişlerdir.

Kum, (2005), üç kristalografik oryantasyon üzerinde MD simülasyonları gerçekleştirmiştir: $[1\ 0\ 0]$, $[1\ 1\ 0]$ ve $[1\ 1\ 1]$ nikel tek kristallerinin yüzeylerindeki anizotropik davranışı, girinti boyutu ve hızının bir fonksiyonu olarak araştırmak için.

Sonuçlar, anizotropik elastik-plastik deformasyonların girinti boyutuna, hıza ve kristal yönelimine bağlı olduğunu göstermişlerdir.

Tsuru ve Shibutani (2007), bir bakır iş parçasının (0 0 1), (0 1 1) ve (1 1 1) kristalografik düzlemleri arasındaki elastik-plastik tepkiyi karşılaştırarak kristal plastisitesini araştırmak için nanoindentasyonun MD simülasyonlarını gerçekleştirmişlerdir. MD simülasyonları ile deneysel veriler arasında doğrudan karşılaştırma yapmanın mümkün olmadığı belirtilebilir çünkü MD simülasyonlarındaki girinti derinliği son derece küçük (birkaç angstrom mertebesinde) ve girinti hızı son derece yüksek olduğu için nanoindentasyon deneylerinin aynı koşullar altında yapılması mümkün olmadığı göstermişlerdir.

Qiu ve ark., (2001), tek kristal tungstenin yönlenme etkisini çok ölçekli, hiyerarşik bir çerçeve kullanarak araştırmış ve mezoskal ölçekteki gerilme gradyanı plastisite teorisini mikro ölçekteki Taylor dislokasyon modeline bağladıklarını göstermişlerdir.

Wang ve ark., (2004), konik bir girinti kullanarak üç yönde [(0 1 1), (1 0 0) ve (1 1 1)] tek kristal bakır numuneler üzerinde 3D elastik-viskoplastik kristal plastisite FEM kullanarak nano girinti simülasyonları gerçekleştirmiş ve sırasıyla (0 1 1), (1 0 0) ve (1 1 1) yüzeylerinde iki kat, dört kat ve altı kat simetriler rapor etmiştir. Yük-yer değiştirme ilişkilerinde, deneysel ve simülasyon kuvvetleri arasında büyüklük sırası farkı olduğunu göstermişlerdir.

Lai ve ark., (2012), bakırın nanometrik kesimi için 3D-MD simülasyon programını kullanarak kritik eğim açısını bulmak üzere moleküller dinamik simülasyonu programı kullanılarak deneyi gerçekleştirilmiştir. Yaptıkları çalışmada talaş oluşumunu tahmin etmek için atomların kesme yönünde yer değiştirmesine dayanan yeni bir yaklaşım metodu kullanmışlardır. Bu nanometrik kesimde talaş oluşumu için minimum eğim açısının $65^\circ - 70^\circ$ olduğu ve bakır malzemesinin yüzeyinin altında oluşan deformasyonların çoğunlukla atomların istifleme ve dislokasyon hatalarından dolayı olduğunu gözlemlemişlerdir. Ayrıca bakırın sınırlı kesme derinliğine göre minimum takım kenar yarıçapının 10 nm'den az olmaması gerektiğini tespit etmişlerdir.

Zhang ve ark., (2015), bi-kristal yapısına sahip Cu ile MD simülasyonu olan lammps kodlama programını kullanarak bir çalışma gerçekleştirdiler. İki taneyi ayıran rastgele yüksek açıyı tane sınırı olarak kabul ettiler. Bakırın yüzeyinin altında yatan deformasyon mekanizmalarının atomistik detaylarını açıklamaya odaklandılar. Nano boyutta yapılan çizik işlemi tane sınırına ulaşmadan önce dislokasyonların oluştuğu ve diğer tane sınırındaki atomlarda dislokasyonların çekirdeklendiğini buldular. Ayrıca tane

sınırının, tane sınırının çevresinde daralan ve sıkışan çizik oluşu üzerindeki etkileri incelediler. Buna ek olarak, çizik süreci altında tane sınırı yer değiştirdiğini gösterdiler; bu mekanizmanın çizilme yönüne büyük ölçüde bağlı olduğunu tespit etmişlerdir.

Cho ve ark., (2015), sert bir Ni ucu kullanarak kazıma Cu simülasyonu sırasında atomik ölçekte bir tutma-kayma özelliği gözlemledi. İndetasyon sırasında dislokasyonun çekirdeklenmesini araştırmışlardır.

Mulliah ve ark., (2004), MD simülasyonu kullanarak gümüş bir yüzeyi çentikleyen ve çizen piramidal bir elmas ucun atomik ölçekli iki yüzey arasındaki sürtünme(yapış-kayma) olgusunu araştırmışlardır.

Kizler ve Schmauder, (2007), ultra-sert karbür tabakayı moleküller dinamik (MD) simülasyonu ile indetasyon yöntemini kullanarak simüle edilen malzemenin deformasyonunu araştırmışlardır.

Tupaj ve ark., (2020), otomobil silindir döküm gömleği üretimi için yeni çok bileşenli hiperötektik silümin geliştirildi. Kimyasal bileşim ve katılma koşulları, çeşitli fazların kristalleşmesine olanak tanıdı. Krom, vanadyum ve mangan eklemesi, silisyum kristallerinin ötesinde yüksek değerlere sahip yeni fazların oluşumunu sağladı. Bu yeni malzeme, otomobil silindir döküm gömlekleri için uygunluğunu nanoindentasyon testleri ile doğrulayarak sert parçacıklara karşı daha iyi direnç gösterdiğini ortaya çıkarmışlardır.

Gwalani ve ark., (2020), nanoindentasyon deneyleri ile kayma deformasyonunun mikroyapı üzerindeki etkilerini araştırmışlardır. Silisyum fazının hacim oranının deformasyon sürecindeki değişiklikleri üzerinde yoğunlaşmışlardır. Bulgular, başlangıçtaki alaşım bileşiminin deformasyon sonrası tane boyutunu ve mekanik özellikleri nasıl etkilediğini göstermektedir. Bu çalışma, hafif metalik alaşımlarda aşırı kesme deformasyonunun mikroyapısal rafinasyon üzerindeki değerini vurgulayarak, endüstriyel uygulamalar için önemli bir perspektif sunmaktadır.

Kulej ve ark., (2011), yaptıkları bu çalışmada Cu/Ni çok katmanlı kaplamaları incelemişlerdir. Farklı alt tabaka kalınlıklarının incelendiği deneyler, sertlik üzerinde belirgin bir etkiye sahip olduğunu göstermiştir. En iyi performans, Cu/Ni alt tabaka kalınlıklarının belirli bir oranda olduğu yapıda gözlemlenmiştir. Elde edilen yüksek sertlik ve düşük pürüzlülük, bu kaplamaların aşınmaya karşı dirençli uygulamalarda potansiyel kullanımını göstermiştir. Yapılan testler ayrıca, sertlik ve elastik modül değerleriyle alt tabaka kalınlıkları arasında ilişki olduğunu ve daha ince alt tabaka kalınlıklarının bu özellikleri artırdığını açıklamışlardır.

Casal ve Alcalá (2005), nanoindentasyon deneylerinden elde edilen mekanik özelliklerin çıkarılması için mevcut analizleri genişletmişlerdir. Vickers ve Berkovich indentasyon testlerinin detaylı boyutsal analizi ve sonlu eleman simülasyonlarına dayanarak, çalışma, tek bir yük-penetrasyon derinliği eğrisinden maksimum iki farklı dizi mekanik özellik seti çıkarılabilme olasılığını ortaya koymuşlardır. Yaptıkları bu çalışmada, Şekil değiştirme sertleşme katsayısının 0,2'den büyük olduğu katı malzemelerde benzersiz mekanik özelliklerin elde edilebileceği bildirilmiştir. Ayrıca yığılma veya çökme miktarının nitel gözlemlerle belirlenebileceğini ve bu gözlemlerin hangi mekanik özellik setine karşılık geldiğini belirlemede yeterli olduğu tespit etmişlerdir.

Nishimura ve ark., (2009), moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak Berkovich uç ile alüminyum oksit olarak da bilinen, kimyasal formülü Al_2O_3 olan alümina bileşiği üzerinde yapılan indentasyon deneyleri sertlik anizotropisi araştırılmıştır. Sonuçlar nanometre ölçeğindeki girinti derinlikleri için geçerli olduğunu göstermiştir. Ancak, daha büyük girinti derinlikleri ve farklı girinti Şekilleri konusunda genelleştirilmesi için ek çalışmaların yapılması gerektiğini vurgulamışlardır.

Xu ve ark., (2015), yaptıkları çalışmada cTi-Al alaşımının nano-indentasyon ve aşınma üzerine yapılan büyük ölçekli moleküler dinamik simülasyonlarına dayanıyor. Elde edilen sonuçlar, cTi-Al alaşımının Young modülünün yaklaşık 157.24 GPa olduğunu göstermişlerdir ve bu diğer grupların sonuçlarıyla uyumlu olduğu bildirilmiştir. Ayrıca, aşınma simülasyonları malzeme kaybının kaydırma mesafesi ve normal yük ile doğru orantılı olduğunu, sürtünme kuvveti ile normal yük arasında da doğrusal bir ilişki olduğunu açıklamışlardır.

Qiu ve ark., (2014), Cu50Zr50 amorf alaşımı ile moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak yapılan indentasyon deneylerinde indentasyon parametrelerinin malzeme davranışları üzerinde büyük etkileri olduğu tespit edilmiştir. Yüklenme kuvveti, indentasyon derinliği, yükleme hızı ve indenter çapı, yapılan deneylerde önemli ölçüde yük artışına neden olurken, sıcaklığın yüke azaltıcı, sertliğe artırıcı ve elastik modüle de artırıcı etkisi olduğu belirlenmiştir. Ayrıca adhezyon etkileşiminin sertliği hafifçe artırırken elastik modül üzerinde belirgin bir etkisinin olmadığı gözlemlenmiştir. Bu sonuçlar, Cu50Zr50' nin nano ölçekteki mekanik davranışı ve yüzey özellikleri hakkında önemli bir anlayış sağladığını göstermişlerdir.

Han ve ark., (2022), moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile Cu-Ni alaşımı üzerinde yapmış oldukları indentasyon deneylerinde ortam sıcaklığının, girinti hızı ve kristal yönelimi gibi çeşitli faktörlerin alaşımın davranışını etkilediğini açıklamışlardır. Dislokasyon oluşumları, istifleme hataları ve deformasyon ikizleri gibi deformasyon mekanizmaları, alaşımın sertliğini ve dislokasyon yoğunluğunu etkileyerek plastik davranışında önemli bir rolü olduğunu açıklamışlardır. Deney sonuçlarından, sertliğin hız ile arttığını ancak yüksek test sıcaklıkları ile azaldığını, kristal yöneliminin ise hem sertliği hem de elastik modülü önemli ölçüde etkilediğini tespit etmişlerdir. Deneylerde dislokasyon yoğunluğu büyük ölçüde klasik Taylor sertleşme modelini takip ettiğini ve plastik bölge boyutu parametresi, belirli girinti koşulları dışında nispeten sabit kaldığını açıklamışlardır.

Luu ve ark., (2021), moleküler dinamik (MD) simülasyonları yöntemi ile alüminyum ve demir gibi yüzey merkezli kübik ve gövde merkezli kübik malzemeler üzerinde çoklu parametreler (alt tabaka ve indenter boyutları, yükleme hızları ve çeşitli atomlar arası potansiyeller) kapsamlı bir şekilde araştırmışlardır. Deneyler sonucu, alt tabaka kalınlığının, girinti sırasında plastik deformasyondaki kritik kuvvetleri önemli ölçüde etkiler ve simülasyonlarda daha büyük alt tabakalara olan ihtiyacı vurgular. Girinti boyutu, yük düşüşünde gereken kuvveti doğrudan etkiler; burada daha büyük bir girinti, temas alanının artmasına ve sertliğin azalmasına neden olduğu bildirilmiştir. Girinti boyutunun yük düşüşünde gereken kuvveti doğrudan etkilediği; burada daha büyük bir girinti, temas alanının artmasına ve sertliğin azalmasına neden olduğu bildirilmiştir. Ayrıca plastik bölgenin evrimi ve dislokasyon yayılımı, girinti boyutundan büyük ölçüde etkilediğini tespit etmişlerdir.

Fu ve ark., (2016), MD yöntemi ile yapmış oldukları çalışmada Cu/Ni kristal yapıda iki tane veya daha fazla tane paralel olarak dizilmiş kristal hatlarına sahip simülasyon modeli üzerinde (nanotwin), küresel girinti kullanarak nanotwin arayüzelerinin ve ikiz kalınlığının sertlik üzerindeki etkileri araştırılmıştır. İkizleme kısmi kayma ve ikiz sınıra paralel kısmi kaymanın nano ölçekte sertliği azaltabileceğini ve mekanik özellikleri değerlendirirken dikkate alınması gerektiği açıklanmıştır. . Sınırlı katman kayması sınırlı güçlendirmeye yol açabilirken, İkizleme kısmi kayma ve ikiz sınıra paralel kısmi kayma kombinasyonunun daha büyük ikiz kalınlıklarında azalan sertliğe sebep olabildiğini göstermişlerdir.

Li ve ark., (2020), Md yöntemi ile nanoindentasyon deneylerinde nanokristalin bakırın mekanik özelliklerini ve deformasyon mekanizmaları ve nanokristal bakırın tane

boyutunun nanoindentasyon tepkisine etkisi araştırmışlardır. Sertlikte kritik bir tane boyutu saptanmıştır ve dislokasyon hareketi veya tane sınırı etkisinin bu değişimde belirleyici olduğunu göstermişlerdir.

Saraev ve Miller, (2006), Moleküler dinamik simülasyonlar yöntemini ince bir epitaksiyel nikel tabakası ile kaplanmış tek kristalleri bakırın nanoindentasyon deneyleri ile mekanik özellikleri araştırılmıştır. Deformasyon mekanizmaları, kaplama kalınlığı ve sıcaklığa bağlı olarak farklılık gösteriyor. Nickel kaplamalar, ince bakır filmlerini güçlendirebildiği ve nikelin sertliğini azaltabildiğini bildirmiştir. Kaplama kalınlığı ve girinti çapı ilişkisi sertlik üzerinde büyük bir etkiye sahip olduğunu ve daha keskin girintiler daha yüksek sertlik değerleri verdiğini tespit etmişlerdir.

Huang ve ark., (2021), Berkovich indenter altında farklı kristal yönelimlerine sahip FCC tek kristal bakırın nanoindentasyonunu analiz etmek için moleküler dinamik simülasyon yöntemini kullanmışlardır. Çalışmaları, yük-yer değiştirme eğrileri, kusur yapıları ve deformasyon arasındaki ilişkiyi araştırmış, kristal yöneliminin yük dağılımı üzerindeki önemli etkisini belirlemiş, farklı dislokasyon morfolojilerini ve çeşitli yönelimlerde istifleme kayma yönlerini göstermiştir. Deneyler, dislokasyon yoğunluklarının ve sertlik değerlerinin yönelime bağlı davranışlar sergilediğini ve belirli yönelimler arasında benzersiz plastik deformasyon mekanizmalarını ortaya koyduğunu göstermiştir. Anizotropi ve yük dağılımı bakımından biraz farklılık gösteren $\langle 100 \rangle$ yönelimi, $\langle 110 \rangle$ ve $\langle 111 \rangle$ gibi diğer yönelimlere kıyasla daha düşük değerler sergilemiştir. Ek olarak, dislokasyon yoğunluğu ve sertlik arasındaki ilişki farklı kristal yönelimlerine göre değişmiş ve yönelimin malzemenin tepkisi üzerindeki etkisini vurgulamışlardır.

Dai ve ark., (2019), moleküler dinamik simülasyonları kullanarak tek kristalli silisyum malzemeler üzerinde üç gövdeli elmas aşındırıcı tanelerinin nanoindentasyon deneyleri ile dislokasyonlar, çatlak yayılımı, koordinasyon sayısı, kusur atomları gibi derinlemesine mekanik değişkenler incelenmiş ve farklı dönme hızlarının bu değişkenler üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Sonuçlar, aşındırıcı tanelerinin dönme hızının artmasıyla birlikte dislokasyon sayısının arttığını, aynı zamanda iş parçasındaki Si-II faz geçişlerinin azaldığını göstermektedir. Benzer Şekilde, aşındırıcı taneciklerin dönme hızı arttıkça, iş parçası üzerindeki kusurlu atomların sayısının arttığı, sıcaklığın yükseldiği ve atomik hareketin dönme yönünde artan bir eğilim gösterdiğini tespit etmişlerdir.

Sun ve ark., (2020), moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile Si'nin nanoplastikliği incelenmiş ve girinti çaplarının bu süreç üzerindeki etkisini araştırmışlardır. Elde edilen sonuçlar, girinti boyutunun önemli bir geçişe işaret ettiğini göstermiştir. Küçük girintilerde, yüksek basınçlı faz dönüşümü ve β -Si ve body-centered tetragonal (5) yapı (bct5) fazlarına gerilme kaynaklı dönüşüm gözlenirken, büyük girintilerde dislokasyonların daha belirgin hale geldiğini tespit etmişlerdir. Bu durum, dislokasyonların belirli bir girinti boyutundan sonra baskın hale geldiğini göstermektedir. Ayrıca, farklı girinti çaplarının, yük-penetrasyon derinliği eğrisinde farklı pop-in tekilliklerine yol açtığını gözlemlemişlerdir.

Chen ve ark., (2010), çok bileşenli Al-Si alaşımlarında intermetalik fazların mekanik özelliklerinin sıcak aşamalı nanoindentasyon deneyleri ile metaller arası fazların farklı sıcaklıklarda değişen mekanik özellikleri araştırılmıştır. Sonuçlar, AlCu-Ni fazlarındaki daha yüksek Ni oranlarının artan sertlik ve modüle karşılık geldiğini göstermektedir. Özellikle Al₂Cu fazındaki süne etkileri sertliği güçlü bir şekilde etkilediği ve Ni içeren fazların 200°C'ye kadar kararlılık gösterdiği, ancak atom bozulmaları nedeniyle 350°C'de önemli ölçüde azaldığını göstermişlerdir. Si ve a-AlFeMnSi fazları 350°C'ye kadar uygun mekanik özellikler sergilediklerini ve iyi süne direnci gösterdikleri bildirilmiştir. Ayrıca, Al₅Cu₂Mg₈Si₆, daha düşük sertlik ve modüle rağmen mükemmel süne direnci ile ilişkili olarak yüksek sıcaklıklarda kararlılığını koruduğunu gözlemlemişlerdir.

Pratt ve ark., (2020), yaptıkları çalışmada, tek kristal alüminyumun elastik modülünü tahmin etmede farklı kuvvet alanlarının doğruluğunu belirlemek için moleküler dinamik (MD) yöntemini kullanmıştır. Üç farklı kuvvet alanı (GAM, MGAM, ve ReaxFF) kullanılarak nanoindentasyon gerçekleştirilmiş ve elde edilen elastik modüller, standart küçük gerinim çekme simülasyonlarının sonuçlarıyla karşılaştırılmışlardır. ReaxFF'nin sonuç modülleri nanoindentasyonunkilere benzer olsa da, GAM ve MGAM farklı değerler üretmiştir. Bu durum, bir kuvvet alanının elastisite modül için parametrelendirilmiş olmasının diğer prosedürlerden elde edilen modülü doğru bir şekilde tahmin edeceğini garanti etmediğini göstermişlerdir. Ayrıca, indentasyon eğrilerinden elastisite modülü hesaplamak için iki farklı yöntem olan Hertz yaklaşımı ve Oliver-Pharr (O&P) yöntemi karşılaştırılmış, GAM ve MGAM kuvvet alanları için Hertz yönteminin elastisite modülü düşük tahmin ettiği, O&P yönteminin ise daha iyi uyum gösterdiğini tespit etmişlerdir.

Wang ve ark., (2019), yüksek hızlı taşlama altında Al-Si çift katmanlarının yüzey altı hasarı ve malzeme kaldırma sürecini moleküler dinamik (MD) simülasyonu yöntemi kullanarak incelediler. Bu araştırma, daha büyük bir taşlama yarıçapının artan kusurlu yapıları, taşlama işlemi için daha büyük ısıнын ve kuvvetin gerekliliğini göstermişlerdir. Ayrıca, sünek/kırılgan Al/Si çift tabakaların, işleme sıcaklığındaki düşüş ve belirgin deformasyon davranışının aşınma direncini güçlendirebileceğini ortaya koymuşlardır. Bulgular, dislokasyon hareketini artırarak iş parçasının sünekliğine katkıda bulunduğunu ve daha derin kesme derinliği ve taşlama adımlarının malzeme yığılmasına yol açtığı gözlemlenmiştir. Ayrıca, kırılğan/sünek Si/Al çift tabakaların, sünek/kırılgan Al/Si çift tabakalarından daha yüksek sıcaklık ve taşlama kuvvetine ihtiyaç duyduğunu açıklamışlardır.

Verkhovtsev ve ark., (2013), Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile nanoindentasyon farklı indenter geometrileri ile karşılık gelen farklı deformasyon davranışları gözlemlenmiştir. Young modülü değerleri, girinti şekline göre farklılık göstermiş, stres serbest bırakma kanalları ve dislokasyon aktivitesinden etkilendiğini göstermişlerdir.

Deng ve ark., (2018), moleküler dinamik (MD) simülasyonu yöntemi kullanılarak nanoindentasyon deneyleri sırasında bir iş parçasının plastik deformasyonunun yük düşüşü ve ilişkili sertlik düşüşü ile ilgili yapılan çalışmalar sonucu, elastik aşamada, Hertzian çözümü MD simülasyon sonuçlarından elde edilen yük-derinlik ve sertlik-derinlik eğrileriyle iyi uyum sağlayabildiği ve dislokasyonların girinti etrafında artışı sertliğin maksimuma ulaşmadan önce belirgin olduğunu açıklamışlardır.

Zhou ve ark., (2023), Cu-Ni alaışımının nano-tribolojik davranışını ve deformasyon sürecini incelemişlerdir. Moleküler dinamik simülasyonlarla presleme derinliği, alaşım bileşimi ve kayma mesafesinin sürtünme durumu, dislokasyon yoğunluğu ve von-Mises gerinim gerilimi üzerindeki etkileri detaylı Şekilde araştırmışlardır. Elde edilen sonuçlar, daha büyük bir presleme derinliğinin preslenen bölgede daha fazla kafes kusuruna ve yüksek enine kuvvete yol açtığını, Cu içeriğinin artmasıyla istifleme hatası ve dislokasyon yoğunluğunun hızla arttığını ve daha uzun bir kayma mesafesinin daha fazla plastik deformasyona ve üretilen aşınma atomlarının sayısını artırdığını göstermişlerdir. Derinlik ve kayma mesafesi arttıkça, plastik deformasyon ve yüzey altı hasarı şiddetlendiği ancak Cu atomlarının alaışımın deformasyon direncini artırdığı göstermişlerdir

3. YÖNTEM

Tez çalışmasının bu bölümünde, nanoindentasyon deneylerinde kullanılacak bakır-nikel (Cu-Ni) ve alüminyum-silisyum (Al-Si) alaşımlarının döküm süreçleri, döküm işlemlerinde sıcaklık ölçümleri için termal kamera kullanımı, alaşımların yüzey pürüzlülüğünün giderilmesi ve parlatılması, yüzey pürüzlülük testlerinin gerçekleştirilmesi, numunelerin dağlanma işlemleri, optik mikroskop ile Al-Si ve Cu-Ni alaşımlarının mikroyapısal analizleri, taramalı elektron mikroskobu (TEM) ile alaşım malzemelerin görüntülenmesi, alaşımların elementel bileşimlerinin enerji dağıtıcı X-ışını (EDX) yöntemiyle belirlenmesi, nanoindentasyon test cihazının tanıtımı, deneylerde kullanılan takım ucunun ve ölçüm koşullarının belirlenmesi, nanoindentasyon deney sonuçlarının hesaplanacağı yöntem, MD simülasyon yöntemiyle gerçekleştirilecek indentasyon işlemi için kullanılacak program, bu deneylerde uygulanacak atomlar arası potansiyel enerji modeli ve simülasyonlar için oluşturulan girdi dosyalarının yüksek başarılı hesaplama (High Performance Computing) bilgisayarlarında işlenmesi hakkında detaylı bilgiler verilmiştir.

3.1. Al-Si ve Cu-Ni Alaşımlarının İmalatı

Al-Si ve Cu-Ni alaşımlarının üretiminde kullanılan temel elementler olan bakır, nikel, alüminyum ve silisyum, Şekil 3.1’de gösterilmektedir. Bu elementler, döküm yöntemiyle Sağlam Metal Sanayi ve Ticaret A.Ş. firmasında alaşım haline getirilmiştir. Üretim öncesinde, malzemelerin kimyasal saflıkları optik emisyon spektrometresi kullanılarak analiz edilmiş ve %99,9 saflıkta oldukları tespit edilmiştir. Alaşımlarda kullanılan elementlerin ağırlıkça oranları Çizelge 3.1’de sunulmaktadır. Cu-Ni ve Al-Si alaşımları, Şekil 3.2’de gösterilen KPS-160/1 tipi ara frekanslı indüksiyon ocağında eritilmiş ve ardından Şekil 3.3’te görülen kokil kalıba dökülerek numuneler hazırlanmıştır.



Şekil 3.1. Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarını oluşturan bileşenler



Şekil 3.2. KPS-160/1 tipi ara frekanslı indüksiyon fırını



Şekil 3.3. Kokil kalıp

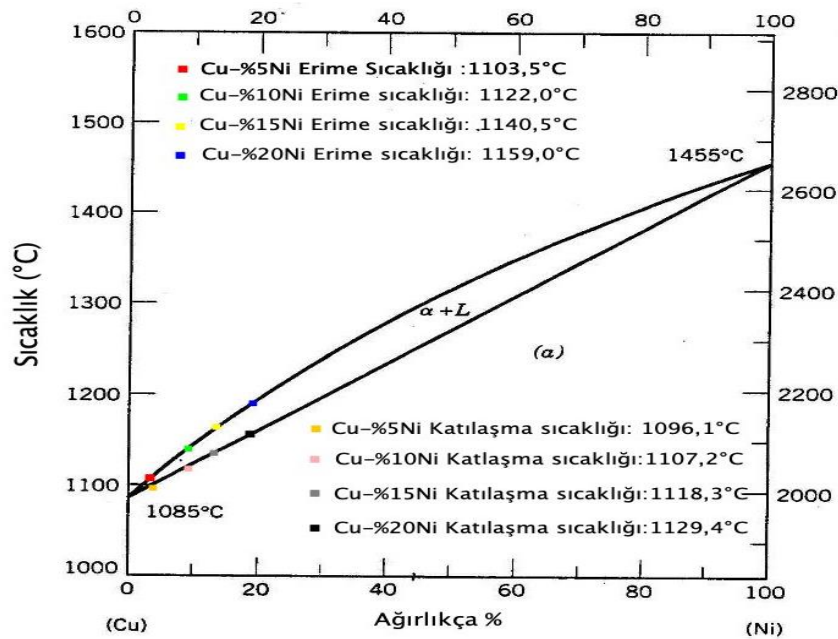
Döküm için kokil kalıp tercih edilmiştir. (Kokil kalıbın ölçüleri alt tabanı 182 mm 270 mm boy 164 mm üst kısmı olarak konik bir silindir. Üst kısım ve alt kısım et kalınlığı 50 mm'dir). Çizelge 3.1'de ağırlıkça yüzdelikleri verilenler ile Cu-Ni ve Al-Si alaşımları oluşturulmuştur.

Çizelge 3.1. Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarını oluşturan bileşen ağırlıkça yüzdelikleri

Malzemeler	Yüzdelik	Yüzdelik	Yüzdelik	Yüzdelik
Cu	%95	%90	%85	%80
Ni	%5	%10	%15	%20
Al	%95	%90	%85	%80
Si	%5	%10	%15	%20

3.1.1. Cu-Ni alaşımların döküm yöntemi ile üretilmesi

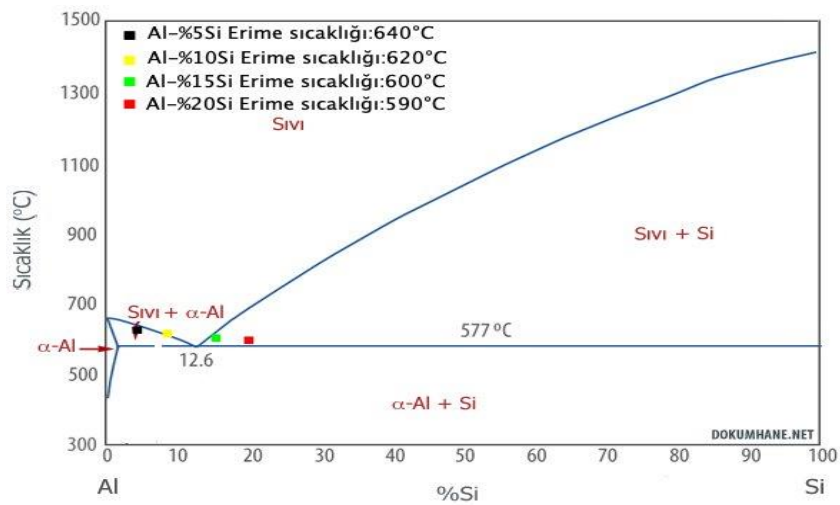
Cu-Ni alaşımları, birbirleri içerisinde tamamen çözünbilme özelliğine sahip olmaları nedeniyle izomorfik bir faz diyagramı sergilemektedir. Şekil 3.4 incelendiğinde, bu diyagramın %0–100 aralığındaki nikel konsantrasyonlarında yalnızca tek bir katı faz (α) ve sıvı çözelti fazlarını içerdiği görülmektedir. Bu durum, Cu ve Ni elementlerinin tüm oranlarda tamamen karışabildiğini göstermektedir. Cu-Ni faz diyagramı, döküm işlemlerinde alaşımların hangi sıcaklıklarda işleme tabi tutulacağını belirlemede önemli bir rehber niteliği taşımaktadır. Örneğin, Cu-%5Ni alaşımının erime sıcaklığı yaklaşık 1080 °C iken, Cu-%20Ni alaşımı yaklaşık 1200 °C civarında erimektedir. Döküm süreci, yüksek saflıkta (%99,9) bakır ve nikel hammaddelerinin temin edilip yüzey oksitlerinden arındırılmasıyla başlamaktadır. İlk olarak bakır, indüksiyon fırınında eritilir. Daha sonra kontrollü bir şekilde nikel ilave edilerek alaşım homojen hâle getirilir ve sıvılaştırma sıcaklığına ulaşması sağlanır. Erime sürecinde oluşan oksitler ve diğer safsızlıklar (cüruf) yüzeyden uzaklaştırılır. Alaşımların dökümünde kullanılan kalıplar, ani soğuma ve buna bağlı çatlak oluşumunu önlemek amacıyla önceden ısıtılmıştır. Hazırlanan sıvı alaşım, kontrollü bir hızla kalıplara dökülmüş ve soğuma işlemi sıcaklık kontrollü şekilde gerçekleştirilmiştir. Bu yöntemle mikro segregasyon önlenmiş, alaşımın homojen bir mikroyapıya ve istenen mekanik özelliklere sahip olması sağlanmıştır.



Şekil 3.4. Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımların faz diyagramındaki yeri

3.1.2. Al-Si alařımların döküm yöntemi ile üretilmesi

Al-Si alařımlarının döküm süreci; ergitme, karıřtırma, gaz giderme ve döküm ařamalarından oluřmaktadır. Hammadde hazırlığında, yüksek saflıkta seilmiř olan alüminyum ve silisyum, önceden belirlenen oranlarda hassas bir řekilde tartılmıřtır. Ergitme iřlemi, indüksiyon fırınlarında gerekleřtirilmiřtir. Alüminyumun düşük ergime sıcaklıęı (~660 °C) nedeniyle ilk olarak alüminyum ergitilmiř, ardından uygun oranlarda silisyum ilave edilmiřtir. Alařımın homojen bir yapıya sahip olması amacıyla metal karıřımı sürekli olarak karıřtırılmıřtır. Ergitilen alařımdaki oksitlerin ve gaz kalıntılarının uzaklařtırılması amacıyla argon gibi inert gazlarla gaz giderme iřlemi uygulanmıřtır. Homojenize edilen alařım, kokil döküm yöntemiyle kalıba aktarılmıř ve kontrollü bir soęutma süreciyle katılařtırılmıřtır. Döküm iřlemini takiben apak alma, yüzey temizlięi, ısıl iřlem ve kalite kontrol ařamaları tamamlanmıřtır. řekil 3.5'te sunulan faz diyagramı incelendięinde, alařıma ilave edilen silisyum miktarının artmasıyla birlikte sıvılařma sıcaklıęının, eutektik etki nedeniyle azaldıęı gözlemlenmektedir. Al-Si alařımlarında yaklaşık %12,6 silisyum içerięinde eutektik bileřim meydana gelir; bu bileřim, sıvı ve katı fazların birlikte var olabileđi en düşük sıcaklık olan yaklaşık 577 °C'yi temsil etmektedir. Silisyum oranının artıřı, alařıma daha düşük sıcaklıkta ergiyebilen bir bileřenin eklenmesi anlamına geldięinden, liquidus sıcaklıęı kademeli olarak düşer ve eutektik noktaya yaklařır. Bu nedenle faz sınırlarının eutektik nokta tarafından belirlenmesi, alařımın katılařma aralıęını daraltmakta ve döküm iřlemlerine iliřkin parametreleri doğrudan etkilemektedir.



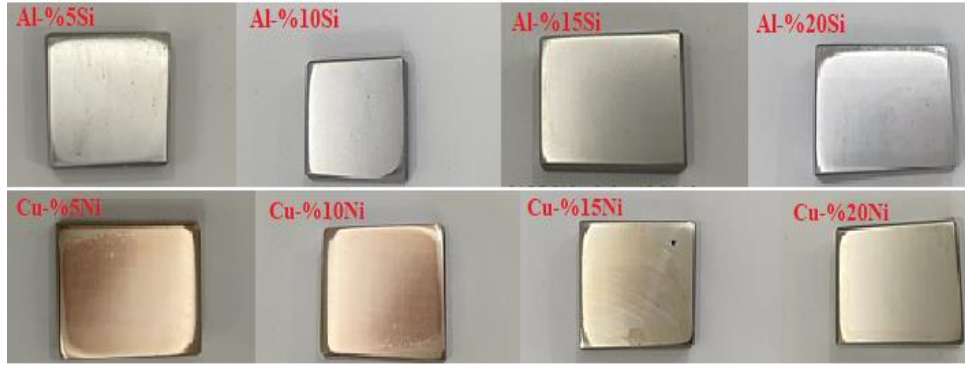
řekil 3.5. Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alařımların faz diyagramındaki yeri

3.2. Cu-Ni ve Al-Si Alaşımlarının Yüzey Parlatma İşlemi

Pürüzsüz yüzeylerin elde edilmesi amacıyla aşındırıcı parçacıkların kullanıldığı işleme "polisaj yöntemi" denilmektedir. Bu işlem sonucunda metalik yüzeyler, mikro pürüzlülüklerin giderilmesiyle birlikte daha düzgün ve parlak bir görünüm kazanır (Gullian Wang ve ark., 2015; Deng ve ark., 2019). Parlatma işlemi, yüzeydeki mikro seviyedeki girinti ve çıkıntıların giderilerek düzgün bir yüzey oluşturulması amacıyla uygulanır. Malzemenin yüzey hazırlığı tamamlanmamışsa, polisaj genellikle çok kademeli olarak gerçekleştirilir (Iqebal ve ark., 2019). İşlemin ilk aşamasında, yüzeydeki büyük kusurlar daha sert aşındırıcılarla giderilirken, sonraki aşamalarda yüzeyde minimum iz bırakacak daha ince aşındırıcılar tercih edilir. Parlatma ve cilalama işlemleri, genellikle cilalama çarkları ve yüksek hızlı polisaj makineleri ile gerçekleştirilir. Ayrıca, bu işlemler kalıp taşıyıcılar gibi sabit parlaticılar ya da özel otomatik ekipmanlar ile desteklenerek parlaklık düzeyi artırılabilir (Pawar ve ark., 2016). Polisaj işlemi sırasında, motorla tahrik edilen bir boru içerisine polisaj çubuğu yerleştirilir ve döndürülerek yüzeyde parlatma etkisi sağlanır. Bu çalışmada kullanılan numuneler, sırasıyla 180, 320, 400, 600, 800, 1000, 1200 ve 1500 grit büyüklüğündeki SiC zımparalarla yüzey taşlama işlemi uygulanarak hazırlanmıştır. Zımparalama işlemi, Cumhuriyet Üniversitesi Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Laboratuvarlarında kullanılan ve Şekil 3.6'da gösterilen cihaz ile gerçekleştirilmiştir. Zımparalanan yüzeyler, 9 µm, 6 µm, 3 µm ve 1 µm elmas süspansiyonları ile sırasıyla polisaj işlemine tabi tutulmuş, ardından 0.05 µm Al₂O₃ süspansiyonu kullanılarak son polisaj gerçekleştirilmiştir. Her bir numunenin yüzey pürüzlülüğünün ölçülmesi amacıyla, numuneler alkol ile yıkanarak temizlenmiş ve 30 °C'de kurutulmuştur. 9 µm, 6 µm, 3 µm ve 1 µm elmas süspansiyonları ile sırasıyla polisaj işlemine tabi tutulmuş, ardından 0.05 µm Al₂O₃ süspansiyonu kullanılarak son polisaj gerçekleştirilmiştir. Her bir numunenin yüzey pürüzlülüğünün ölçülmesi amacıyla, numuneler alkol ile yıkanarak temizlenmiş ve 30 °C'de kurutulmuştur.



Şekil 3.6. Zımparalama ve parlatma cihazı



Şekil 3.7. Zımparalama ve parlatma cihazı

Şekil 3.7’de ağırlıkça farklı oranlarda üretimleri gerçekleştirilmiş Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının optik mikroskop ve SEM analizleri için yüzey pürüzlülükleri giderilmiş ve parlatılmıştır.

3.2.1. Yüzey pürüzlülük testi

Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının yüzey pürüzlülük testleri, Cumhuriyet Üniversitesi Metalürji ve Malzeme Mühendisliği Laboratuvarı’nda yer alan TMR-200 yüzey pürüzlülük ölçüm cihazı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Yüzey kalitesinin değerlendirilmesinde Ra (ortalama yüzey pürüzlülüğü) değeri (μm) temel parametre olarak alınmıştır. Ölçümler, numunelere uygulanan parlatma işlemlerinin ardından gerçekleştirilmiştir. Ölçüm öncesinde, numune yüzeyleri tüm kalıntı ve partiküllerden arındırılmış, böylece uygun temizleme koşulları sağlanmıştır. Cihaz, doğruluğu bilinen standart bir referans blok yardımıyla kalibre edilmiştir. Ölçüm sırasında cihazın probu, belirlenen doğrultuda yüzeyi tarayarak yüzey profilini analiz etmiş ve elde edilen verilere dayanarak Ra değerlerini hesaplamıştır. Pürüzlülük değerlerinin güvenilirliğini artırmak amacıyla, her bir numunenin yüzeyine uygulanan parlatma ve ölçüm işlemleri beş kez

tekrarlanmıştır. Gerçekleştirilen bu testler sonucunda, Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının parlatma sonrası elde edilen yüzey pürüzlülük değerleri Çizelge 3.2 ve Çizelge 3.3'te sunulmuştur.



Şekil 3.8. TMR-200 yüzey pürüzlülük cihazı

Çizelge 3.2. Cu-Ni alaşımlarının yüzey pürüzlülük değerleri (Ra)

Yüzey Parlatma	Cu-%5 Ni	Cu-%10 Ni	Cu-%15Ni	Cu-%20Ni
1. Parlatma işlemi	0.045	0.060	0.027	0.029
2. Parlatma işlemi	0.034	0.033	0.024	0.027
3. Parlatma işlemi	0.030	0.031	0.021	0.025
4. Parlatma işlemi	0.027	0.029	0.019	0.023
5. Parlatma işlemi	0.019	0.020	0.017	0.022

Çizelge 3.3. Al-Si alaşımlarının yüzey pürüzlülük değerleri (Ra)

Yüzey Parlatma	Al-%5Si	Al-%10Si	Al-%15Si	Al-%20Si
1. Parlatma işlemi	0.099	0.185	0.074	0.074
2. Parlatma işlemi	0.080	0.093	0.070	0.062
3. Parlatma işlemi	0.070	0.085	0.059	0.034
4. Parlatma işlemi	0.062	0.079	0.057	0.019
5. Parlatma işlemi	0.059	0.056	0.055	0.018

3.3. Numunelerin Dağlanması

Parlatılmış numuneler ışığı eşit bir Şekilde dağıttıkları için inceleme esnasında iç yapı ile ilgili veri elde etmek imkansızdır. Parlatılmış numune üzerine malzemeye özel hazırlanmış kimyasal içerik ile dağlama işlemi uygulanmaktadır. Bu işlem süresi çok uzun veya çok kısa olmamalıdır. Çok kısa sürede dağlayıcıya maruz kalan numune içyapıların yeterli reaksiyon vermemesi sebebi ile görüntü almayı engelleyeceği gibi çok uzun sürelerle maruz kalan malzemenin çok fazla kararmasına ve görüntüdeki farklılıkların algılanamamasına sebep olacaktır. Dağlama sonucunda malzemenin iç yapı karakteristiği net bir biçimde ortaya çıkmaktadır. Bu işlem neticesinde; fazların cinsi,

dislokasyonların yoğunluğu ve konumları gibi birçok hata tespit edilebilmektedir. Dağlama için kullanılan reaktifler, su, alkol, glikol veya bunların karışımı olan çözeltiler içerisinde organik ve inorganik asitlerin ve diğer kompleks bileşiklerin eritilmesi ile oluşturulur. Yapılan dağlama işleminde, Şekil 3.9’da gösterilen Al-Si alaşımları için 100 ml HNO_3 ve Cu-Ni alaşımları için 100 ml NH_4OH kullanılmıştır. Dağlama işlemi neticesinde malzeme su ve alkol ile temizlenerek sıcak hava yardımı ile kurutulmuştur. Tüm bu işlemler neticesinde malzeme yüzeyi mikroskop altında inceleme için hazır hale getirilmiştir.



Şekil 3.9. Dağlama işleminde kullanılan HNO_3 ve NH_4OH kimyasal malzemeler

3.4. Optik Mikroskop ile Al-Si ve Cu-Ni Alaşımlarının Analizleri

Ağırlıkça farklı oranlarda üretilen Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni, Cu-%20Ni alaşımları ve Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si, Al-%20Si alaşımlarının mikro yapı analizleri için Cumhuriyet üniversitesi metalürji ve malzeme mühendisliği bölümü laboratuvarında Şekil 3.10’da gösterilmiş Nikon LV150N marka endüstriyel tip mikroskop kullanılmıştır.



Şekil 3.10. Nikon LV150N endüstriyel tip mikroskop

3.5. Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve Enerji Dağıtıcı X-ışını (EDX)

Taramalı elektron mikroskop (SEM) ile Al-Si ve Cu-Ni alaşım malzemelerin analizi için Sivas Cumhuriyet Üniversitesi merkez laboratuvarında bulunan Tescan Mira3 marka SEM cihazı kullanılmıştır. Şekil 3.11’de SEM cihazın görüntüsü verilmiştir.



Şekil 3.11. Tescan Mira3 marka taramalı elektron mikroskobu

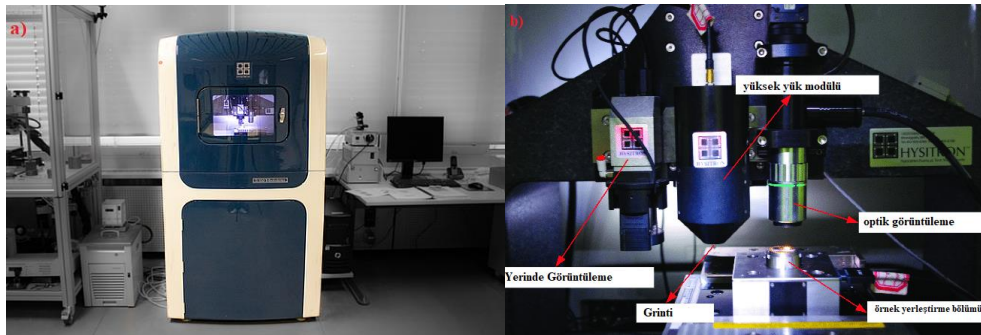
3.6. Nano İndentasyon Deneyleri

Nanoindentasyon teknikleri, makro ölçekli yöntemler kullanılarak incelenemeyen küçük ölçeklerdeki elasto-plastik malzemelerin mekanik davranışlarını karakterize etmek için yaygın olarak kullanılmaktadır. Nanoindentasyon, girinti ucun uyguladığı kuvvet ve bu kuvvete karşılık gelen yer değiştirmeyi, özellikle de iki önemli özellik olan sertlik ve elastikiyet modülünü sürekli olarak kaydederek malzemelerin küçük uzunluk ölçeklerindeki mekanik davranışlarını araştırmak için önemli bir tekniktir (Oliver ve Pharr, 1992). 19. Yüz yılın sonlarında Heinrich Hertz temas mekaniği alanının temelini atmıştır. İki elastik cismin temas halindeyken nasıl davrandığını incelemiştir (Hertz, 1882). Temas mekaniği alanı, temas halindeki iki katı cismin deformasyonunu incelemektedir. Heinrich Hertz'in elastik katıların teması üzerine yaptığı yayın ile makine mühendisliğinin bir parçası olarak gelişmiştir (Hertz, 1882). Basit bir girinti, yerel mekanik özellikleri incelemek için tipik olarak bir elmas uç ve katı bir malzeme parçası kullanılarak, katı bir girintinin temas alanında yerel temas gerilimini incelemek için kullanılmaktadır. Bu teknik 1950'lerin ortalarında küçük hacimlerin sertliğini ölçmek için yaratılmıştır ve malzemelerin bilinmeyen özelliklerine nüfuz etmek için bilinen bir katı

girinti kullanılmıştır. Daha gelişmiş sensörlerin ve aktüatörlerin geliştirilmesi, nanoindentasyon adı verilen ve indentasyonun yükünü ve derinliğini sürekli olarak ölçen mikron ölçekli indentasyonların ortaya çıkmasına yol açmıştır (Schuh, 2006). Sonuç olarak, nanoindentasyonun sonucu, sertlik ve Young modülü gibi çeşitli malzeme özelliklerini analitik olarak hesaplamak için kullanılabilen bir yük-derinlik eğrisidir. İndentasyonun şekli değişebilir, ancak basit geometriler malzeme özelliklerini hesaplamak için kullanılan indentasyon temas alanını tanımlar. En yaygın girinti tipleri üç (Berkovich) veya dört (Vickers) kenarlı piramitler, küp köşeler, koniler ve kürelerdir. Sonlu elemanlar yazılımındaki ilerleme ve artan hesaplama gücü kapasitesi, nano çentiklere dayalı malzeme özelliklerini tahmin etmek için birçok yöntemin geliştirilmesine yol açmıştır. Nanoindentasyon verilerinden malzemelerin mekanik özelliklerini çıkarmanın ana avantajı, çok küçük boyutlardaki malzemeler üzerinde yapılabilmesidir. Örneğin, makro ölçekli bir çekme testi kullanarak ince bir kaplamadaki gerilme-gerinim ilişkisini tahmin etmek zor olacaktır (Bouzakis, 2001).

3.6.1. Nanoindentasyon cihazı

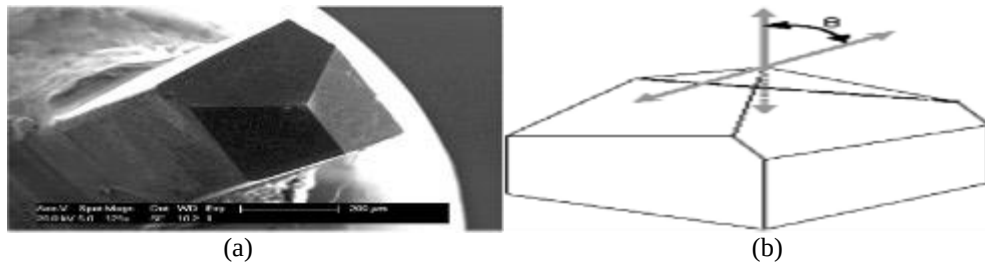
Yapılan nano nanoindentasyon deneyleri için Mustafa Kemal Üniversitesi Teknoloji Araştırma ve Geliştirme uygulama ve Araştırma Merkezi laboratuvarında bulunan Triboindenter Hysitron TI 950 marka nanoindentasyon cihazı kullanılmıştır. Nanoindentasyon deneyleri 5000 μN 'a ve 10000 μN 'a kadar kuvvetlerle her numune üzerine 8 farklı noktadan girinti ölçümleri yapılmıştır. Nanoindentasyon deneyleri için kullanılan cihazı Şekil 3.12'de verilmiştir.



Şekil 3.12. a) Nanoindentasyon test cihazı b) nanoindentasyon deney bölüm

3.6.2. Nanoindentasyon deneylerinde kullanılan takım ucu

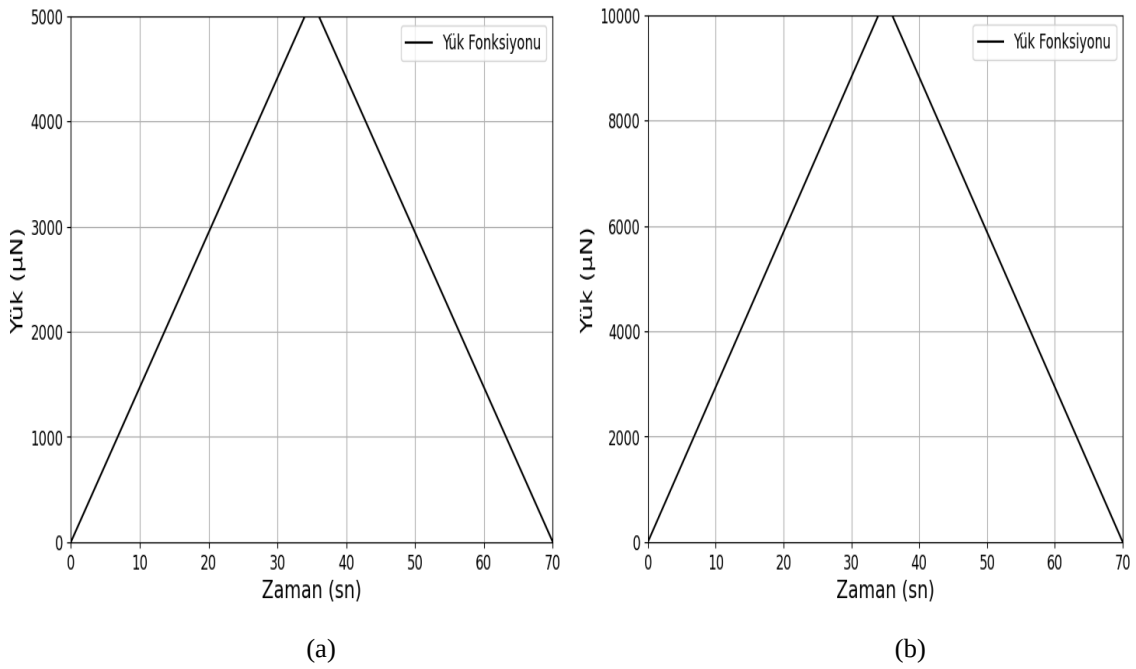
Bir nanoindentasyon deneyinde temel bileşenler, test malzemesi, mekanik yük ve yer değiştirmesini ölçmek için kullanılan sensörler, aktüatörler ve nanoindentasyon ucudur. Bu deneysel çalışmada nano girinti deneyleri için kullanılan girinti ucu geleneksel olarak elmastan yapılmıştır. Şekil 3.13'te gösterilen üç kenarlı piramidal yapıya sahip berkovich uç kullanılmıştır. Bununla birlikte, nanoindentasyon testi için kullanılan Berkovich elmas ucun uç kısmında ki kusurlar için çalışmalar da yapılmıştır (Thurn ve Cook 2002; McElhaney ve ark., 1998; Meneve ve ark., 1996). Yaygın olarak kullanılan standart bir nanoindentasyon probu olan Berkovich probu kenardan karşı tarafa uzanan toplam 142.35° 'lik bir açı ile karakterize edilmektedir. Dikeyden bir yüze olan açıyı temsil eden yarı açı (θ) $65,35^\circ$ 'dir. Prob 1:8 en boy oranına sahipken, tipik bir Berkovich ucu yaklaşık 150 nm ölçülerinde bir eğrilik yarıçapı sergilemektedir. Ayrıca, yarıçapı 50 nm'nin altında olan daha keskin Berkovich problemleri de mevcuttur. Standart nanoindentasyon probu olarak yerleşik rolü göz önüne alındığında, mümkün olduğunda Berkovich probunun seçimine öncelik verilmesi tavsiye edilir. Bu uç, yüzeyin kabaca 50 nm RMS'yi aşan pürüzlülük sergilediği durumlar dışında, çoğu dökme numune için oldukça etkili olduğunu kanıtlamaktadır. Ayrıca, genellikle 200 nm'yi aşan kalınlıklara sahip ince filmler için optimum performans göstermektedir. Daha ince filmleri içeren durumlarda, yarıçapı 50 nm'den az olan daha keskin Berkovich ucu tercih edilmektedir(Engbretson ve ark., 2021). Nanoindentasyon deneyleri için kullanılan piramidal yüzeye sahip berkovich elmas uç takımının taramalı elektron mikroskop görüntüsü Şekil 3.13 a'da gösterilmiştir(Zhang, 2019).



Şekil 3.13. a) Berkovich ucun SEM görüntüsü (Zhang,2019), b) Berkovich ucun geometrik şekli (Engbretson ve ark., 2021)

3.6.3. Nanoindentasyon ölçüm şartları

Tüm ölçümler 300 Kelvin (K) sıcaklığında Hysitron T1-950 Triboindenter marka cihaz ile gerçekleştirilmiştir. Nanoindentasyon deneylerinde girinti uç olarak Berkovich uç kullanılmıştır. 5000 μN ve 10000 μN yük altında iki farklı yük uygulanarak 8x1 deseninde girinti ölçümleri alınmıştır. Uygulanan her iki yükteki yük fonksiyonları Şekil 3.14' te verilmiştir.



Şekil 3. 14. Nanoindentasyon deneylerinde uygulanan yük a) 5000 μN b) 10000 μN

Makro ölçekte yapılamayacak Elasto-plastik malzemelerin mekanik test analizlerinin nanoindentasyon teknikleri ile analizler yaygın olarak uygulanmıştır. Nanoindentasyon, uygulanan kuvveti ve bir girinti sırasında karşılık gelen yer değiştirmeyi, özellikle iki önemli özelliği, sertlik ve elastisite modülü sürekli olarak kaydederek, küçük uzunluk ölçeklerinde malzemelerin mekanik davranışını araştırmak için önemli bir tekniktir(Oliver ve Pharr, 1992). Heinrich Hertz 1980'lerde, temas mekaniği alanının temelini atmıştır. Temas halindeki iki elastik cismin nasıl davrandığını araştırmıştır (Hertz,1882). Temas mekaniği alanı, temas halindeki iki katı cismin deformasyonunu incelemektedir. Teknik, 1950'lerin ortalarında küçük hacimlerin sertlik ölçümleri için uygulanmıştır. Daha gelişmiş sensörler ve aktüatörler, sürekli olarak girintinin yükünü ve derinliğini ölçen nanoindentasyon adı verilen mikron altı girinti deneyleri öncü olmuştur

(Schuh, 2006). Nanoindentasyon deneyleri sonucu, sertlik ve young modülü gibi malzemelerin mekanik özelliklerini analitik olarak hesaplamak için kullanılabilen bir yük-derinlik eğrisi elde edilmektedir. En yaygın girinti türleri, üç (Berkovich) veya dört (Vickers) kenarı, küp köşeleri, konileri ve küreleri olan piramitlerdir. Sonlu elemanlar yazılımı ve artan hesaplama gücü kapasitesi ile birlikte ilerlemeleri, nano girintilere dayalı malzeme özelliklerinin tahmini için çok sayıda yöntemin geliştirilmesine yol açmıştır. Nanoindentasyon verilerinden malzeme özelliklerinin çıkarılmasının ana avantajı, yerel malzeme özelliklerini başka türlü mümkün olmayacak şekilde tahmin etme olasılığıdır. Örneğin, ince bir kaplamada gerilme-Şekil değiştirme ilişkisini belirlemek için (Bouzakis ve ark.,2001) makro ölçekli bir çekme testi kullanarak tahmin etmek zor olacaktır.

3.6.4. Atomik kuvvet mikroskobu

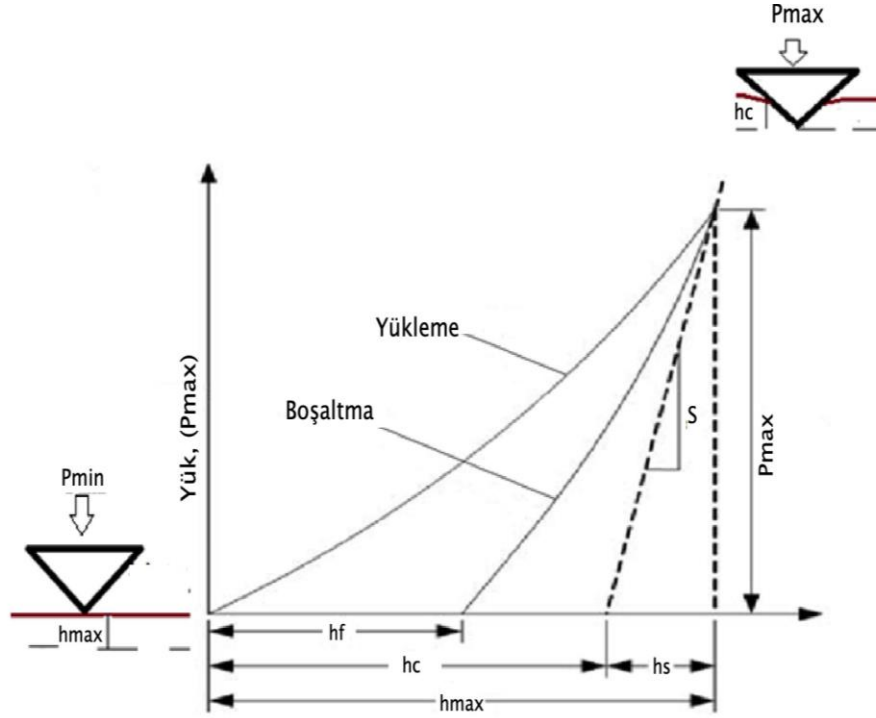
Nanoindentasyon deneyleri yapılan malzemelerin Orta Doğu Teknik Üniversitesi ARGE eğitim ve ölçme merkezi elektrik, manyetik ve optik özellikler ölçüm laboratuvarında (EMOL) Veeco MultiMode V marka cihazla ölçümler yapılmıştır. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) malzemelerin atomik boyutlara kadar sivriltilmiş bir iğne ucu yardımıyla, yüzeyin yüksek çözünürlükte, üç boyutlu görüntülenmesini sağlamıştır. Şekil 3.15'te Veeco MultiMode V marka cihaz gösterilmiştir.



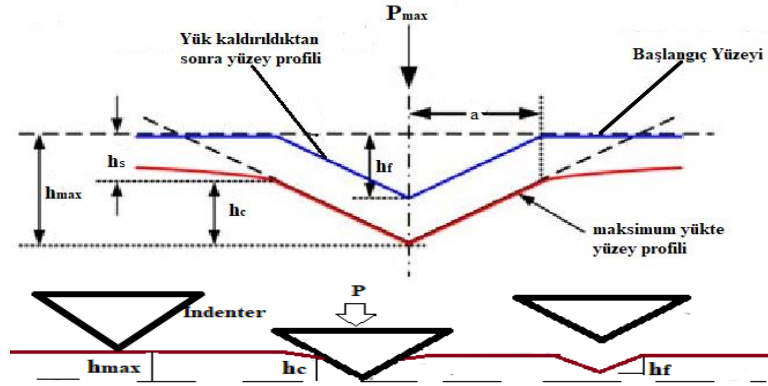
Şekil 3.15. Atomik Kuvvet mikroskobu (AKM)

3.6.5. Nanoindentasyon yöntemi

İndentasyon testi, yükü ve yer değiştirmeyi sürekli olarak kaydeden yüksek hassasiyetli bir alet kullanarak çok düşük yüke sahip bir numuneye girinti yaparak işlem gerçekleştirmektedir. Girinti yükü ve bu yükten kaynaklanan temas alanının bölünmesiyle sertlik ve elastisite modülü bulunmaktadır. Sertlik ve elastisite modülü, nanoindentasyon deneyleri sonucu elde edilen en yaygın iki özelliktir. Sertlik, genellikle girinti yükünün oranı ve girinti ucun altındaki çentik yükünün elastisite modülüne, akma dayanımına, poisson oranına, çalışma sertleştirme üssüne ve girinti geometrisine bağlı olmaktadır(Jin ve ark., 2018; Jin ve ark., 2016). Mekanik özellikler, uygun veri analizi yoluyla yükleme-boşaltma sırasında ölçülen yük-yer değiştirme eğrilerinden de elde edilmektedir. Ortalama temas basıncı, saf plastik deformasyon bölgesinde ölçülür ve genellikle numune malzemesinin girinti sertliği H (GPa) olarak tanımlanmaktadır. Nanoindentasyon deneylerinde, ucun yer değiştirmesi ölçülür ve temas alanının boyutu (tam yük altında) girinti ucun bilinen geometrisi ile penetrasyon derinliğinden hesaplanmaktadır. Malzemenin çok az elastik geri kazanımı olan çok sert bir katı plastiğin ölçülmesi durumunda, tam plastik bölge koşulundaki ortalama temas basıncı, malzemenin kalıcı deformasyona karşı direncinin bir göstergesi olarak açıkça görülmektedir. Nanoindentasyon deneylerindeki derinlik algılama tekniklerinin yardımıyla, numunenin elastisite modülü, yük-yer değiştirme eğrisinin boşaltma eğiminden hesaplanmaktadır. Bu şekilde ölçülen elastisite modülü, teknik olarak numune malzemesinin "girinti modülü" E_r (GPa) olarak adlandırılmaktadır. İdeal olarak, girinti modülü "elastisite modülü" veya "Young modülü" terimleriyle eş anlamlıdır. Girinti modülünün değeri, yük-deplasman verilerinin analizinde dikkate alınmayan malzeme davranışından büyük ölçüde etkilenebilmektedir. Şekil 3.16 ve Şekil 3.17'da nanoindentasyon yöntemi şematik olarak verilmiştir.



Şekil 3.16. Nanoindentasyon sonucu oluşan yük-yer değiştirme eğrisi (Oliver ve Pharr, 1992)



Şekil 3.17. Nanoindentasyon deneyi sonucu malzeme yüzeyinde oluşan iz görüntüsünün şematik gösterimi (Oliver ve Pharr, 1992)

3.6.6. Oliver-Pharr yöntemi

Bu yöntem, temas alanı oluşturularak normal malzemelerin elastik modülünü tahmin etmek için kullanılan en yaygın yöntemdir. Bu yöntem, girinti grafiği verilerinin boşaltma kısmının güç kanunu ilişkisine göre formülizasyonu yapılmıştır (VanLandingham, 2003; Meneve ve ark., 1996). Nano girintileri analiz etmek için en önemli tahminlerden biri temas derinliğidir. Diğerlerinin yanı sıra, sertlik (H) ve Young

modülünün (E) ölçümü ve malzemenin gerilim-gerinim eğrisinin tahminleri de dahil olmak üzere, nano girintilerin en yaygın uygulamaları için temas derinliği gereklidir. Bugün kullanılan en yaygın yöntemlerden biri, son haliyle Oliver ve Pharr (Oliver ve ark., 1992) tarafından önerilen denklem 3.1'dir.

$$h_c = h - s \frac{L}{S} \quad (3.1)$$

h_c temas derinliğidir, h_f iz derinliğidir, h toplam derinliktir, s girinti geometrisine bağlı bir sabittir, P yüküdür ve S , boşaltma başlangıcında boşaltma eğrisinin eğimi ile temsil edilen temas sertliğidir ve genellikle şu şekilde yazılır.

$$S = \left[\frac{dL}{dh} \right] h_{max} \quad (3.2)$$

Aynı makalede (Oliver ve ark., 1992), daha önce kullanılan doğrusal yaklaşım yerine, boşaltma eğrisini temsil etmek için bir kuvvet yasası olan denklem 3.3'ün kullanılması önerilmiştir.

$$L = \alpha(h - h_f)^m \quad (3.3)$$

Bu denklemden, indirgenmiş elastisite modül hesaplaması ve sertlik hesaplaması yapılabilmektedir. Berkovich uç için $\theta=1.034$ alınmıştır(King,1987).

$$E_r = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\theta} \frac{S}{A(h_{c,max})} \quad (3.4)$$

$$H = \frac{P_{max}}{A(h_c)} \quad (3.5)$$

E_r aşağıdaki Denklem 3.6'e göre indirgenmiş elastisite modülü ve R girinti yarıçapıdır.

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1-v_m^2}{E_m} + \frac{1-v_i^2}{E_i} \quad (3.6)$$

E_m ve v_m malzeme elastisite modülü ve poisson oranı; E_i ve v_i , ise girinti malzemenin elastisite modülü ve poisson oranıdır. Nanoindentasyon ucun elastisite modülü, $E_i = 1141$ GPa ve poisson oranı, $v_i = 0.07$ olarak alınmıştır (Zheng ve ark., 2007; Ma, ve ark., 2016). Al-Si alaşımlarının poisson oranı yaklaşık $V_m = 0.29$ alınmıştır (Chen

ve ark., 2008). Tek kristalli silisyum (Si) için poisson oranı $V_m=0,278$ alınmıştır(Yao ve ark., 2020). Cu[100] ve Cu-Ni alaşımların poisson oranı $v_m= 0.34$ alınmıştır (Nickel Alloys.Net, 2021).

3.7. MD Simülasyon

MD simülasyon yöntemi, atomların ve moleküllerin istatistiksel mekanik kullanarak fiziksel hareketlerine dayanan, “n” tane parçacığın kendi aralarında etkileştiği bir cisim sistemi için klasik hareket denklemlerini çözerek konfigürasyonlar üreterek analiz etmemizi sağlayan bir bilgisayar simülasyon yöntemidir(Goel ve ark., 2013). Malzemelerin en küçük yapı taşı olan atomlara odaklanan farklı bir yaklaşım göstermektedir. Yüksek çözünürlüğe sahip “sanal mikroskop” olarak da tanımlanabilmektedir. MD simülasyon yöntemi, etkileşen parçacıklardan oluşan bir sistemdeki zamana bağlı yörüngeleri tahmin etmeyi amaçlamaktadır. Simülasyon deneylerinden elde edilen yörünge, belirli bir zaman aralığındaki termodinamik değişikliklerin analiz edilmesini sağlamaktadır. Bu çalışmada, moleküller dinamik simülasyon deneyleri için Lammops(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) kullanılmıştır(Plimpton , 1995). Simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen deneyler sonucu elde edilen veriler OVITO(Open Visualization Tool) (Stukowski, 2010) aracılığıyla görselleştirilmiştir. MD simülasyonları sonucu malzemelerde oluşan kristal kusurlarının OVİTO programında görselleştirilmesi için DXA(Dislocation Extraction Algorithm) kullanılmıştır(Stukowski ve ark., 2012). Geliştirilen MD simülasyon modeli, pratikte nadir bir durum olan bir vakum ortamını dikkate almıştır. Ancak, bu düşünce tesadüfi olarak ortaya çıkmıştır; ortam havasının rolünün göz ardı edilmesi, yalnızca kristal yapının etkisinin dikkatlice incelenmesine izin vermiştir. Bu çalışmada kullanılan MD algoritması ve ilgili hususlar, yazarlar tarafından gerçekleştirilen diğer nanoindentasyon simülasyon çalışmalarına oldukça benzerdir (Goel, 2014).

3.7.1. LAMMPS

LAMMPS((Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator), açık kaynaklı ve yüksek performanslı bir moleküler dinamik simülasyon yazılımı olarak araştırmacılar ve mühendisler için güçlü bir araçtır(Parks ve ark., 2008). Geniş bir kullanıcı tabanına sahip olması ve sürekli olarak geliştirilmesi, bilimsel araştırmaların ve

endüstri uygulamalarının daha verimli ve etkili bir Şekilde yapılmasını sağlamaktadır(Plimpton, 1995; Glaser ve ark., 2015). Lammips(Plimpton, 2019), malzeme bilimi, kimya biyokimya, biyofizik, mühendislik ve astrofizik gibi alanlarda yüksek performanslı hesaplama kaynaklarını (HPC) kullanarak büyük sistemlerde moleküler dinamik simülasyonları gerçekleştirebilen(Glaser ve ark., 2015) popüler bir açık kaynak moleküler dinamik simülasyon yazılımıdır(Plimpton, 1995). Son yıllarda MD ve sonlu elemanlar yöntemini eş zamanlı olarak birleştirmek için çeşitli yöntemler uygulanmıştır(Park vd., 2005). Ayrıca, farklı kuvvet alanları kullanarak moleküler etkileşimleri modelleyebilir, bu da farklı sistemlerin simülasyonunu yapmak için geniş bir esneklik sunmaktadır(Hoover,1985).

3.7.2. LAMMPS kullanım alanları

- Malzeme Bilimi: Malzemelerin mekanik özelliklerini, termal davranışını ve elektriksel özelliklerini incelemek için kullanılmaktadır(Izvekov ve Voth, 2005). Özellikle nanomalzemelerin davranışının anlaşılması için önemlidir.
- Kimya ve Biyokimya: Kimyasal reaksiyonların modellenmesi ve protein-ligand etkileşimlerinin anlaşılması gibi kimya ve biyokimya alanlarında önemli uygulamalara sahiptir (Hoover,1985).
- Petrol ve Gaz Endüstrisi: LAMMPS, hidrokarbon rezervuarlarının simülasyonu ve petrol ve gaz üretimi süreçlerinin optimizasyonu için kullanılmaktadır(Senftle ve ark., 2017).
- Biyoloji ve İlaç Tasarımı: Biyomoleküler yapıların ve etkileşimlerin anlaşılması, ilaç tasarımı ve biyolojik sistemlerin modellenmesi için kullanılmaktadır(Leach, 2001).

3.8. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi(YFT)

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT), moleküler dinamik simülasyonlarında atomlar ve moleküller arasındaki etkileşimleri daha doğru bir Şekilde modellemek için kullanılan kuantum mekaniksel bir yöntemdir. YFT, bir sistemin toplam enerjisini, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak ifade eder ve Schrödinger denklemini çözmekten çok daha hızlıdır. Kimyasal reaksiyonlar, bağ kırılması, yüzey etkileşimleri

gibi klasik potansiyellerin yetersiz kaldığı durumlarda DFT, kuantum doğruluğuyla enerji hesaplamaları yaparak bu süreçleri modellemeyi mümkün kılar. Elektronik yapıların (bant yapısı, yoğunluk durumları), bağlanma enerjilerinin ve yüzey özelliklerinin analizi için kritik öneme sahiptir. Ayrıca, klasik ve kuantum mekaniksel modelleri birleştiren hibrit simülasyonlarla daha geniş sistemler için uygulanabilir. Ancak yüksek hesaplama maliyeti, büyük sistemlerde veya uzun zaman ölçeklerinde kullanımını sınırlamaktadır. Buna rağmen, DFT'nin sağladığı doğruluk, dinamik simülasyonlarda fiziksel ve kimyasal süreçlerin daha iyi anlaşılmasına büyük katkı sunmaktadır.

3.8.1. Yoğunluk Fonksiyonel teorisi(YFT) ile potansiyel enerji hesaplanması

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (YFT) kuantum mekaniğine dayalı hesaplamalarla malzemelerin elektronik yapılarını, bağ enerjilerini ve mekanik özelliklerini belirlemek için kullanılan bir yöntemdir. Potansiyel enerji hesaplaması, sistemin toplam enerjisinin belirlenmesini içerir ve şu adımlarla gerçekleştirilmektedir.

3.8.1.1. Schrödinger denklemi ve YFT yaklaşımı

Elektronik dalga fonksiyonunu kullanarak Schrödinger denklemini çözmek yerine, Hohenberg-Kohn Teoremi sayesinde elektron yoğunluğu $\rho(r)$ kullanılarak enerji hesaplanır. Bu teorem, bir sistemin toplam enerjisinin, yalnızca elektron yoğunluğuna bağlı olduğunu belirtir ve böylece dalga fonksiyonunun tüm karmaşıklığını ortadan kaldırır. Elektron yoğunluğu, sistemin tüm bilgilerini içeren bir parametre olarak kabul edilir ve bu yoğunluk kullanılarak enerji hesaplamaları daha verimli ve pratik bir şekilde yapılabilir. Bu yaklaşım, yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) çerçevesinde, daha hızlı ve hesaplama açısından daha az maliyetli enerji hesaplamalarına olanak tanımlanmaktadır.

$$E_p = T_s(p) + V_{ext}(p) + J(p) + Exc(p) \quad (3.7)$$

3.8.2. Potansiyel enerji hesaplama adımları

3.8.2.1. Kristal yapının ve atomların tanımlanması

Malzemenin atom koordinatları ve kafes parametreleri, malzemenin yapısal özelliklerini ve kristal düzenini doğru bir şekilde tanımlamak için önemlidir. Girdi dosyası, bu parametreleri içerecek şekilde çeşitli hesaplama yazılımları kullanılarak oluşturulmaktadır. VASP, Quantum ESPRESSO, Gaussian ve ABINIT gibi yazılımlar, atomik yapıyı ve malzemenin enerji düzeylerini simüle etmek için yaygın olarak tercih edilen araçlardır. Bu yazılımlar, özellikle yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) gibi yöntemler kullanarak, malzemenin özelliklerini hesaplamak için gereken giriş verilerini sağlamaktadır.

3.8.2.2. Fonksiyon seçimi

Yerel yoğunluk bazlı (YYB) ve geliştirilmiş gradyan yaklaşımı Hybrid Fonksiyonelleri (HSE06, B3LYP), değişim-korelasyon etkilerini daha iyi içermektedir. Bu fonksiyoneller, elektron yoğunluğunun yerel özelliklerine dayalı olarak sistemin enerjisini hesaplayarak, özellikle elektron etkileşimleri ve bağ kuvvetlerini daha doğru bir şekilde modellemeye olanak tanır. HSE06 ve B3LYP gibi hybrid fonksiyoneller, hem yerel yoğunluk fonksiyoneli (YYF) hem de gradyan düzeltilmiş fonksiyonellerin kombinasyonunu kullanarak, hesaplamalarındaki doğruluğu artırır ve değişim-korelasyon etkilerinin etkili bir şekilde işlenmesini sağlamaktadır.

3.8.2.3. Dalga fonksiyonlarının ve elektron yoğunluğunun çözümü

Dalga fonksiyonlarının ve elektron yoğunluğunun çözümü, Kohn-Sham denklemlerinin iteratif olarak çözülmesiyle gerçekleştirilir. Bu süreçte, sistemin toplam enerjisinin en düşük seviyeye ulaşması için yoğunluk fonksiyonel teorisi (YFT) yaklaşımı kullanılmaktadır. Hesaplamalar sırasında, dalga fonksiyonlarını temsil etmek için düzlem dalga baz setleri veya lokalize baz fonksiyonları tercih edilir. Düzlem dalga baz setleri, özellikle periyodik sistemler için uygun olup, yüksek doğruluk sağlamaktadır. Lokalize baz fonksiyonları ise, belirli atomik orbitalleri esas alarak daha kompakt bir temsile

imkan tanımaktadır. Kullanılan yöntem, malzemenin yapısına ve hedeflenen hesaplama doğruluğuna bağlı olarak seçilmektedir.

3.8.2.4. Toplam enerji (E_{toplam}) ve potansiyel enerji (V) hesabı

Toplam enerji, minimizasyon yoluyla bulunur. Bu süreç, sistemdeki enerjinin en düşük seviyeye inmesini sağlayacak Şekilde atomların konumlarının ayarlandığı bir optimizasyon işlemidir. Potansiyel enerji yüzeyi (PES), atomların yer değiştirmesiyle değişir. Yani, atomlar farklı pozisyonlara yerleştirildiğinde, bu değişiklikler sistemin potansiyel enerjisini etkiler ve PES üzerinde yeni bir konumda enerji seviyesi oluşmaktadır. Bu etkileşim, sistemin daha stabil bir enerji durumuna ulaşmasını sağlayacak Şekilde devam etmektedir.

3.8.2.5. Bağ enerjisi, serbest enerji ve kuvvetlerin hesaplanması

Yapı optimizasyonu ile minimum enerji noktası belirlenmektedir. Bu süreç, sistemin en düşük enerji seviyesine ulaşacak Şekilde atomların konumlarının ayarlandığı bir hesaplamayı içermektedir. Optimizasyonun ardından, sistemin çeşitli parametreleri de analiz edilmektedir. Bunlar arasında Fermi seviyesi, bant yapısı ve atomlar arası kuvvetler gibi önemli özellikler bulunur. Fermi seviyesi, elektronların enerjisi ile ilgili bilgi verirken, bant yapısı elektriksel iletkenlik hakkında fikir verir. Atomlar arası kuvvetler ise, sistemdeki atomlar arasındaki etkileşimleri ve bu etkileşimlerin yapıyı nasıl Şekillendirdiğini anlamamıza yardımcı olmaktadır.

3.9. MD Simülasyon ile Gerçekleştirilen İndentasyon İşlemlerinde Kullanılan Atomlar Arası Potansiyeller

Atomlar arası potansiyel, çekirdeğin konumunu temsil eden bir fonksiyondan oluşmaktadır. Atomlar belirli bir konfigürasyonda bulunduğunda sistemin potansiyel enerjisi atomların birbirine göre göreceli konumları kullanılarak tanımlanmaktadır. Genel yapı aşağıdaki gibidir:

$$U = (r_1, r_2, \dots) = V_1 + V_2 + V_3 \quad (3.8)$$

Bu denklemde, ilk terim, yerçekimi veya elektrostatik gibi bir dış kuvvet alanından kaynaklanan enerjiyi temsil etmesine karşın genellikle göz ardı edilmektedir. İkinci terim, parçacıkların ikili etkileşimlerini göstermektedir. Üçüncü terim, üç gövdeli bileşenleri vermektedir. Ancak simülasyon deneylerinin hesaplama masrafını azaltmak için genellikle ikinci terim dahil edilmektedir. Birçok cisim etkileşimini dikkate alan bazı potansiyeller vardır, bu nedenle potansiyel enerji, kendi aralarında etkileşen üç veya daha fazla parçacığın etkilerini içermektedir. İki cisim potansiyeline sahip bazı simülasyonlarda, çoklu cisim etkileşimini açıklamak için bazı çoklu cisim bağımlılığı dahil edilmektedir. Öte yandan, farklı atomların oluşturduğu alaşımların potansiyellerinde bu etkileşimler, yüksek dereceli terimlerin bir kombinasyonu olarak hesaplanmaktadır. En yeni bazı örnekler, atomlar arasındaki açılar göz önünde bulundurarak üç atomlu grupların toplamını içeren Tersoff potansiyeli veya elektron yoğunluğunun çevredeki atomların katkılarının toplamından hesaplandığı GAM potansiyelidir (Daw ve Baskes, 1984). Moleküler dinamik simülasyon deneylerinde, bir atom ile diğer atomlar arasındaki tüm etkileşimleri hesaplamak zordur. Hesaplama çabasını azaltmak için, potansiyel fonksiyonun sonsuz aralığı yerine her bir atomun yalnızca en yakın komşuları dikkate alınmaktadır. Bu hipotezi varsayarak, bir kesme yarıçapı, yarıçap vektörünün modülünün maksimum değeri olarak tanımlanmaktadır. Bu, yalnızca kesme yarı çapından(R_c) daha az ayrılmış atomlar arasındaki etkileşimlerin dikkate alınacağı anlamına gelmektedir. Ayrıca, iki atom arasındaki mesafe değeri (r) kesme yarıçapına (R) yaklaştığında geçişi yumuşatacak bir "cutoff" faktörü f_c tanımlanması gerekmektedir.

3.9.1. Gömülü atom modeli (GAM) potansiyeli

Malzemeler iki veya daha fazla çeşit atomdan oluştuğunda çift potansiyellerin, yüzeyler, tane sınırları, vb. gibi sorunlar oluştu gözlemlenmiştir. Gömülü atom modeli(GAM) potansiyeli, genellikle metalik sistemler için kullanılan iki veya daha fazla çeşit atom içeren metal malzemeler için kullanılan bir potansiyeldir (Daw ve Baskes,1984). Gömülü atom modeli(GAM) potansiyeli, her bir atomun tüm komşu atomlar tarafından oluşturulan bir elektron gazına gömülü olduğu düşünülmektedir. Belirli bir yoğunluktaki elektron gazına bir atom yerleştirmek için gereken enerji miktarı, birçok atom etkilerini dikkate alan gömme işlevi olarak adlandırılmaktadır. GAM potansiyel enerjisi 3.9' daki denklemde gösterilmiştir.

$$E = \sum_{i=1}^N F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N (Vr_{ij}) \quad (3.9)$$

Burada E sistemdeki toplam potansiyel enerji, N sistemdeki toplam atom sayısı, ρ_i atom i 'nin elektron yoğunluğu, $F(\rho_i)$ elektron yoğunluğuna bağlı enerji terimi, r_{ij} atom i ile atom j arasındaki mesafe, Vr_{ij} atom i ile atom j arasındaki potansiyel enerjiyi ifade etmektedir. Aynı gömme fonksiyonu, bir alaşımdaki ve ayrıca saf malzemedeki bir atomun enerjisini hesaplamak için kullanılabilir. Atomların bir element sistemi için, üç ölçülebilir fonksiyon belirtilmelidir: gömme fonksiyonu, ikili etkileşim ve elektron bulutu katkı fonksiyonudur. İki elementten oluşan bir alaşımın GAM potansiyeli etkileşimi AA, A-B ve B-B'den oluşmaktadır. Her atom türü için bir tane olmak üzere iki gömme işlevi ve iki elektron bulutu katkı işlevi vardır. Genel olarak bu işlevler, tablolatırılmış bir formatta sağlanır ve kübik çizgilerle enterpolasyona tabi tutulmaktadır.

3.9.2. Hareket denklemleri

MD simülasyon yöntemiyle gerçekleştirilen simülasyonlar, potansiyel bir $V(r_1, \dots, r_N)$ fonksiyonu aracılığıyla etkileşen N cisimli bir sistem için klasik hareket denklemlerinin çözülmesine dayanmaktadır. Bu hareket denklemleri daha sonra Newton yasaları tarafından verilmektedir:

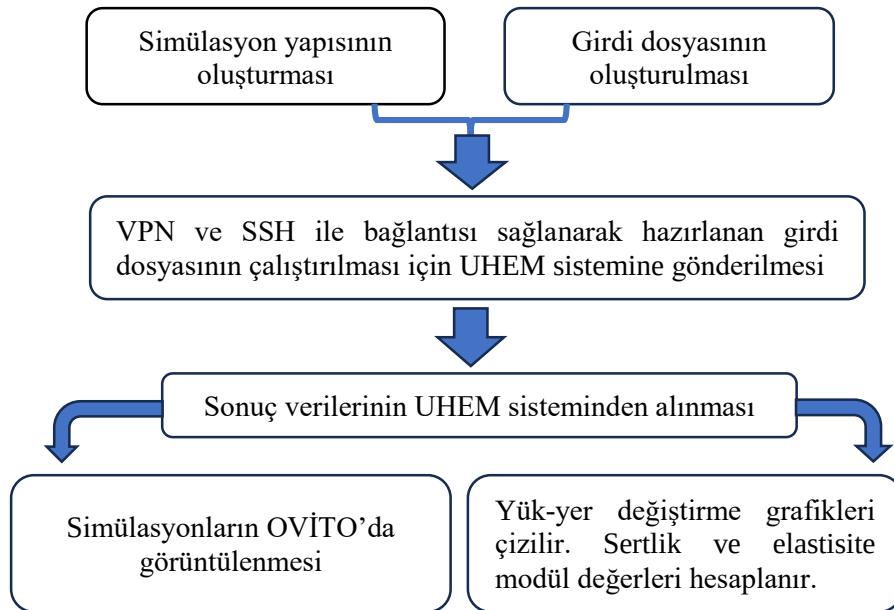
$$m_i \cdot \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = F_i \quad (3.10)$$

Burada F_i , i 'inci parçacığın kuvvetidir ve denklem 3.10'dan bulunmaktadır:

$$F_i = -\nabla V(r_1, \dots, r_N) \quad (3.11)$$

3.10. MD Simülasyon Girdi Dosyasının Oluşturulması ve Çalışma Prensipleri

Moleküler dinamik simülasyonlara başlamak için dikkate alınması gereken bazı temel varsayımlar vardır. İlk olarak, simülasyondaki tüm moleküller ve atomlar, etkileşen noktalarından oluşan bir sistem olarak tanımlanmaktadır. Bunun nedeni, çekirdeklerin elektronlardan çok daha ağır ve yavaş olduğunun varsayılması ve çekirdeğin herhangi bir hareketine anında yanıt vermesidir. Bu nedenle, çekirdekler, Borh-Oppenheimer yaklaşımını tanımladığı gibi kabul edilen tek çekirdeklerdir. Bu maddi noktaların her biri, hareketini tanımlayan kendi konum ve hız vektörü kullanılarak tanımlanmaktadır. İkinci olarak, bu sistemin evriminin incelenmesi, klasik hareket denklemlerini istenen sayıda zaman adımı için veya bazı yakınsama kriterleri karşılanana kadar entegre edilerek yapılmaktadır. MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen yöntem Şekil 3.18’de gösterilmiştir.



Şekil 3.18. MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon şeması

3.10.1. MD Simülasyon yöntemi için simülasyon yapısı ve girdi dosyasının oluşturulması

Kuantum mekaniği (QM) ve MD simülasyon gibi atom modelleme ve simülasyon yöntemleri, nano ölçekli malzeme sistemlerinin mekanik davranışının araştırılmasında önemli bir rol oynamaktadır (Meguid vd. 2018). Ayrıca nano ölçekte iki cisim arasındaki

temas probleminin doğru bir temsilini sağlamaktadır. Tek kristalli bakır ve tek kristalli silisyum malzemelerinin nano ölçekte laboratuvar ortamında yapılan deneyleri atomik seviyede incelemek için LAMMPS ideal bir simülasyon programıdır (Ziegenhain ve Urbassek 2009). Nanoindentasyon ve nano çizik için elmas uçlu takımın atom sayıları belirlenip elmas kafes yapısı oluşturulacaktır. MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyonlarda kullanılan atomlar arası potansiyeller, hem niceliksel hem de niteliksel eğilimlerin tahmini ve malzemelerin fiziksel temeli için yaygın kullanılmaktadır. Bu, kohezyon, termal genleşme, elastik ve plastik malzeme davranışı gibi özellikleri analiz etmemizi sağlar. Simülasyon deneyleri için bakır ve silisyum atomlarının etkileşimini modellemek için GAM (Embedded atom model) ve Tersoff potansiyelleri kullanılmıştır.

3.10.2. Simülasyon yapısı

Simülasyonu başlatmak için birimler (metal), sınır koşulları (p p s) ve atom stili (atomik) parametreleri tanımlanır.

```
clear
```

```
units metal
```

```
dimension 3
```

```
boundary p p s
```

```
atom_style atomic
```

Simülasyon hücreni oluşturmak için LAMMPS'te bir FCC (face-centered cubic) örgüye sahip bir simülasyon hücreni tanımlar. lattice komutuyla örgü tipi ve parametresi ayarlanır, region komutuyla simülasyon kutusunun boyutları belirlenmektedir. Create_box komutu ile 3 boyutlu bir yapı oluşturulur.

3.10.3. Simülasyon hücresi

```
lattice fcc 3.615 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
```

```
region box block -1000 1000 -1000 1000 -650 200 units box
```

```
create_box 3 box
```

Simülasyon kutusu, yüzey merkezli kübik (FCC) yapıda ve 3.615 Å kafes parametresine sahip bir bakır (Cu) sistemi oluşturur. orient komutları, kristal eksenlerini simülasyon kutusunun x, y ve z yönlerine hizalar. region cuatoms komutuyla, x ve y yönlerinde -1000

ile 1000, z yönünde ise -738,48 ile 0 arasında bir bölge tanımlanır. Son olarak, create_atoms komutuyla, tanımlanan bu bölgede kafes yapısına uygun olarak atomlar oluşturulmuştur.

```
lattice fcc 3.615 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
```

```
region cuatoms -1000 1000 -1000 1000 -738.48 0 units box
```

```
create_atoms 1 region cuatoms
```

Bu LAMMPS komutunda, atom fazlalıklarını temizlemek için üst ve alt bölgeler oluşturur. region komutlarıyla üst (r_top), alt (r_bottom) ve temel (r_base) bölgeler tanımlanır, ardından bu bölgeler sırasıyla top, bottom ve base adlı gruplar halinde toplanır. delete_atoms komutuyla, top ve bottom gruplarına ait atomlar silinir. Daha sonra, iç kısımdaki bir blok bölgesi (r_inside) tanımlanır, bu bölgeye ait atomlar inside grubunda toplanır ve tüm atomlardan inside grubunu çıkararak fat grubu oluşturulur. Son olarak, fazlalıklar (fat grubu) delete_atoms komutuyla silinmektedir.

```
region r_top block INF INF INF -50 0 units box
```

```
region r_bottom block INF INF INF -550 units box
```

```
region r_base block INF INF INF -500 units box
```

```
group top region
```

```
group bottom region
```

```
delete_atoms group top
```

```
delete_atoms group bottom
```

```
region r_inside block -800 800 -800 800 INF INF units box
```

```
group inside region r_inside
```

```
group fat subtract all inside
```

```
delete_atoms group fat
```

Bu bölümde, grinti ucu dört düzlem ile berkovich tip uç oluşturulmuştur.

3.10.4. Simülasyon modeli için alaşımın oluşturulması

```
variable Cu equal 100
```

```
variable Ni equal 5
```

```
set type 1 type/fraction 1 ${Cu}
```

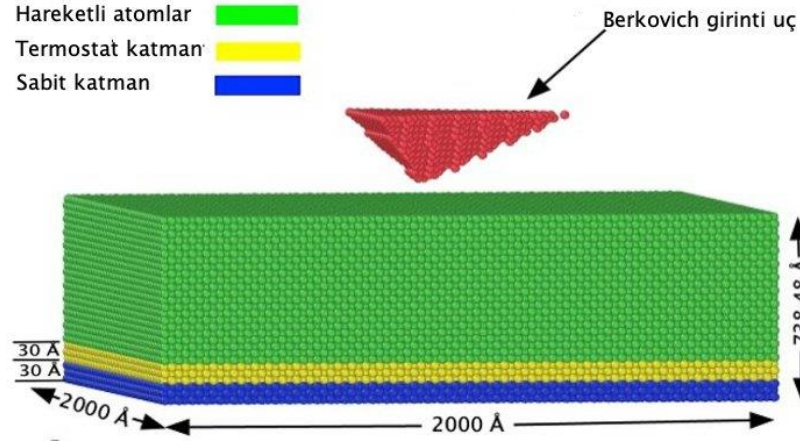
```
set type 1 type/fraction 3 ${Ni}
```

Bu LAMMPS komutunda, bakır (Cu) ve nikel (Ni) atomlarının özelliklerini tanımlamak için kullanılır. variable Cu equal 100 komutuyla bakırın miktarı veya bir özelliği 100

olarak tanımlanır, variable Ni equal 5 komutuyla ise nikel için bu değer 5 olarak atanır. set type 1 type 1 \${Cu} komutu, atom tipi 1'e (örneğin, Cu atomları) 100 birimlik bir özellik veya parametre atar. set type 1 type 3 \${Ni} ise atom tipi 3'e (örneğin, Ni atomları) 5 birimlik bir değer atar. Bu şekilde, farklı atom türleri için özellikler tanımlanmış olur.

```
pair_style hybrid eam 2.5 lcbop
pair_coeff 1 2 morse 0.0870 5.1400 #Cu C
pair_coeff 2 3 morse 0.433 3.244 2.316 #C Ni
pair_coeff * * eam/alloy CuNi.eam.alloy Cu NULL Ni
mass 1 63.546
mass 2 12.0
mass 3 58.69
write_data output.lmpdat nocoeff
```

Çift potansiyel parametreleri, atomlar arasındaki etkileşimleri tanımlamak için kullanılır. Pair_style hybrid eam 2.5 lcbop komutu, birden fazla potansiyel stiline (hybrid) kullanılacağını belirtir ve bu durumda "eam" (Gömülü atom methodu) ve "lcbop" (Long-range Carbon Bond-Order Potential) yöntemleri tanımlanır. pair_coeff 1 2 morse 0.0870 5.1400 komutuyla, atom tipi 1 (örneğin Cu) ve atom tipi 2 (örneğin C) arasındaki etkileşim için Morse potansiyeli kullanılır ve bu potansiyelin parametreleri (bağ kuvveti ve bağ uzunluğu) tanımlanır. Benzer şekilde, pair_coeff 2 3 morse 0.433 3.244 komutuyla, atom tipi 2 (C) ve atom tipi 3 (Ni) arasındaki Morse potansiyeli tanımlanır. Son olarak, pair_coeff * * eam/alloy CuNi.eam.alloy Cu NULL Ni komutu, EAM/alloy potansiyel dosyasını kullanarak Cu ve Ni atomları arasındaki alaşım etkileşimlerini tanımlar, ancak C atomu için bir değer atanmamış olarak bırakılır (NULL). Bu tanımlar, sistemdeki atomlar arasındaki fiziksel etkileşimleri modellemek için gereklidir. Şekil 3.19'da indentasyon deneyleri için modellenen simülasyon modeli gösterilmiştir.



Şekil 3.19. Simülasyon modeli

3.10.5. Simülasyon girdi dosyası

Bu girdi dosyasında, girinti ve malzeme yüzeyi doğru şekilde tanımlanmış, atomlar arasında potansiyeller atanmış ve sıcaklık kontrolü, yükleme hızı, sınır koşulları gibi simülasyon parametreleri dikkatlice belirlenmiştir. Dosya, girinti hareketini ve yükün malzeme üzerindeki etkisini modellemek için gerekli bölge tanımlamalarını, malzeme atomları için potansiyel parametrelerini ve simülasyon sırasında yapılacak hesaplamaları içermektedir. Bu model, oluşturulan simülasyon numunelerinin nanoindentasyon altındaki mekanik tepkisini anlamak için kullanılacaktır. Aşağıda girdi dosyası ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

variable etol equal 1.0e-25

variable ftol equal 1.0e-25

variable maxiter equal 5000

variable maxeval equal 10000

variable latparam equal 3.615

variable rate equal -0.05

Değişkenlerin düzenlenmesi bölümünde simülasyon için kullanılacak çeşitli değişkenleri tanımlamaktadır. variable komutuyla tanımlanan bu değişkenler, simülasyonun hassasiyetini, iterasyon sayılarını ve malzeme özelliklerini kontrol etmek için kullanılır.

etol ve ftol: Enerji toleransı (1.0e-25) ve kuvvet toleransı (1.0e-25) olarak tanımlanmıştır. Bu değerler, simülasyonun durdurulma kriterlerini belirler, yani enerji ve kuvvet bu tolerans seviyelerine ulaştığında simülasyon durdurmaktadır. Maxiter ve maxeval değişkeni, maksimum iterasyon sayısı (5000) ve maksimum değerlendirme sayısı

(10000) ayarlanmıştır. Bu değerler, minimizasyon sırasında hesaplamaların sınırlarını belirlemektedir. Latparam değişkeni, kristal örgü parametresi olarak 3.615 Å tanımlanmıştır. Bu, simülasyonda kullanılan malzemenin birim hücre boyutunu ifade etmektedir. Rate değişkeni, yükleme veya deformasyon hızını ifade eder ve burada -0.05 olarak tanımlanmıştır. Negatif değer, yükleme yönünü veya hacim küçülmesini işaret etmektedir.

clear

timestep 0.001

units metal

dimension 3

boundary p p s

atom_style atomic

Simülasyonu başlatma komutu, bir simülasyonu başlatmak ve atomistik yapıyı oluşturmak için kullanılmaktadır. İlk olarak, clear komutu mevcut simülasyon ortamını temizler. Zaman adımı olan timestep 0.001 komutu, belirlenmiştir. units metal komutu, simülasyonda metal birimlerini kullanır, bu da enerji birimini eV, uzunluk birimini Å (angstrom), ve kütle birimini amu (atomik kütle birimi) yapar. dimension 3 komutu simülasyonu üç boyutlu yapar. boundary p p s komutu, x ve y yönlerinde periyodik sınırlar (p), z yönünde ise serbest sınır (s) tanımlar. atom_style atomic komutu ise, atomik stilin kullanılması gerektiğini belirtmektedir. Read_data output.lmpdat komutu, daha önce hesaplanmış ve saklanmış bir atomistik yapıyı içeren verileri okur ve simülasyona dahil etmektedir.

read_data output.lmpdat

Compute csym all centro/atom fcc: Atomlar arasındaki simetriyi ve FCC yapısındaki düzeni değerlendirir. Compute eng all pe/atom: Atomların potansiyel enerjilerini hesaplamaktadır.

compute csym all centro/atom fcc

compute eng all pe/atom

reset_timestep 0

thermo 100

thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz

min_style cg

minimize \${etol} \${ftol} \${maxiter} \${maxeval}

write_data min.lmpdat

Minimize etmek komutları, simülasyonun başlatılmasında ve çıktı verilerinin kaydedilmesinde kullanılır. reset_timestep 0 komutu, zaman adımını sıfırlayarak simülasyonu başlatır. thermo 100 komutu, her 100 adımda bir termal verilerin çıktı olarak yazdırılmasını sağlar. Thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz komutu, özel termal parametrelerin (adım sayısı, potansiyel enerji, sistem boyutları, basınç bileşenleri) çıktı olarak eklenmesini sağlamaktadır. Min_style cg ve Mminimize \${etol} \${ftol} \${maxiter} \${maxeval} komutları, minimizasyon işlemi için kullanılan stil ve parametreleri belirlemektedir. Son olarak, write_data min.lmpdat komutu, simülasyon verilerini min.lmpdat dosyasına yazarak dışa aktarılmasını sağlamaktadır.

```
compute new all temp
```

```
velocity all create 300 4882748 temp new
```

```
shell mkdir output
```

```
shell cd output
```

İlk hızların ayarlanması bölümünde, LAMMPS simülasyonunun başlangıç hızlarının ayarlanması ve çıktı dosyalarının düzenlenmektedir. İlk olarak, compute new all temp komutu, tüm sistem için sıcaklığı hesaplayacak bir değişken tanımlanır. Daha sonra, velocity all create 300 4882748 temp new komutu, tüm atomlara 300 K sıcaklıkta rastgele bir hız dağılımı atar; burada "4882748" rastgele sayı üretici için kullanılan değeridir. shell mkdir output komutu, "output" adında bir klasör oluşturur ve shell cd output komutu ile simülasyon sonuçlarının bu klasöre kaydedilmesi sağlanır. Bu işlemler, simülasyonun düzenli bir şekilde başlatılması ve çıktılarının organize edilmesi için yapılmıştır.

```
fix SPRING base spring/self 100
```

```
fix 4 inner nvt temp 300.0 300.0 ${Tdamp}
```

```
#fix 5 indenter rigid single force * off off on langevin 300.0 300.0 100 428984
```

```
thermo 1000
```

```
thermo_modify temp new
```

```
thermo_style custom step pe etotal lx ly lz press pxx pyy pzz
```

```
dump DUMP all custom 10000 dump.*.lammprj id type element x y z
```

```
dump_modify DUMP sort id element Cu C Ni
```

```
dump DUMP2 all custom 10000 dump.full.lammprj id type element x y z ix iy iz vx  
vy vz fx fy fz
```

```
dump_modify DUMP2 sort id element Cu C Ni
```

```
run 20000
```

```
fix 5 indenter rigid/nvt single temp 300.0 300.0 ${Tdamp}
```

```

compute force_indenter indenter group/group inner
fix force_output all ave/time 1 1000 1000 c_force_indenter[1] c_force_indenter[2]
c_force_indenter[3] file force.txt
compute      peratom all stress/atom NULL
compute      p all reduce sum c_peratom[1] c_peratom[2] c_peratom[3]
variable      press equal -(c_p[1]+c_p[2]+c_p[3])/(3*v_sample_vol)
fix stress_output all ave/time 1 1000 1000 v_press file mystress.txt

```

Rahatlama bölümünde, bir simülasyonun rahatlama aşamasını ve veri toplama işlemlerini düzenlemektedir. İlk olarak, atomların yer değiştirmelerini sınırlamak için "base" grubuna bir yay kuvveti uygulanmıştır. Ardından, "inner" grubu atomları 300 K sıcaklıkta bir NVT termostadı ile dengelenir. Simülasyon sırasında, her 1000 adımda bir termodinamik veriler (potansiyel enerji, toplam enerji, kutu boyutları ve basınç bileşenleri gibi) kaydedilir ve atomların konum, hız ve kuvvet bilgileri düzenli olarak dosyalara yazılmıştır. Rahatlama simülasyonu 20.000 adım boyunca çalıştırılır. Girinti, 300 K sıcaklıkta bir NVT termostadı altında hareket etmiştir. Girinti ile atomlar arasındaki kuvvet bileşenleri hesaplanarak "force.txt" dosyasına kaydedilir. Ayrıca, her atom için gerilme bileşenleri hesaplanır ve toplam gerilmelerden basınç değeri elde edilmiştir. Bu basınç değerleri, her 1000 adımda bir "mystress.txt" dosyasına yazılır. Bu komutlar, simülasyon sırasında sistemin davranışını incelemek ve girinti kuvvetleri ile atomik gerilmeleri analiz etmek için kullanılmıştır.

```

fix IND indenter move linear 0 0 ${rate} units box
# ----- End of script -----
run 600000

```

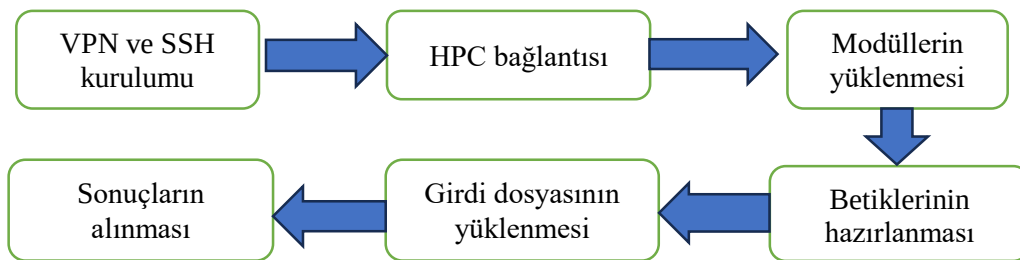
İndantasyon bölümünde, LAMMPS simülasyonunda bir girinti (sert bir yapı) kullanılarak gerçekleştirilen bir indentation işlemini tanımlar. fix IND indenter move linear 0 0 \${rate} units box komutu, indenter yapısının simülasyon kutusu içinde doğrusal bir hızla hareket etmesini sağlamaktadır. Hareket x ve y yönlerinde sıfır hızda, sadece z yönünde \${rate} değişkeni ile tanımlanan hızda gerçekleşir. "units box" ifadesi, hız biriminin simülasyon kutusu birimlerinde tanımlandığını belirtmekedir. Run 600000 komutu ise simülasyonu 600.000 adım boyunca çalıştırarak indenter hareketi sırasında oluşan fiziksel olayların gözlemlenmesine olanak tanır. Bu işlemler, malzemenin yüzeyine yapılan girinti ile mekanik özelliklerin ve malzeme davranışının analiz edilmesi için kullanılmıştır.

3.10.6. VPN ve SSH ile bağlantısı ile girdi dosyasının çalıştırılması

Moleküler dinamik simülasyon deneyleri için hazırlanan giriş dosyası, İstanbul Teknik Üniversitenin Ulusal Yüksek Başarımli Hesaplama Merkezinde ve TÜBİTAK'ın Türk Ulusal Bilim E-Altyapısı(TRUBA) üzerinden çalıştırmak için öncelikle kurum tarafından sağlanan VPN(Virtual Private Network) bağlantısını kurmak gerekir. Bunun için uygun VPN istemcisi yüklenir, konfigürasyon dosyası eklenir ve kullanıcı adı ile şifre bilgileri girilerek bağlantı gerçekleştirilir. VPN bağlantısı, terminal üzerinden SSH(Secure Shell) kullanılarak UHEM sunucusuna bağlanılır. Input dosyası, SCP(Secure Copy Protocol) komutu ile UHEM sunucusuna aktarılır. Ardından, SLURM(Linux kaynak yönetimi yardımcı programı) iş planlayıcısı için bir komut dosyası hazırlanır. Bu dosyada, görev adı, çıkış ve hata dosyaları, kullanılacak işlemci ve bellek miktarı gibi bilgiler tanımlanır ve LAMMPS simülasyonu çalıştırma komutu eklenir. SLURM dosyası hazırlandıktan sonra sbatch komutu ile iş kuyruğa gönderilir ve sistem tarafından verilen iş ID'si ile görevin durumu takip edilir. Simülasyon tamamlandığında sonuç dosyaları yine SCP komutu ile yerel bilgisayara indirilmektedir.

3.10.7. Girdi dosyalarının yüksek başarımli bilgisayarda hesaplanması

MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon işleminde kullanılacak malzemelerin doğru hesaplaması oldukça süre almaktadır. Bunun için yüksek başarımli hesaplama bilgisayarlara ihtiyaç duyulmaktadır. Deneyler, İstanbul Teknik Üniversitenin Ulusal Yüksek Başarımli Hesaplama Merkezi ve TÜBİTAK'ın Türk Ulusal Bilim E-Altyapısı(TRUBA)'nda bulunan yüksek performanslı bilgisayarlarda gerçekleştirilmiştir. Şekil 3.20'de UHEM ve TRUBA sisteminin iş yükleme ve çalışma şeması verilmiştir.



Şekil 3.20. UHEM ve TRUBA sisteminine iş yükleme şeması

3.10.8. Sonuç verilerinin UHEM sisteminden alınması

UHEM (Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi) sisteminden sonuç verilerini almak için öncelikle SSH protokolü kullanılarak sisteme bağlanılmalı ve ilgili proje dizinine erişilmiştir. Hesaplama sonrası üretilen veriler belirlenen çalışma dizininde bulunur ve uygun komutlarla (örneğin, ls -lh ve cat) kontrol edilebilir. Verilerin güvenli bir şekilde yerel sisteme indirilmesi için scp veya rsync gibi veri transfer protokolleri tercih edilmelidir. Büyük dosya transferlerinde işlem süresini optimize etmek amacıyla tar -czvf komutu ile sıkıştırma işlemi gerçekleştirilebilir ve ardından sıkıştırılmış dosya güvenli bir şekilde yerel bilgisayara indirilebilir. İndirilen verilerin açılması ve analiz edilmesi sürecinde, ilgili formatın gerektirdiği yazılım ve araçlar kullanılmalıdır. Bu yöntemlerle, UHEM üzerinde gerçekleştirilen yüksek başarımlı hesaplama (YBB) simülasyonlarının sonuçlarına etkin bir şekilde erişim sağlanabilmektedir.

3.11. MD simülasyon sonucu sertlik, indirgenmiş elastisite modülü ve elastisite modülü değerlerin hesaplanması

Modellenen simülasyonlarda gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde malzemede oluşan girinti temas alanını ve elastisite modülünü tahmin etmek için kullanılan en yaygın yöntem olan Oliver-Pharr yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntemde yük-girinti grafiği verilerinin boşaltma kısmının güç kanunu ilişkisine göre formülizasyonu yapılmıştır (VanLandingham, 2003; Meneve ve ark., 1996). Nano girintileri analiz etmek için en önemli parametreler yük ve temas derinliğidir. Şekil 20 ve Şekil 21’de Cu-Ni alaşımlarının ve tek kristalli Cu[100] metalinin yük ve derinlik grafikleri verilmiştir. Sertlik (H) ve elastisite modülü (E) hesaplanması için indent temas alanı, derinliği ve indentin uyguladığı yük belirlendikten sonra Oliver ve Pharr (Oliver ve ark., 1992) denklemi ile sertlik (H) ve elastisite modülü hesaplanmıştır. Bu denklemler şu şekildedir:

$$hc = h - s \frac{L}{S} \quad (3.12)$$

hc temas derinliğidir, h_f iz derinliğidir, h toplam derinliktir, s girinti geometrisine bağlı bir sabittir, P yüküdür. S, boşaltma başlangıcında boşaltma eğrisinin eğimi ile temsil edilen temas sertliğidir ve genellikle şu şekilde yazılır.

$$S = \frac{dP}{dh} \quad (3.13)$$

Aynı makalede (Oliver ve ark., 1992), daha önce kullanılan doğrusal yaklaşım yerine, boşaltma eğrisini temsil etmek için bir kuvvet yasası olan Denklem 3.14'in kullanılması önerilmiştir.

$$L = \alpha(h - h_f)^m \quad (3.14)$$

Aynı makalede (Oliver ve ark., 1992), daha önce kullanılan doğrusal yaklaşım yerine, boşaltma eğrisini temsil etmek için bir kuvvet yasası olan denklem 3.14'ün kullanılması önerilmiştir. İndentasyon deneyleri süresince matrislerde elastik deformasyonun girinti etrafında artan bir eğilim gözlemlenmiştir. Simülasyon modellerinin sertlik ve elastik modül analizleri gerçekleştirilmiştir. Sertlik, malzemenin plastik deformasyona direnme yeteneğini temsil eden malzemenin karakteristik değeridir (Goel ve ark., 2015 ; Gao ve ark.,2015). Genellikle, P_{max} yükünün A temas alanına oranı olarak tanımlanır ve genellikle denklem 3.15'te gösterilen formülle hesaplanmaktadır.

$$H = \frac{P_{max}}{A} \quad (3.15)$$

İşlemdeki temas alanını doğru bir Şekilde hesaplamak için, atomik temas yöntemi, sertlik değişimini elde etmek için hesaplamada yaygın olarak kullanılmaktadır(Saraev ve Miller, 2005; Deng ve ark.,2018). Bu yöntem, nanoindentasyonun moleküler dinamik simülasyonları gerçekleştirilen nanoindentasyon deneylerinde kullanılmıştır. Maksimum girinti derinliğindeki elastisite modülü Oliver-Pharr yöntemi ile hesaplanmıştır(Oliver ve Pharr, 1992). Hesaplama denklem 3.16'da gösterilmiştir.

$$E_r = \frac{1}{\beta} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{S}{A_c} \quad (3.16)$$

A_c , nanoindentasyonun ucun malzeme yüzeyinde oluşturduğu temas alanıdır. β , 1.034'e sabitine eşittir. S , $S = dP/dh$, temas sertliğidir. E_r indirgenmiş elastisite modüldür ve elastisite modül ile ilişki aşağıdaki gibidir:

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1-v_m^2}{E_m} + \frac{1-v_i^2}{E_i} \quad (3.17)$$

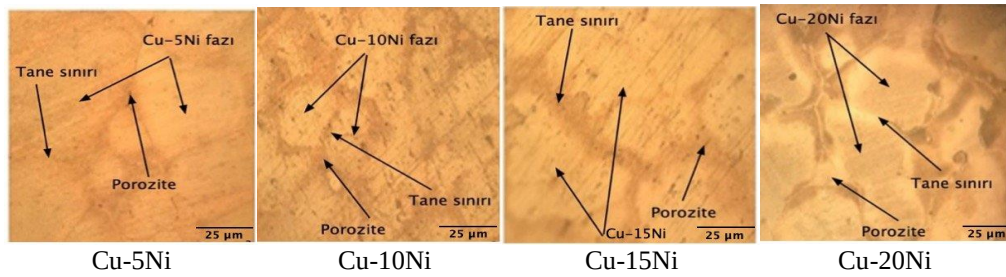
E_m ve v_m malzeme young modülü ve poisson oranı; E_i ve v_i , ise girintili malzemenin young modülü ve Poisson'un oranıdır. İndenter young modülü $E_i = 1141$ GPa ve poisson oranı $v_i = 0.07$ olarak alınmıştır (Zheng ve ark., 2007). Al-Si alaşımları poisson oranı yaklaşık $V_m = 0.33$ değerindedir (Mocellin ve ark., 1993).

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Optik Mikroskop ile Al-Si ve Cu-Ni Alaşımların Mikro Yapısal Analizlerinin Yapılması

4.1.1. Cu-Ni ve Al-Si alaşımların mikroyapı analizi

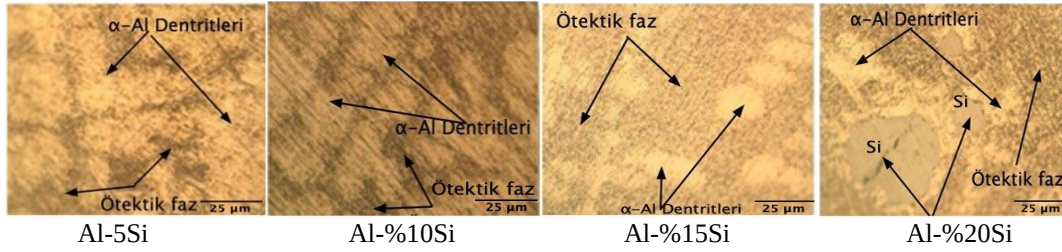
Şekil 4.1’de Cu-Ni alaşımların boşluksuz bir yapıya sahip olduğu ve ortaya çıkan ana fazın Cu-Ni fazı olduğu söylenebilir. Faz diyagramlarından da anlaşılacağı üzere Ni elementinin Cu fazı içerisinde çözünürlüğü yüksektir. Mikroyapısal analizi yapılan alaşımlarda, herhangi bir kalıntı, ikinci faz gözlemlenmemiştir. İncelenen optik mikroskop fotoğraflarından %5 Ni ilavesi yapılan Cu matris içerisinde kristal ikizlenmenin meydana geldiği açıkça görülmektedir. Cu-Ni alaşımları içerisinde dışarıdan ilave Ni arayer atomları sokulduğu için, Cu-Ni alaşımı saf bakıra göre daha fazla dayanıma sahiptir. Bu da genel olarak mekanik özellikler bakımından mukavemet artırıcı bir rol oynamaktadır. Cu matris içerisinde Ni’nin çözünürlüğünün artması ile Cu-Ni alaşımın sertliğinin artması beklenmektedir. %10-%15-%20 Ni ilavesi yapılan alaşımlarda % 5 Ni ilavesi yapılanlara göre tane boyutlarının, benzer tane boyutuna sahip homojen bir mikroyapı görülmektedir. Ni ilavesinin % 20 ile çıkması ile birlikte tanelerin eş eksenli formda olduğu ve tanelerin daha küresel bir forma kavuştuğu gözlemlenmiştir.



Şekil 4.1. Cu-Ni alaşımlarının mikroyapısal görüntüsü

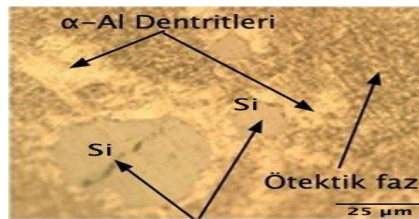
Şekil 4.2’de Al-Si alaşımlarında Al içerisine ilave edilen Si parçacıklarının şekline ve dağılımına göre tribolojik özellikleri ve mekanik özellikleri değişkenlik göstermektedir.

Döküm yoluyla elde edilen malzemelerde mekanik özellikler bakımından dendritik yapının daha az olduğu ve kaba taneli yapılardan çok, ince ve dendritik olmayan yapılar tercih edilmektedir. Elde edilen optik mikroskop fotoğrafları incelendiğinde tüm mikroyapı fotoğraflarında Al-Si ötektik fazlarının, alüminyum dendritik yapılarının ve Si parçacıklarının varlığı görülmektedir. Elde edilen döküm alaşımında mikroyapısal olarak dendritik katılaşmanın meydana geldiği Al döküm içerisinde Si'nin tüm matris içerisinde homojen bir şekilde dağılmadığı gözlemlenmektedir. Al matrisi içerisine farklı oranlarda Si ilavesi ile dendritik yapıların ve ötektik bileşimin değişime uğradığı mikroyapı görüntülerinde açıkça görülmektedir. Al matris içerisinde Si fazının ilave oranı arttığında yapı içerisinde dendrit kollarının parçalanarak daha küçük ayrı tanelere dönüştüğü, Si'nin dendritleri baskılayarak dendritlerin gelişmelerine müsaade etmediği görülmektedir. Si oranlarının artmasıyla dendritik yapıların tane boyutlarının azalarak ötektik faz oluşumun arttığı söylenebilir.



Şekil 4.2. Al-Si alaşımların mikroyapı görüntüsü

Alüminyum içerisinde Si varlığının ağırlıkça %20 düzeye ulaşmasıyla mikroyapı içerisinde birincil ötektik lamellar yapıda olmayan Si parçacıklarının varlığı Şekil 4.3'te görülmektedir. Genel olarak alüminyum yapı içerisinde Si varlığının artması Al-Si alaşımlarında yüksek akışkanlık, düşük küçülme oranı ve düşük yoğunluk gibi özellikler kazandırmaktadır. Si oranı arttıkça alaşımda bulunan birincil Si parçacıkları aşınma direncini artırarak sertlik dayanımında iyileşmeler göstermektedir.

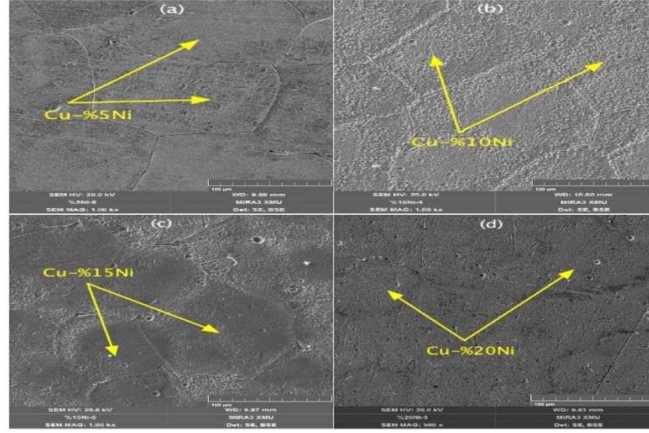


Şekil 4.3. Al-%20Si alaşımın mikroyapısı

4.2. Alaşımların SEM ve EDX Analizi

4.2.1. Cu-Ni alaşımların SEM analizleri

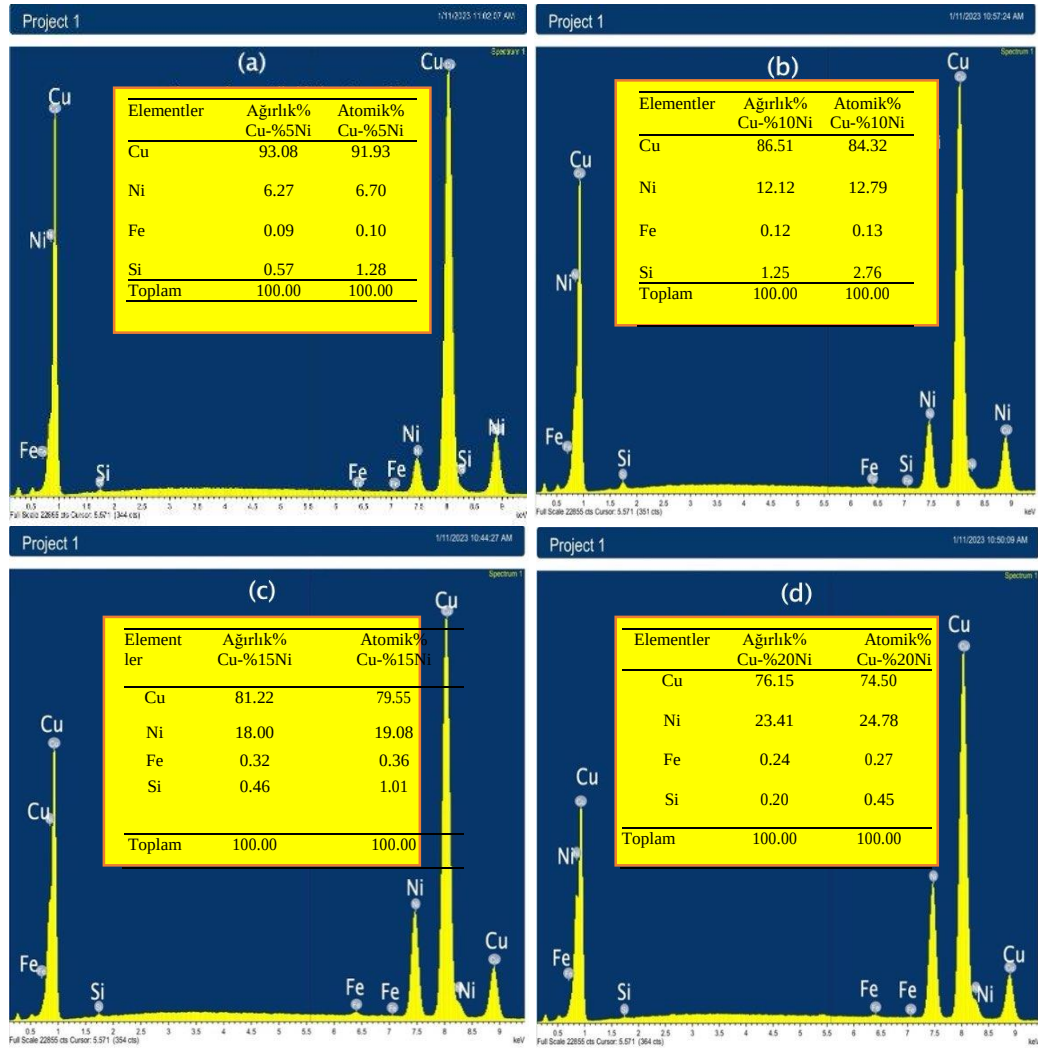
Bakır(Cu)-Nikel(Ni), alaşımları izomorfik bir alaşımdır. Nikel bakır matrisinde tamamen çözüntüğü için bakır-nikel alaşımları tek fazlı alfa yapılarındadır. Bakır-nikel döküm yapısı, azalan nikel içeriğine sahip alfa taneciklerinden oluşmaktadır. Katılaştıran son sıvı olan interdendritik bölgeler bakırda daha yüksek olduğu Şekil 4.4'te gözlemlenmiştir



Şekil 4.4. a) Cu-%5Ni b) Cu-%10Ni c) Cu-%15Ni d) Cu-%20Ni alaşımların SEM görüntüsü

4.2.2. Cu-Ni alaşımların EDX analizleri

Cu-Ni alaşımlarının elementel bileşimlerini belirlemek için EDX(Enerji dağılımlı X-ışını) analizleri Sivas Cumhuriyet üniversitesi merkez laboratuvarlarında gerçekleştirilmiştir. Bu analizler, malzemenin içerdiği elementleri ve bu elementlerin dağılımını anlamak için kullanılmaktadır. Bu da Cu-Ni alaşımlarının yapısal ve kompozisyonel özelliklerinin ayrıntılı bir Şekilde incelenmesine olanak tanımaktadır. Şekil 4.14 'teki Çizelge 4.5'te Cu-%5Ni alaşımının 400µm alanda Enerji dağılımlı X-ışını(EDX) ile yapılan analizi sonucu Cu,Ni,Si,Fe elementlerin ağırlık ve yüzdelikleri verilmiştir.



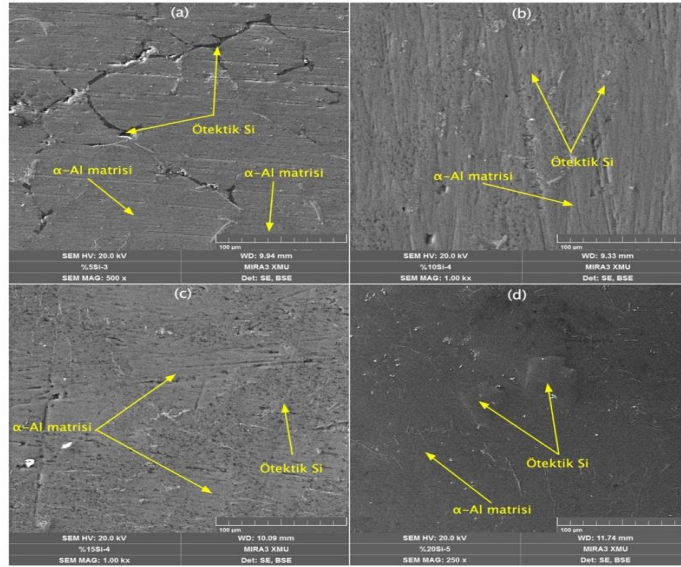
Şekil 4.5. a) Cu-%5Ni b) Cu-%10Ni c) Cu-%15Ni d) Cu-%20Ni alaşımların 400 μm^2 alandaki EDX analiz sonuçları

Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının Enerji Dağılımlı X-ışını Analizi (EDX) sonuçlarında bakır ve nikel pikleri gözlemlenmiştir. Tüm alaşımların EDX spektrumlarında, yüzeylerinde çok az miktarda Si ve Fe tespit edilmiştir. Bu durum, numune yüzeylerindeki safsızlıklar olarak açıklanabilmektedir (Ahmed ve ark., 2016).

4.2.3. Al-Si alaşımların SEM analizi

Magnezyum, Silisyum içerikli alüminyum alaşımları en çok kullanılan alaşımlardır (Akyüz ve ark., 2014). Alüminyumun düşük erime sıcaklığı ve atmosferik koşullarda diğer alaşım elementleri ile alaşım yapılabilme özelliği sayesinde dökülebilirliği arttırmaktadır. Alüminyum alaşımlarının sürekli dökümü, belirli kesitlere sahip uzun parçaların üretilmesi için endüstride yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Sürekli

döküm, ergimiş metalin dış yüzeyi su ile soğutulan açık uçlu bir kalıptan geçirilerek katı hale getirilmesi ve aynı zamanda aynı miktarda kalıbın altına geçirilmesi esasına dayanmaktadır(Lu ve ark.,2005). Erime sıcaklığındaki eriyikte atomlar tamamen rastgele hareket eder. Sıvı alüminyumun katılaşması sırasında atomlar birbirini çeker ve böylece bir atom diğer atoma en yakın şekilde dizilir ve alüminyumun yüzey merkezli kübik kafes yapısı oluşmaktadır. Alaşım eriyiği 660°C'ye soğuduğunda, sıvının farklı noktalarında kristalleşen çekirdekler oluşmaktadır. Alüminyum atomları her bir çekirdeğin etrafında sıralanmaya devam ettikçe, bu küçük çekirdeklerin boyutu hızla artmaktadır. Tane büyümesi, eriyik tamamen tükendiğinde ve kristaller tane sınırlarında bir araya geldiğinde sona ermektedir(Kahriman, 2014). Üretilcek parçanın mekanik özelliklerini belirleyen parametrelerden biri de mikroyapıdır. Alüminyum-silisyum alaşımları ötektik altı, ötektik ve ötektik üstü alaşımlar olmak üzere üç sınıfta adlandırılmaktadır. Ötektik altı alaşımlar ötektik bileşimden az silisyum içeren alaşımlardır. Bu alaşımlar genellikle %5-%10 arasında silisyum içermektedir. Yüksek dayanım ve süneklik gerektiren uygulamalarda kullanılmaktadır. Ötektik yapıda olan alüminyum-silisyum alaşımları %10-%13 arasında silisyum içeriğine sahip olmakla birlikte yapıları başlıca Al-Si ötektik fazından oluşmaktadır. Dar katılaşma aralığı, yüksek akıcılık, döküm kabiliyetinin yüksek olmasından dolayı aşınma dayanımı ve süneklik özelliklerine sahiptirler. %15- 20 oranında silisyum içeren ötektik üstü olarak adlandırılan alaşım yapılarında Al-Si ötektik fazı içerisine gömülü şekilde birincil silisyum fazı bulundurmaktadırlar. Bu çalışmada dökümleri gerçekleştirilen yüzdelik oranları %5,%10,%15 ve %20 Silisyum içeren Al-Si alaşım malzemelerin taramalı elektron mikroskopu görüntüleri ve EDX analizleri gerçekleştirilmiştir



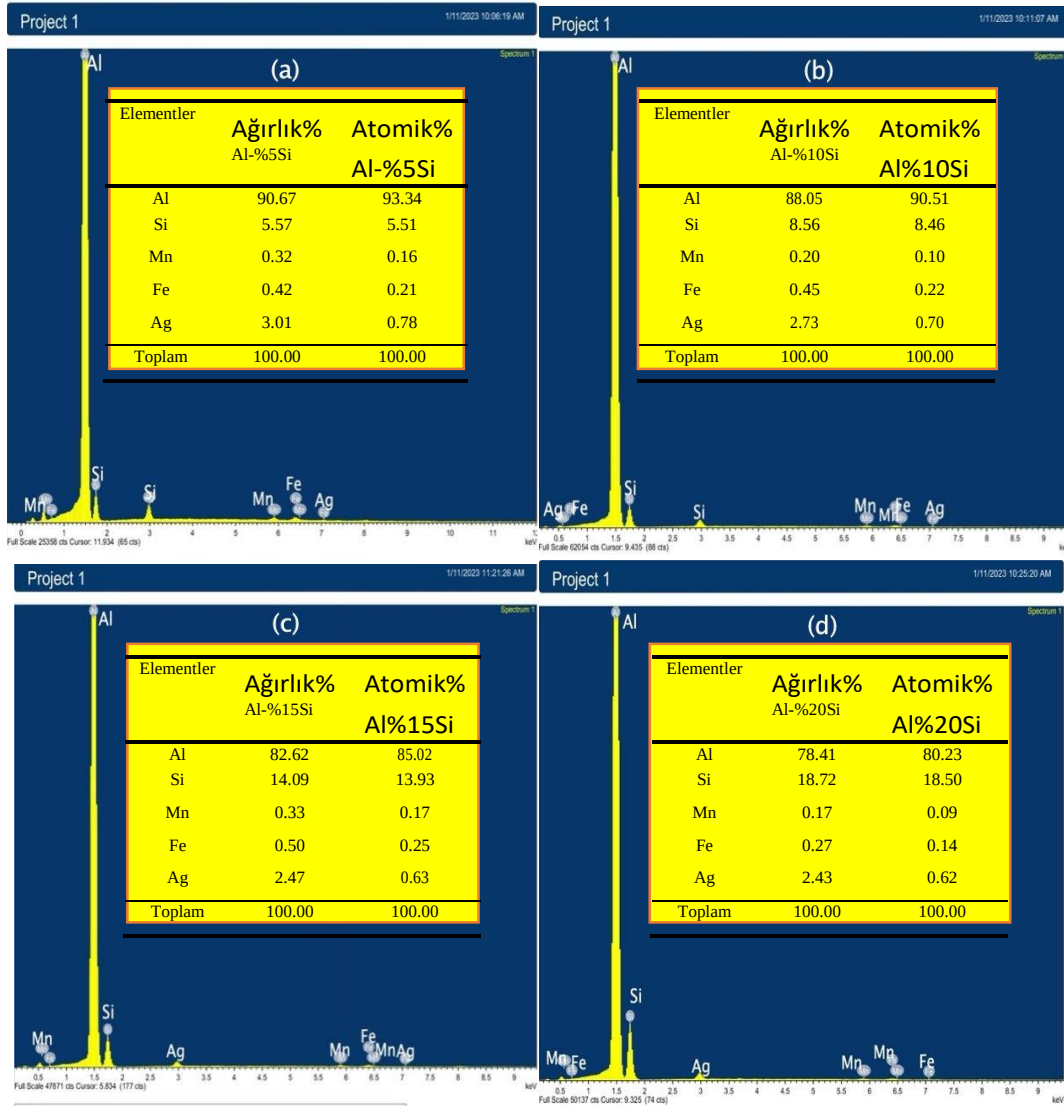
Şekil 4.6. a) Al-%5Si b) Al-%10Si c) Al-%15Si d) Al-%20Si alaşımların SEM görüntüsü

Al-Si alaşımları, Si yüzdelerine göre üç kategoriye ayrılmaktadır: hipoeüktik (ağırlıkça < 12.%), ötektik (ağırlıkça %12 ila ağırlıkça %12,6) ve hiperötektik (ağırlıkça > 12,6%). Al-%5Si ve Al-%10Si alaşımları hipoeüktik fazlardır. Ötektik altı Al-%5Si ve Al-%10Si alaşımlarının mikro yapısı genellikle bir birincil faz (α -Al) ötektik karışımından oluşmaktadır. Ötektik silisyum, geleneksel katılaştırma koşulları altında, plaka benzeri bir morfoloji halinde kristalleştiği görülmektedir. Al-%5Si ve Al-%10Si alaşımlarının SEM görüntülerinde gri renk α -Al matrisinin koyu renk, ötektik Si α -Al matrisinde dendritler arası bir bölge oluşturduğu görülmektedir. Ayrıca Si lamellerinden oluşan sürekli bir Si ağı gözlemlenmiştir. Si içeriği %12'den fazla olduğunda, birincil Si parçacıkları açısallı morfolojiye sahip büyük bir faz olarak kristalleşmeye başlamaktadır (Abboud ve Mazumder, 2020). Al-%15 Si'de Silisyum lamellerin uzunlamasına ötektik Si'nin kırılması gözlemlenmektedir. Al-%20 Si' de, ötektik Si'nin koyu renkli α -Al matrisinde uzun iğne şekli gözlemlenmiştir.

4.2.4. Al-Si alaşımların EDX analizleri

Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımları, döküm yöntemi kullanılarak üretilmiş ve enerji dağılımlı X-ışını analizi (EDX) ile kimyasal bileşimleri belirlenmiştir. Üretim sürecinde, başlangıçta %95 Al ve %5 Si içeren bir alaşım oluşturulmuş, ardından Si içeriği kademeli olarak artırılarak sırasıyla ağırlıkça %10, %15 ve %20 Si içeren Al-Si alaşımlar elde edilmiştir. Elde edilen EDX analiz sonuçları, her

bir alaşımda temel bileşenler olan Al ve Si'nin yanı sıra eser miktarda Mn, Fe ve Ag elementlerinin de bulunduğunu Şekil 4.7'de gösterilmiştir.



Şekil 4.7. a) Al-%5Si b) Al-%10Si c) Al-%15Si d) Al-%20Si alaşımların 400 μm^2 alandaki EDX analiz sonuçları

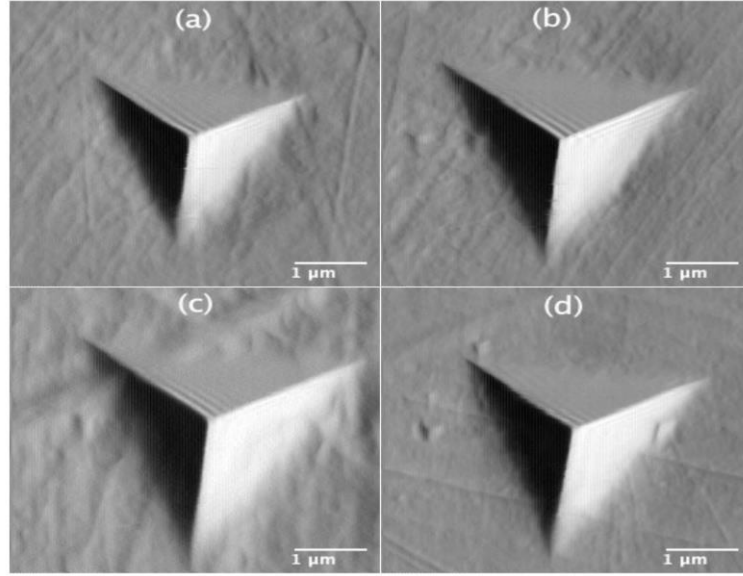
Analiz sonuçları incelendiğinde, Al içeriğinin ağırlıkça %90.67'den (Al-%5Si) %78.41'e (Al-%20Si) düştüğü, buna paralel olarak Si içeriğinin %5.57'den %18.72'ye arttığı gözlemlenmiştir. Atomik yüzdelere açısından değerlendirildiğinde de benzer bir eğilim mevcuttur. Literatürde de belirtildiği gibi, Si oranının artışı ile birlikte Al oranında beklenen bir azalma gerçekleşmektedir (Duxson , Mallicoat , Lukey, Kriven , & van Deventer, 2007). Al-Si alaşımlarında Si içeriğinin artışı, malzemenin mikro yapısal özelliklerini değiştirmekte ve mekanik performans üzerinde önemli bir etkiye sahip olmaktadır. Özellikle Si, Al matris içinde birincil veya ötektik faz olarak çökelmekte ve

bu çökelme, alaşımın sertliğini ve aşınma direncini artırmaktadır (La Parola , Deganello , Scirè , & Venezia, 2003). Mn ve Fe gibi elementlerin tüm örneklerde eser miktarda bulunması, üretim sürecinde kullanılan hammaddelerin saflığı ve ergitme koşullarıyla ilişkili olabilir. Özellikle Fe, Al-Si alaşımlarında sert ve gevrek intermetalik fazların oluşumuna neden olabilir ve malzemenin mekanik özelliklerini olumsuz yönde etkileyebilir (Mathew, Remy,, Williams, Tang , & Srirangam , 2019). Mn'nin varlığı ise Fe ile birleşerek daha az zararlı intermetalik fazların oluşmasını sağlayabilir, bu da alaşımın mekanik özellikleri açısından olumlu bir durumdur (Mathew , ve diğerleri, 2017). Bununla birlikte, EDX analizleri sonucunda tespit edilen Ag içeriği, malzemenin yüksek sıcaklık dayanımını ve elektriksel iletkenliğini artırabilecek bir katkı unsuru olarak değerlendirilebilir (Zamanzade , Vehoff , & Barno, 2013). Ag'nin varlığı, üretimde kullanılan geri dönüştürülmüş Al bazlı malzemelerden veya üretim sürecinde kullanılan katkı elementlerinden kaynaklanabilir. Sonuç olarak, Al-Si alaşımlarında Si oranının artırılmasıyla birlikte Al miktarının azaldığı ve bu durumun elementlerin ağırlık ve atomik yüzdelere doğrudan yansıdığı belirlenmiştir. EDX analiz sonuçları, döküm yöntemiyle üretilen Al-Si alaşımlarının kimyasal bileşiminin başarılı bir şekilde oluşturulduğunu ve alaşımların mikro yapısal analizlerinin daha ileri çalışmalarla desteklenmesi gerektiğini ortaya koymaktadır.

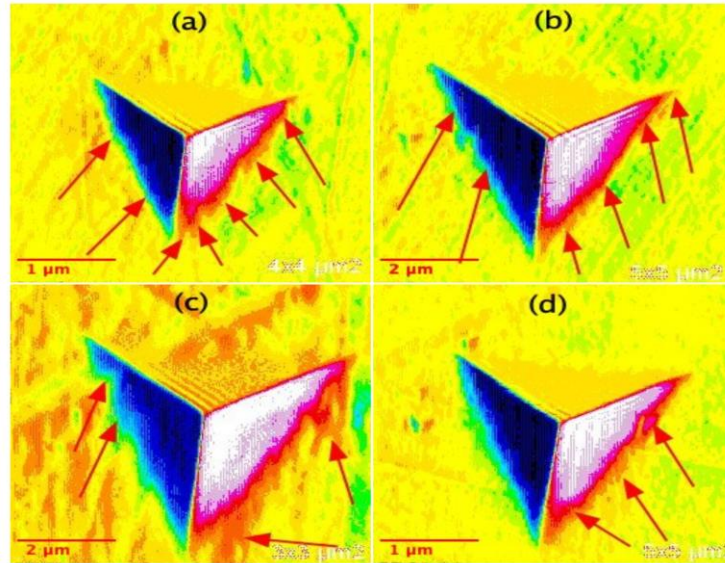
4.3. Nano İndentasyon Deney Sonuçları ve Analizi

4.3.1. Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımların nanoindentasyon deney sonuçları ve analizi

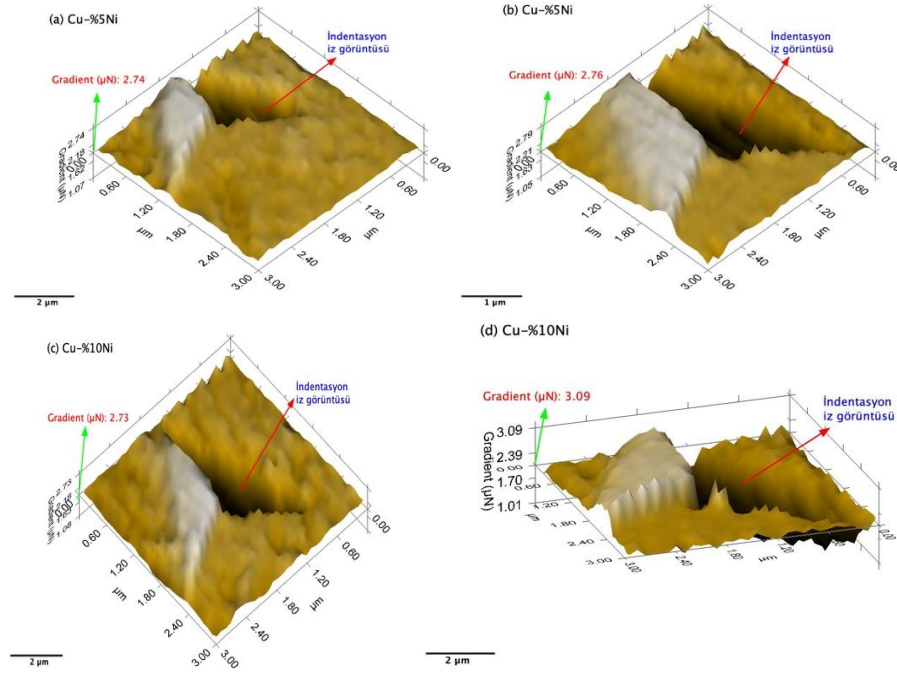
Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımları üzerinde berkovich uç kullanılarak 1 μ N-5000 μ N ve 1 μ N-10000 μ N 'a kadar yük uygulanarak gerçekleştirilmiş nanoindentasyon deneyleri sonucu atomik kuvvet mikroskopu (AFM) ile görüntüleri alınmıştır.



Şekil 4.8. a) Cu-%5Ni alaşımlarının 5000 µN b) Cu-%5Ni alaşımlarının 10000 µN c) Cu-%10Ni alaşımlarının 5000 µN d) Cu-%10Ni alaşımlarının 10000 µN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri

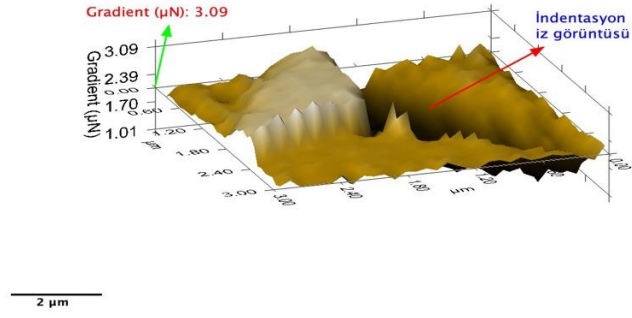


Şekil 4.9. a) Cu-%5Ni alaşımlarının 5000 µN b) Cu-%5Ni alaşımlarının 10000 µN c) Cu-%10Ni alaşımlarının 5000 µN d) Cu-%10Ni alaşımlarının 10000 µN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri

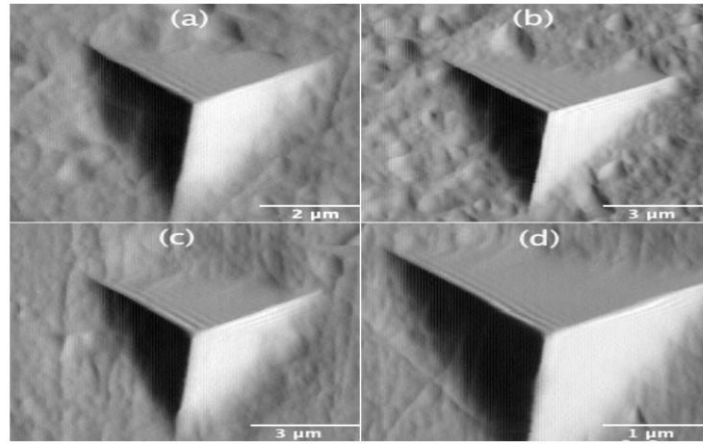


Şekil 4.10. a) Cu-%5Ni alaşımlarının 5000 μN b) Cu-%5Ni alaşımlarının 10000 μN c) Cu-%10Ni alaşımlarının 5000 μN d) Cu-%10Ni alaşımlarının 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri

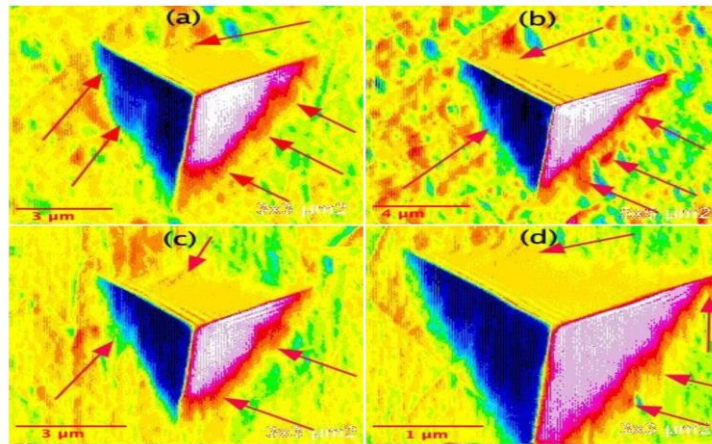
Cu-%5Ni ve Cu-%10Ni alaşımlarına uygulanan 5000 μN ve 10000 μN yüklerle nanoindentasyon deneyleri gerçekleştirilmiştir. Yapılan deneyler sonucu girinti derinliğinin yığılma derecesi ve penetrasyon derinliğinin alaşım malzemesinin sertliğine bağlı olduğu görülmüştür. 5000 μN 'luk girinti yükü uygulamasında %5 ve %10 Ni katkılı Cu-Ni alaşımlarında yığılmanın %5 Ni katkılı Cu-Ni alaşımında %10 Ni katkılı Cu-Ni alaşımına göre daha az yığılmanın olduğu görülmüştür. Çizelge 4.16'da görüldüğü üzere 10000 μN yük uygulamasında sertlik değerinin 5000 μN 'a göre daha yüksek olduğu için %5 Ni katkılı Cu-Ni alaşımında 10000 μN yükte yığılma ve çatlakların 5000 μN 'a göre daha fazla olduğu Şekil 4.24'te AFM'de alınan 3D görüntülerle gözlemlenmiştir. Fakat Cu-%10Ni alaşımlarının 10000 μN 'luk yük altında sertlik değerinin 5000 μN 'luk yük altındaki sertlik değerinden düşük olmasına rağmen girinti iz kenarlarında yığılmanın Şekil 4.24'te daha fazla olduğu görülmektedir. Şekil 4.26'da AFM görüntülemesinde berkovich ucun oluşturduğu iz kenarlarında Cu-%10Ni alaşımlarının 10000 μN 'luk yükte deformasyonun daha fazla olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca Şekil 4.24'te Cu-%5Ni ve Cu-%10Ni alaşımlarının AFM görüntülerinde berkovich ucunun oluşturduğu iz kenarlarında çatlak oluşumunun ($l/a \leq 2.5$ veya $c/a \leq 3.5$) (Niihara ve ark., 1982) ve ($c/a \leq 2$) (Schneider ve Fett, 2006) radyal çatlak oluşumu için tanımladığı kriterleri karşılamadığı gözlemlenmiştir.



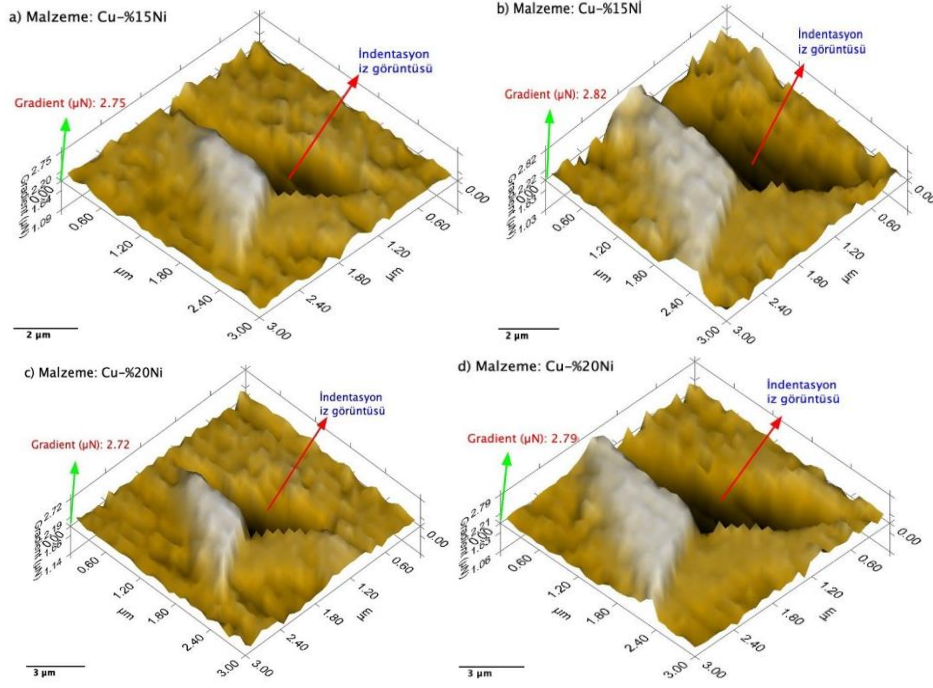
Şekil 4.11. Cu-%10Ni alaşımanın 10000 µN yüklerden sonra 3 boyutlu görüntüsü



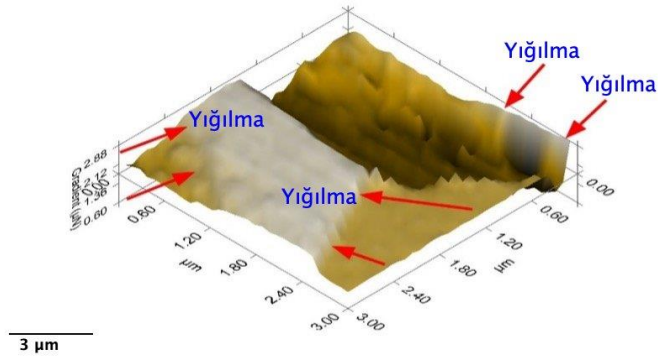
Şekil 4.12. a) Cu-%15Ni alaşımanın 5000 µN b) Cu-%15Ni alaşımanın 10000 µN c) Cu-%20Ni alaşımanın 5000 µN d) Cu-%20Ni alaşımanın 10000 µN yüklerden sonra AFM görüntüleri



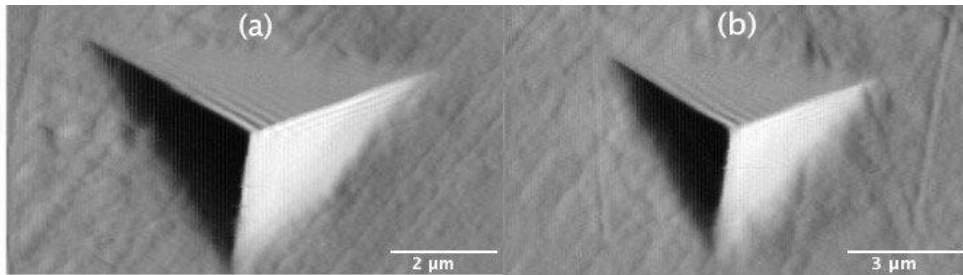
Şekil 4.13. a) Cu-%15Ni alaşımanın 5000 µN b) Cu-%15Ni alaşımanın 10000 µN c) Cu-%20Ni alaşımanın 5000 µN d) Cu-%20Ni alaşımanın 10000 µN yüklerden sonra AFM görüntüleri



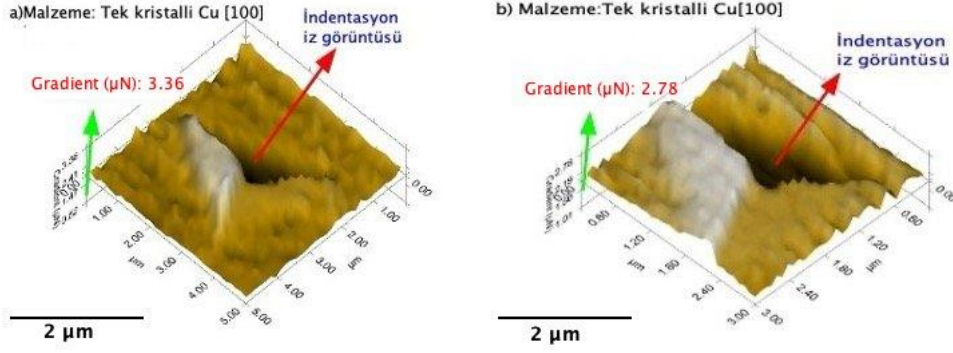
Şekil 4.14. a) Cu-%15Ni alaşımlarının 5000 μN b) Cu-%15Ni alaşımlarının 10000 μN c) Cu-%20Ni alaşımlarının 5000 μN d) Cu-%20Ni alaşımlarının 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri



Şekil 4.15. Cu-%15Ni alaşımlarının 10000 μN yükten sonra AFM görüntüsü



Şekil 4.16. Tek kristalli Cu[100] metali yüzeyine uygulanan (a) 5000 μN, (b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri

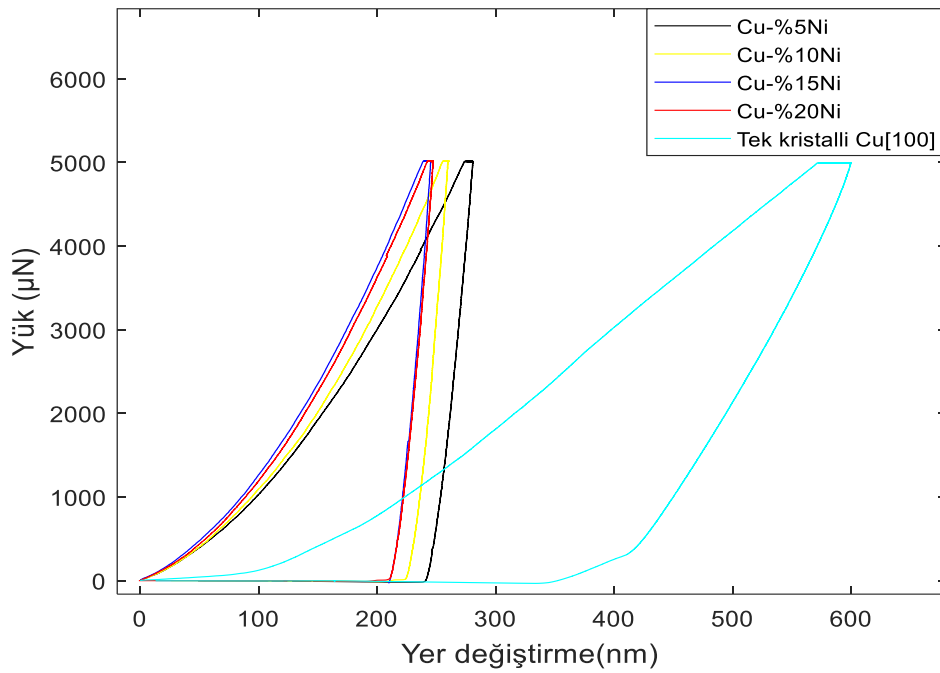


Şekil 4.17. Tek kristalli Cu[100] metali yüzeyine uygulanan 5000 μN ve 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri

Nanoindentasyon deneylerinde Tek kristalli Cu[100] metali ile Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımları yüzeyine sırasıyla 5000 μN ve 10000 μN yükler uygulanarak gerçekleştirilmiştir. Deneylerin sonuçları, yığılma derecesinin ve penetrasyon derinliğinin alaşım malzemesinin sertliğine bağlı olduğu görülmüştür. 5000 μN yük uygulamasında, tek kristalli Cu[100] metali ile %5Ni katkılı Cu-Ni alaşımında %10Ni katkılı Cu-Ni alaşımına göre daha fazla yığılma olduğu gözlemlenmiştir. Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4'te görüldüğü üzere 10000 μN yük uygulamasında sertlik değeri 5000 μN ' dan daha yüksek olmuş ve AFM ile alınan 3D görüntülerde de %5Ni katkılı Cu-Ni alaşımında daha fazla yığılma ve çatlamaya yol açtığı görülmüştür. Bununla birlikte, Cu-%10Ni alaşımının sertlik değeri 10000 μN yük altında 5000 μN yük altına göre daha düşük olmasına rağmen, Şekil 4.11'de görüldüğü üzere Cu-%10Ni alaşımında girinti izinin kenarlarında daha fazla yığılma gözlemlenmiştir. Şekil 4.9'daki AFM görüntülemesinde, Cu-%10Ni alaşımının Berkovich ucu tarafından oluşturulan girinti izinin kenarlarında 5000 μN yük altında daha fazla deformasyona sahip olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca Şekil 4.8 ve Şekil 4.9'daki Cu-%5Ni ve Cu-%10Ni alaşımlarının AFM görüntülerinde Berkovich ucunun oluşturduğu girinti izinin kenarlarındaki çatlakların radyal çatlak oluşumu için gözlemlenen ($l/a \leq 2,5$ veya $c/a \leq 3,5$) (Niihara ve ark., 1982) ve ($c/a \leq 2$) (Schneider ve Fett., 2006) kriterlerini sağlamadığı gözlemlenmiştir. Nanoindentasyon deneyleri, Berkovich uç kullanılarak 1 μN ile 5000 μN ve 1 μN ile 10000 μN arasında yükler uygulanarak Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımların AFM girinti iz görüntüleri gösterilmiştir. Şekil 4.14'te görüldüğü üzere, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının yüzeylerinde radyal çatlaklar gözlenmemiştir.

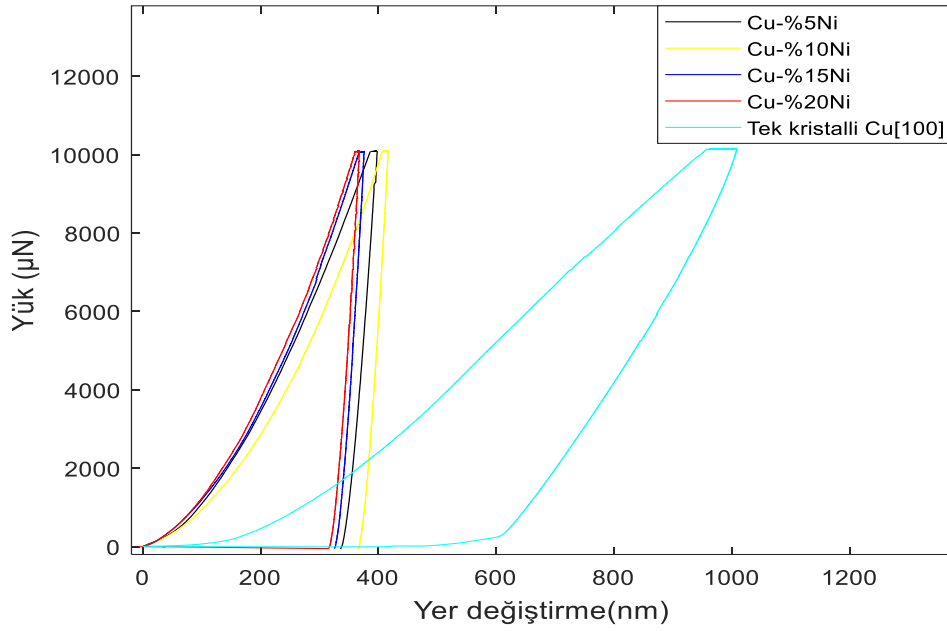
4.3.2. Cu-Ni alaşımları ve Tek kristalli Cu[100] metalinin nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme eğrileri

Yük-yer değiştirme eğrisi, indentasyon işlemi esnasında uygulanan yükün büyüklüğüne göre malzemenin deformasyonunu niceliksel olarak yansıtmaktadır. 1 μN – 5000 μN ve 1 μN - 10000 μN arasında değişen yükler altında tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının yük-yer değiştirme eğrisi Şekil 4.18 ve Şekil 4.19’de gösterilmektedir.



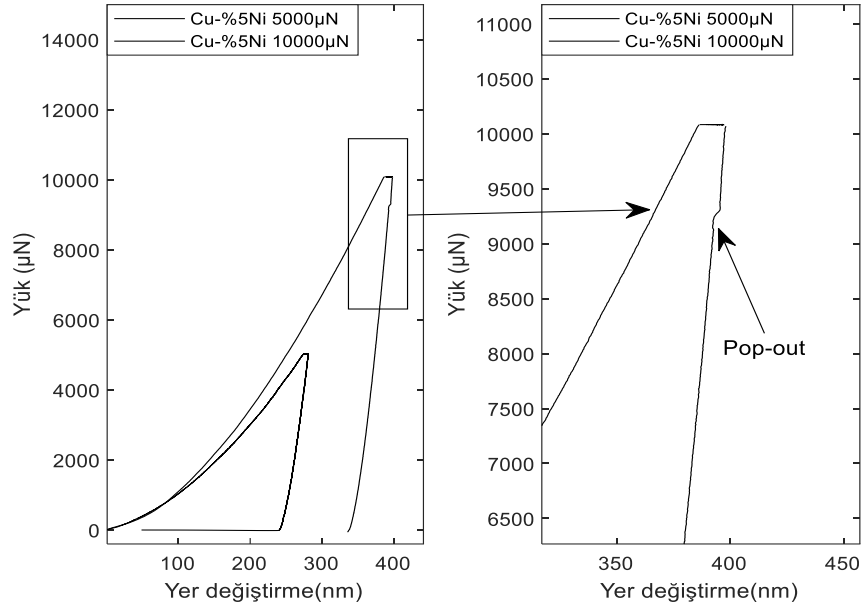
Şekil 4.18. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.18’deki grafik incelendiğinde, 5000 μN kuvvet ile [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır(Cu[100]), ağırlıkça %5,%10,%15 ve %20Ni nikel içeren bakır-nikel alaşımlarının indentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği verilmiştir. İndentasyon deneylerinde 5000 μN yük altında [100] kristalografik yönelimli tek kristalli Cu[100] metalinin yer değiştirmesinin Cu-Ni alaşımlarına göre daha fazla olduğu gözlemlenmiştir.



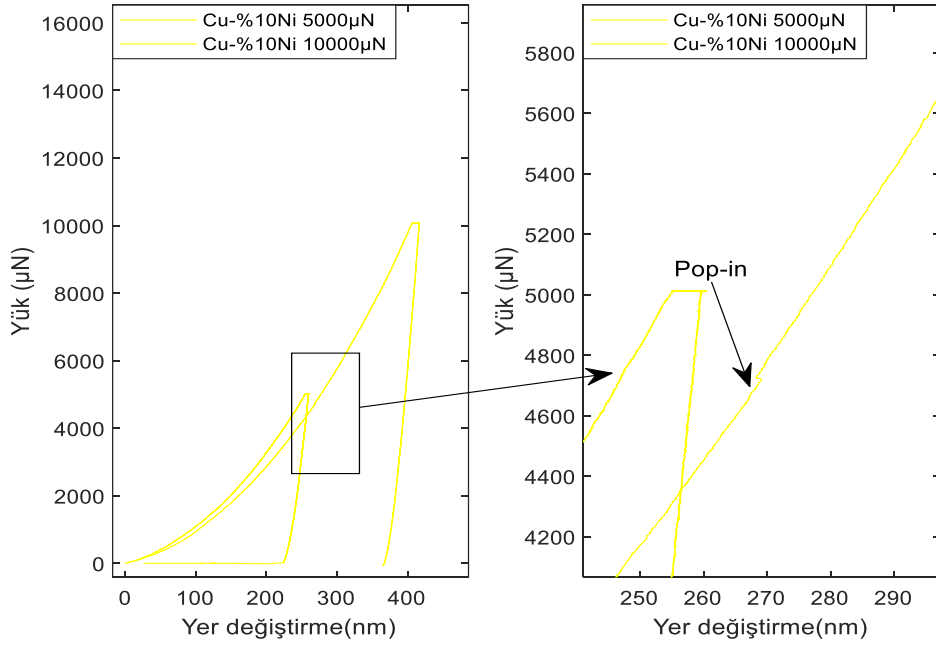
Şekil 4.19. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.19'daki grafik incelendiğinde, 10000 μN kuvvet ile [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır metalinin ağırlıkça %5,%10,%15 ve %20Ni nikel içeren bakır-nikel alaşımlarının indentasyon sonucu yer değiştirmesine göre daha fazla olduğu görülmektedir. Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımları üzerinde 5000 μN ve 10000 μN yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri, yük-yer değiştirme eğrilerinde pop-in olayını ortaya koymakta ve indenter ucunun altındaki yüksek gerilimli bir nano hacimde ani bir deformasyon ilerlemesini göstermektedir(Corcoran ve ark., 1997). Pop-out olayı, girinti sırasında boşaltma eğrisinde gözlemlenen ani bir malzeme genişlemesini temsil etmektedir.(Sidiropoulos, 2017). Yapılan çalışmalarda, pop-out sırasındaki ortalama temas basıncının 3,5 ila 12 GPa arasında değiştiğini bildirmiştir(Juliano ve ark., 2004; Juliano ve ark., 2003). Ayrıca, bazı araştırmacılar Si-II'den Si-III/Si-XII'ye faz dönüşümü için kritik temas basıncının sabit kalması gerektiğini, çünkü boşaltma eğrilerindeki patlamaların konumunun nispeten sabit görüldüğünü iddia etmektedir(Juliano ve ark., 2003). Deneysel raporlar, ani yük artışının oluşumunun maksimum girinti yükünden ve yükleme/boşaltma oranlarından önemli ölçüde etkilendiğini göstermektedir (Juliano ve ark., 2004; Juliano ve ark., 2003; Ruffell ve ark., 2007; Cheong ve Zhang, 2000). Bir başka çalışma, daha yüksek bir girinti yükünün, boşaltma sırasında geçen süreye bağlı bir olay olan boşaltma eğrisinde pop-out oluşma olasılığını artırdığını vurgulamaktadır.

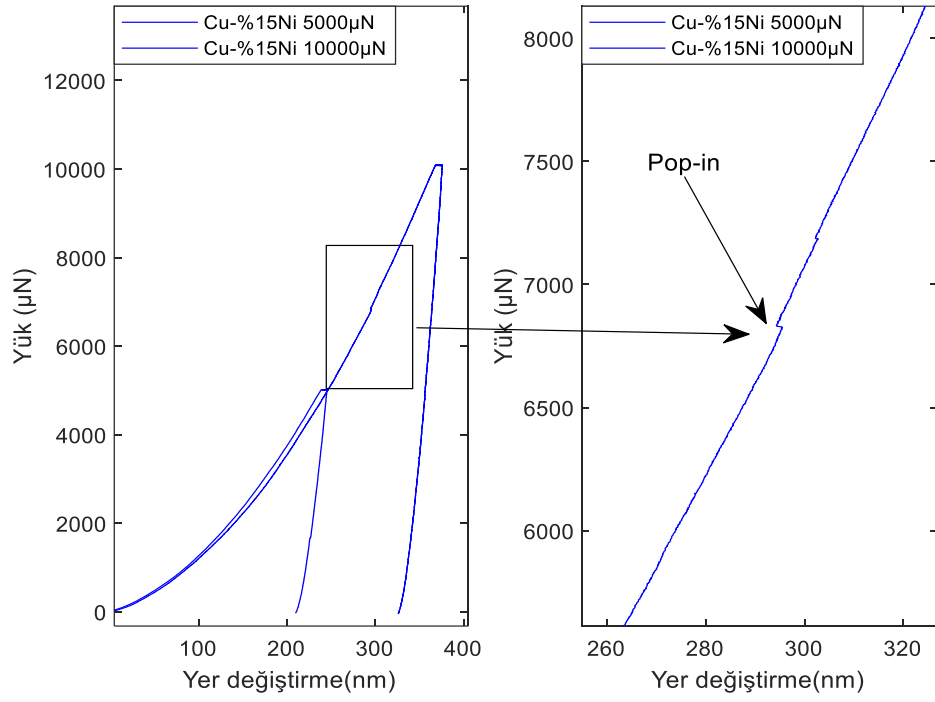


řekil 4.20. Cu-%5Ni alařımının nanoindentasyon sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi

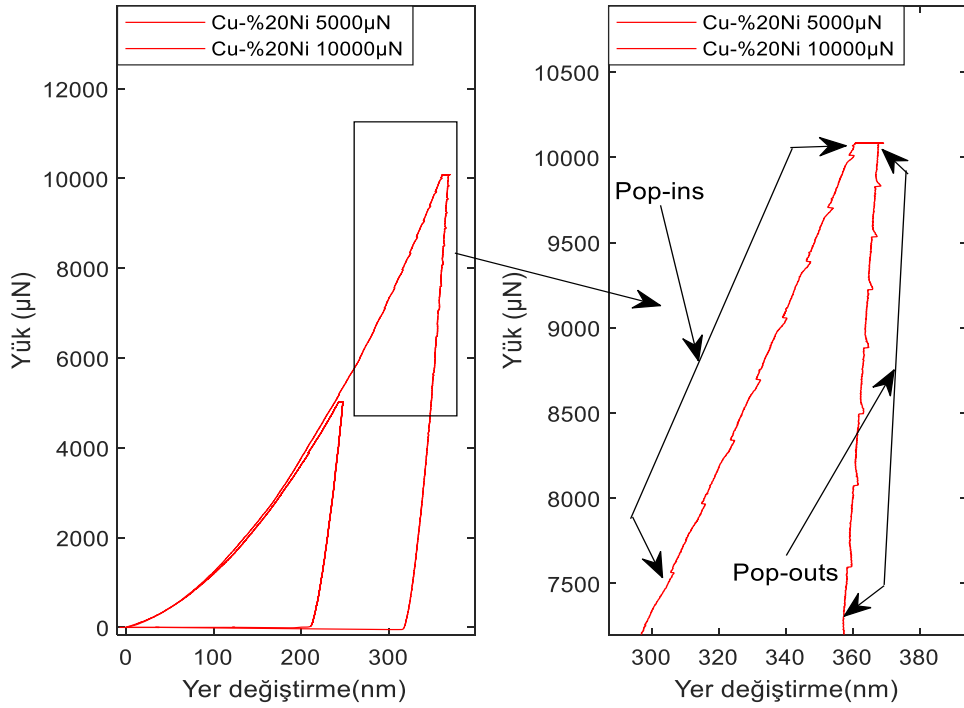
řekil 4.20'teki grafik incelendięinde, 5000 μN ve 10000 μN kuvvetler ile %5 nikel ięeren bakır-nikel alařımının indentasyon deneyi sırasında yük bindirme sonucu pop-in olayının oluřmadıęı, fakat yük boşaltım sırasında 9000 μN ve 9500 μN kuvvet aralıęında pop-out olayının oluřtuęu görölmüřtür.



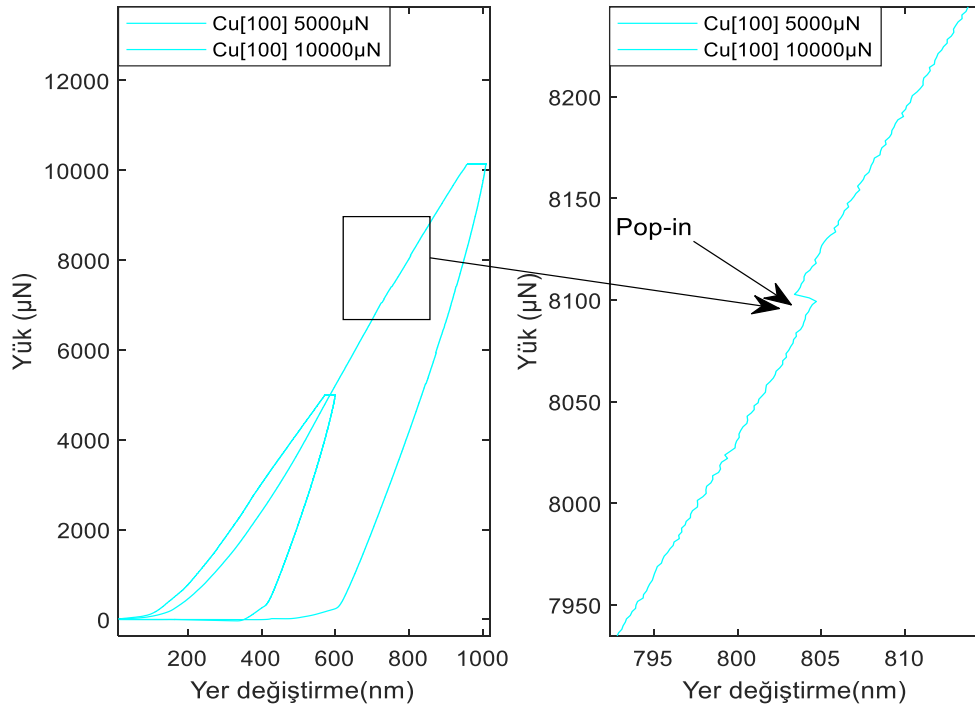
řekil 4.21. Cu-%10Ni alařımının nanoindentasyon sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi



Şekil 4.22. Cu-%15Ni alaşımının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.23. Cu-%20Ni alaşımının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.24. Tek kristalli Cu[100] metalin nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği

Tek kristalli Cu[100] metali, Cu-%10Ni ve Cu-%15Ni alaşımlarında 10000 μN yük altında pop-in olayı görülürken, pop-out olaylarının oluşmadığı görülmüştür. Cu-%20Ni alaşımında, yükteki artışla birlikte hem pop-in hem de pop-out olaylarında bir artış gözlenmektedir. Bu durum, plastik deformasyonun başladığına işaret eden artan çekirdeklenme faaliyetleri ile ilişkilendirilebilir. Cu-%5Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarında pop-out olayları 5000 μN yük altında oluşmadığı gözlemlenirken, 10000 μN 'da olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, boşaltma sırasında geçen süreye bağlı olduğunu göstermektedir.(Chang ve Zhang, 2009).

Çizelge 4.1. Cu-Ni alaşımlarının ve tek kristalli Cu[100] metalin girinti verileri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	$P_{\text{max}}(\mu\text{N})$	$h_{\text{max}}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$h_f(\text{nm})$
Cu[100]	5000	4.993	599,398	482,41	374,69
Cu-%5Ni	5000	5.012	280,851	259,13	241,38
Cu-%10Ni	5000	5.012	260,431	241,63	224,47
Cu-%15Ni	5000	5.015	245,190	227,58	206,48
Cu-%20Ni	5000	5.012	247,327	227,72	209,87

Çizelge 4.2. Cu-Ni alaşımlarının ve tek kristalli Cu[100] metalin girinti verileri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	$P_{\text{max}}(\mu\text{N})$	$h_{\text{max}}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$h_f(\text{nm})$
Cu[100]	10000	10140,204	1008,42	774,79	534,35
Cu-%5Ni	10000	10079,407	398,14	364,03	340,19
Cu-%10Ni	10000	10085,211	416,75	389,64	367,96
Cu-%15Ni	10000	10080,309	375,85	349,22	327,31
Cu-%20Ni	10000	10081,796	369,15	340,94	316,61

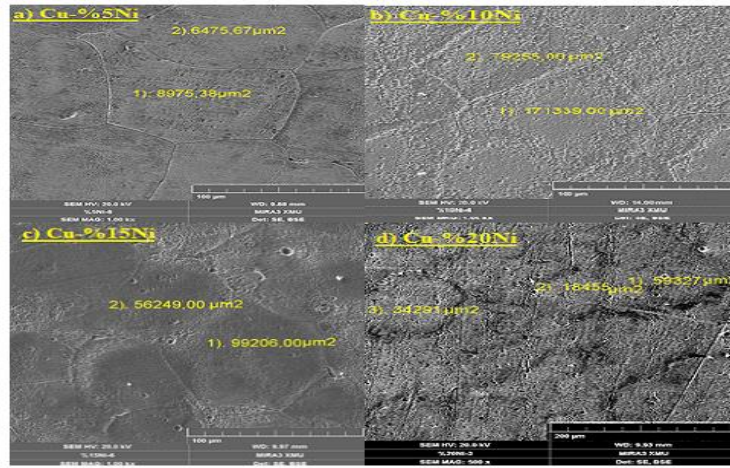
Çizelge 4.3. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin 5000 μN yük altında sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	H(GPa)	$E_r(\text{GPa})$
Cu[100]	5000	0,79	10,88
Cu-%5Ni	5000	2,57	109,96
Cu-%10Ni	5000	2,93	141,68
Cu-%15Ni	5000	3,28	153,39
Cu-%20Ni	5000	3,27	137,12

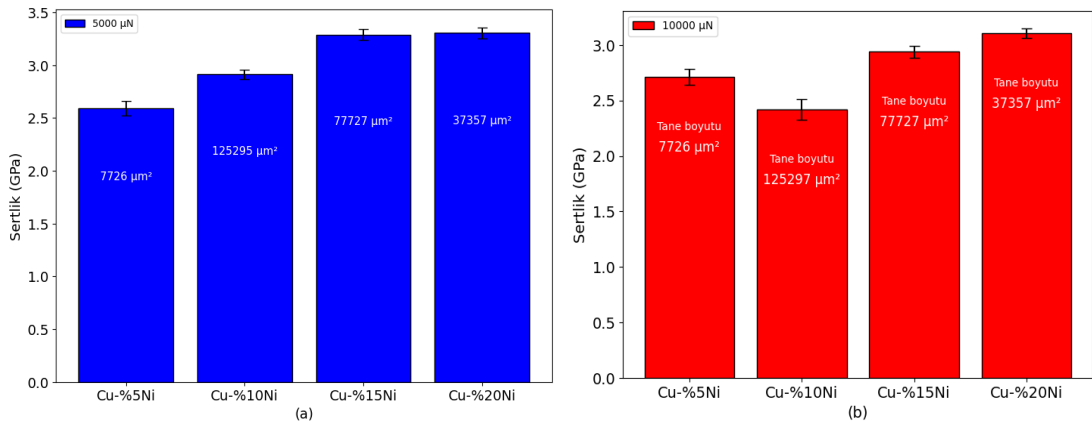
Çizelge 4.4. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalin 10000 μN yük altında sertlik ve indirgenmiş elastisite modül değerleri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	H(GPa)	$E_r(\text{GPa})$
Cu[100]	10000	0,64	6,96
Cu-%5Ni	10000	2,73	104,70
Cu-%10Ni	10000	2,40	120,89
Cu-%15Ni	10000	2,96	135,59
Cu-%20Ni	10000	3,09	138,31

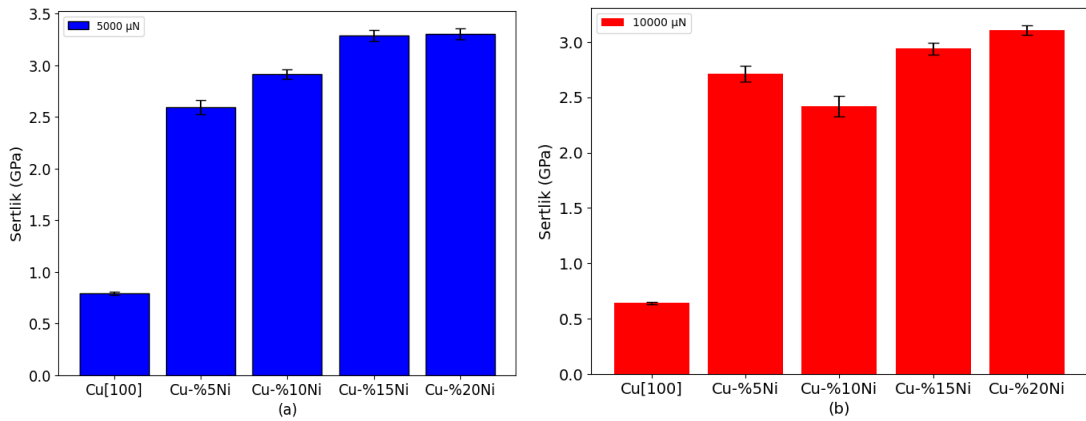
Tane yapısı alanının ölçümü, modern malzeme karakterizasyon tekniklerinin önemli bir bileşenidir. Bu ölçümler taramalı elektron mikroskobu görüntüleme yöntemleriyle gerçekleştirilmiştir. Bu yöntemler, tane boyutu, tane şekli, tane sınırları ve tane dağılımı gibi mikroyapısal özelliklerin ayrıntılı bir şekilde analiz edilmesini kolaylaştırmaktadır(Williams ve ark., 2006). Genel olarak, daha küçük tane boyutları daha yüksek sertlik ve elastikiyet modülü ile ilişkilidir. Bu, tane sınırlarının mekanik bariyer etkisi nedeniyle tane boyutundaki azalmanın, kristal deformasyonunu ve plastik akışı sınırlandırarak malzeme sertliğini artırabileceği anlamına gelmektedir(Meyers ve ark., 2006; Dao ve ark., 2007). Şekil 4.38'de SEM görüntüleri alınan Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının tane yapıları alanları Imagej programı ile ölçülmüştür. Uygulanan girinti yükü ile değişen sertlik değerlerinin Cu-Ni alaşımların tane yapısı ile ilişkisi Şekil 4.25'te gösterilmiştir.



Şekil 4.25. Cu-Ni alaşımların mikroyapı analizi sonucu tane yapısı



Şekil 4.26. Cu-Ni alaşımların a) 5000 µN, b) 10000 µN indantasyon kuvvetinde tane yapısı ile sertlik değerleri arasındaki ilişki

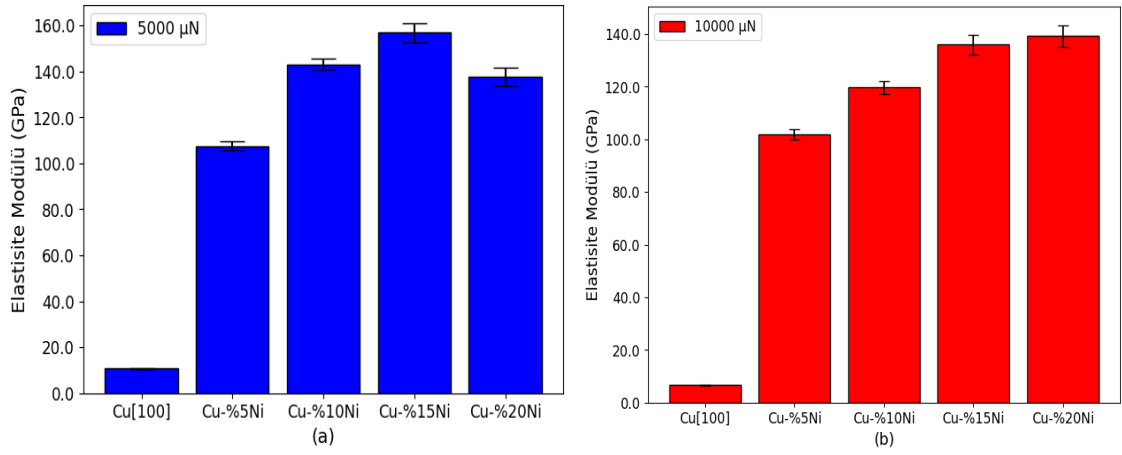


Şekil 4.27. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu [100] metalinin nanoindentasyon deneyleri sonucu sertlik değerleri

Çizelge 4.5. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin, 5000 μN ve 10000 μN yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu elastisite modülü değerleri

Alaşımlar	E_m (GPa) 5000 (μN)	E_m (GPa) 10000 μN
Cu[100]	10,64	6,6
Cu-%5Ni	107,59	101,89
Cu-%10Ni	143,1	119,67
Cu-%15Ni	156,8	135,99
Cu-%20Ni	137,75	139,27

Çizelge 4.5'te laboratuvar ortamında 5000 μN ve 10000 μN yüklerle nanoindentasyon deneyleri gerçekleştirilen Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100]'nun elastisite modül değerleri gösterilmiştir.



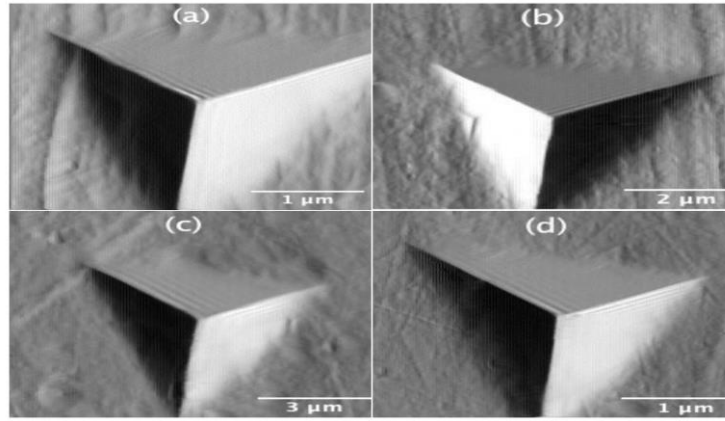
Şekil 4.28. Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu [100] metalinin nanoindentasyon deneyleri sonucu elastisite modülü değerleri

Şekil 4.27'de ağırlıkça %5, %15, %20 nikel içeren Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin sertlik değerleri ile Şekil 4.28'teki %5 %10, %15 nikel içeren Cu-Ni alaşımları ve tek kristalli Cu[100] metalinin elastisite modülü değerlerinin, uygulanan yükün artmasıyla sertlik ve elastisite modül değerlerinin azaldığı görülmektedir. Bu olgunun, malzemelere uygulanan yükün artmasıyla dislokasyonların hareketinin hızlanmasına, daha büyük deformasyon ve plastisitenin oluşması, malzemelerde sertliğinin azalmasına neden olduğu söylenebilmektedir (Juliano ve ark., 2004; Cheong ve Zhang, 2000). Şekil 4.27'de Cu-%5Ni alaşımında girinti yükünün artmasına rağmen sertlik değerinin arttığı görülmüştür. Fakat Çizelge 4.5'te görüldüğü üzere girinti yükünün artması ile elastisite modülü değerinde bir azalma olduğu görülmesi ile birlikte alaşımların elastisite modül değerlerinin eklenen nikel miktarına orantılı olarak arttığı görülmektedir. Bu sonuç, Cu-%5Ni alaşımının tane boyutunun Hall-Petch tarafından

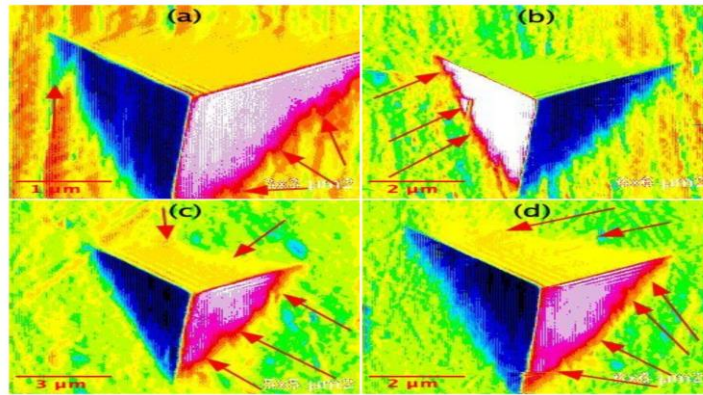
tanımlanan tane boyutu sertlik ilişkisi ile uyumlu olduğunu göstermektedir (Ruffell ve ark., 2007). Ayrıca %20 nikel içeren Cu-Ni alaşımında %5, %10 ve %15 nikel içeren alaşımların aksine sertlik ve elastik modül değerlerinde orantılı bir artış görülmemiştir. Bu sonuç, Cu-Ni alaşımlarının tane yapısındaki nikel metalin heterojen dağılımına bağlı olduğu söylenebilir.

4.4. Si [100] ve Al-Si Alaşımların Nanoindentasyon Deney Sonuçları ve Analizi

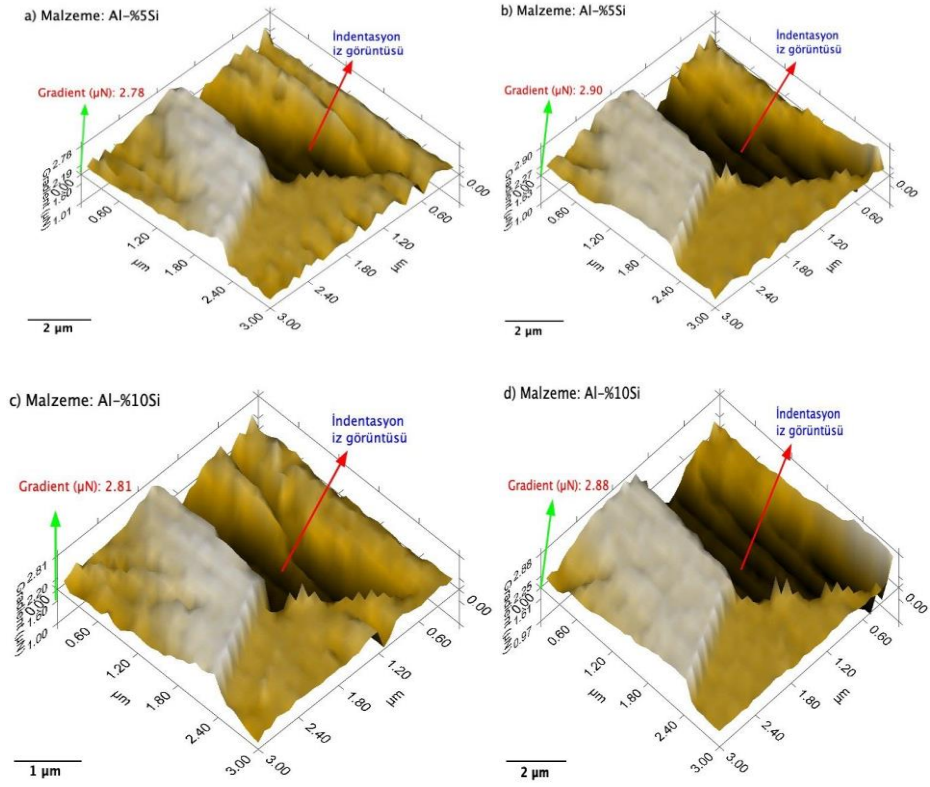
Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarına Berkovich uç kullanılarak nanoindentasyon uygulaması ile 1 μN -5000 μN ve 1 μN – 10000 μN 'a kadar yük uygulandıktan sonra AFM ile görüntüleri alınmıştır.



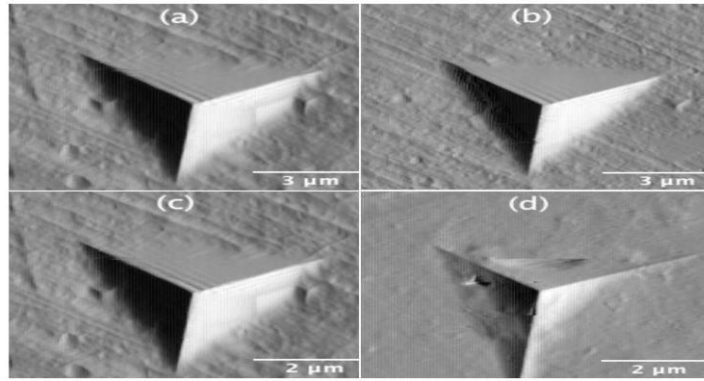
Şekil 4.29. a) Al-%5Si alaşımın 5000 μN b) Al-%5Si alaşımın 10000 μN c) Al-%10Si alaşımın 5000 μN d) Al-%10Si alaşımın 10000 μN uygulanan yüklerden sonra AFM görüntüleri



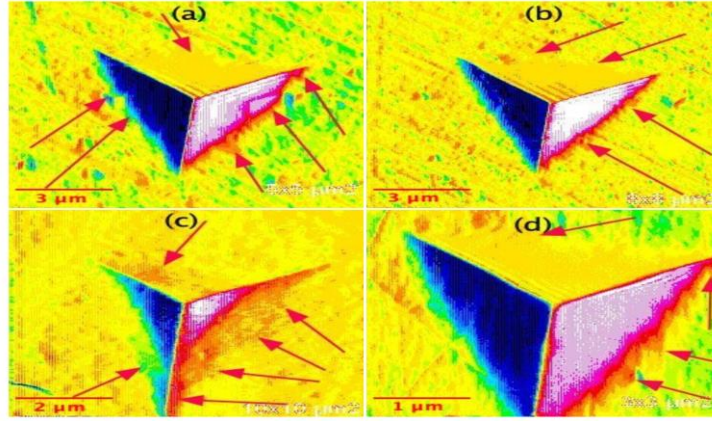
Şekil 4.30. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%5Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%10Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri



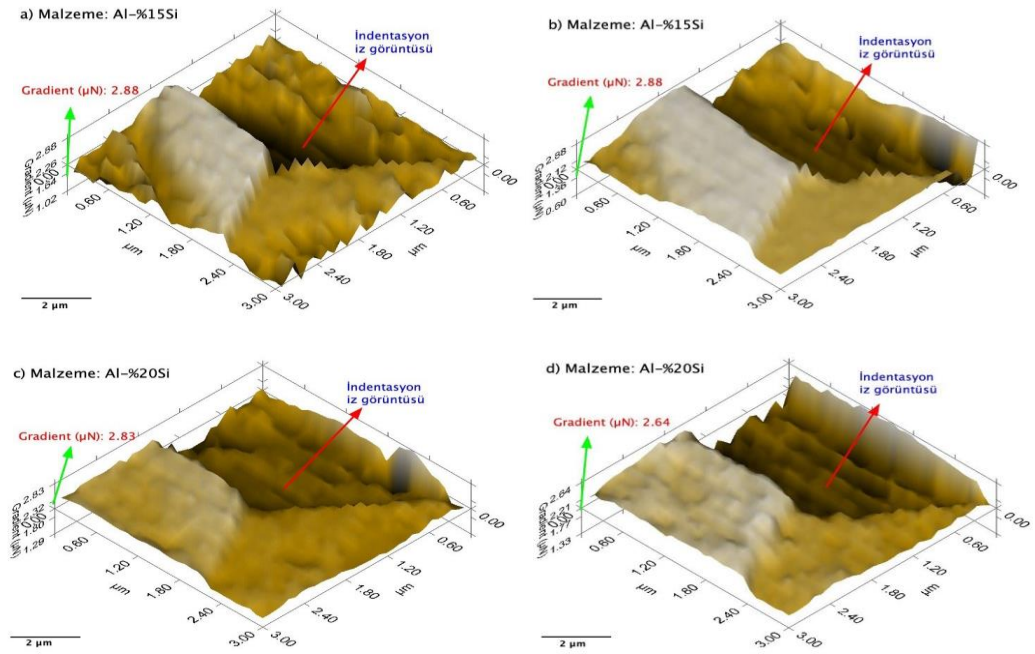
Şekil 4.31. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%5Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%10Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri



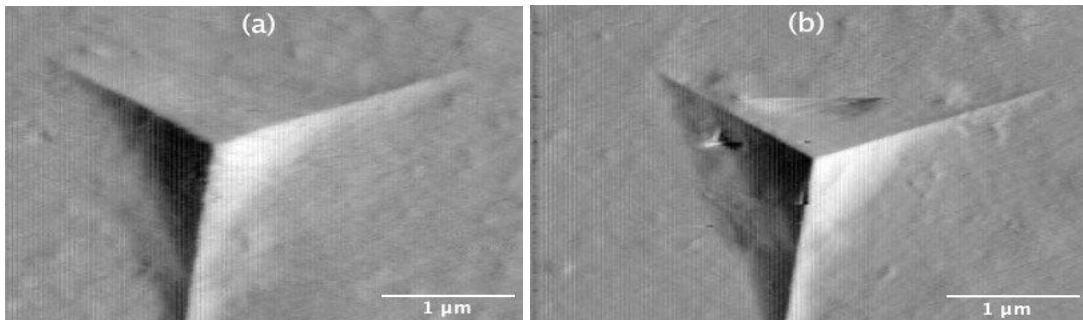
Şekil 4.32. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri



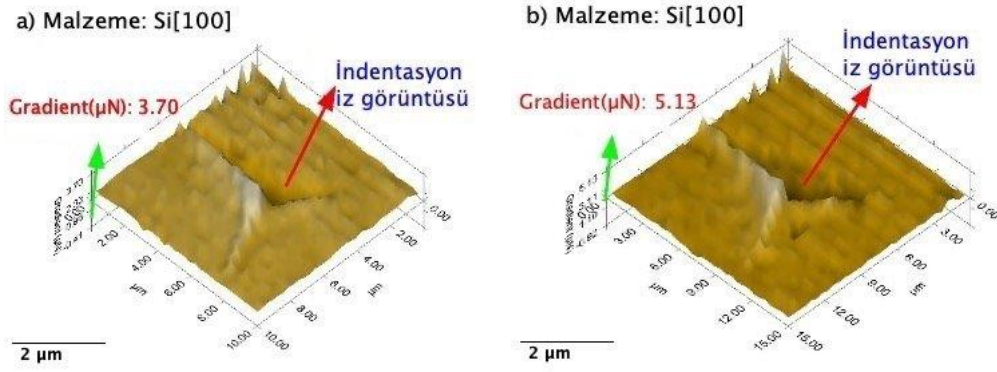
Şekil 4.33. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri



Şekil 4.34. a) 5000 μN , b) 10000 μN yük uygulanmış Al-%15Si ile c) 5000 μN , d) 10000 μN yük uygulanmış Al-%20Si alaşımlarına ait AFM görüntüleri



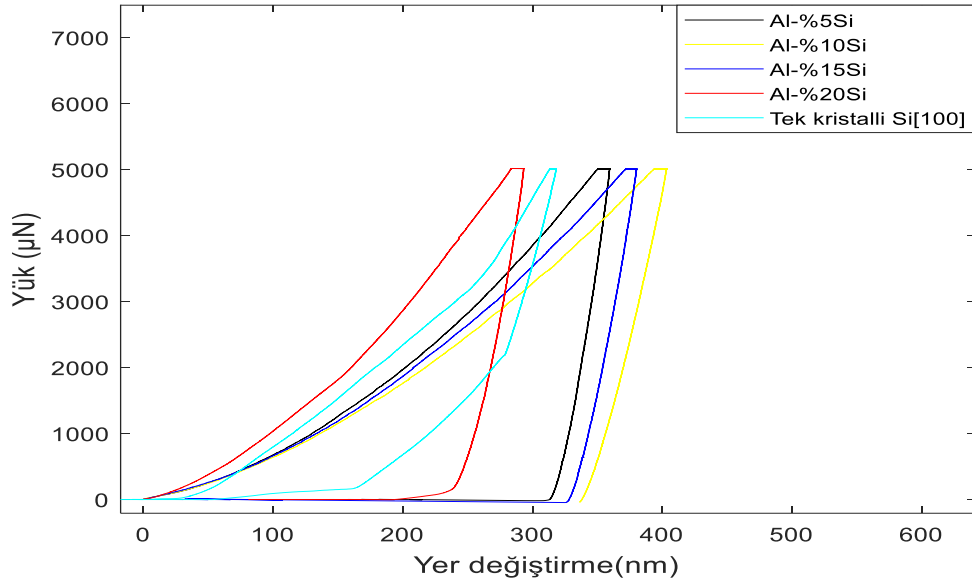
Şekil 4.35. Tek kristalli Si[100] üzerine a) 5000 μN , b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri



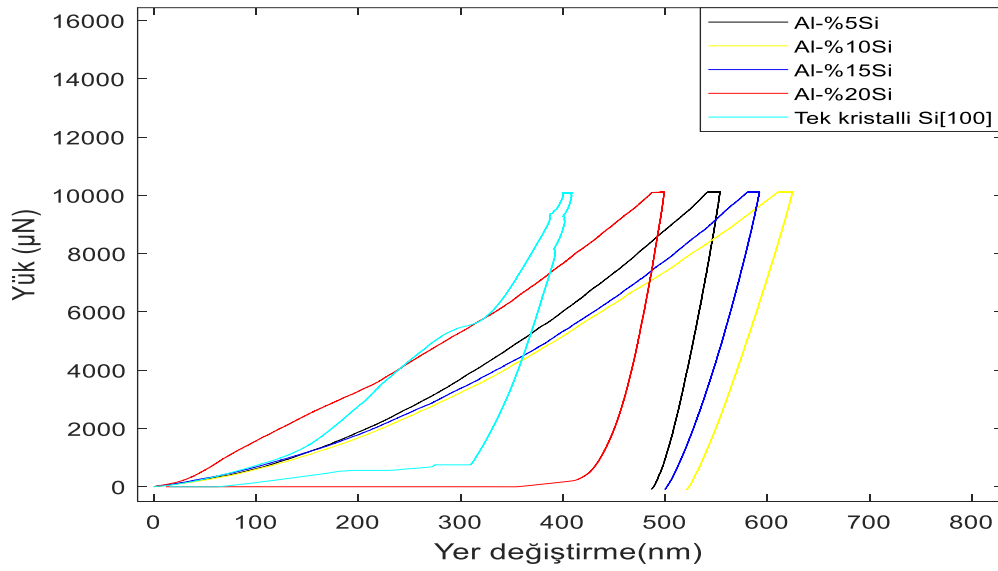
Şekil 4.36. Tek kristalli Si[100] üzerine a) 5000 μN , b) 10000 μN yüklerden sonra AFM görüntüleri

Deneyisel sonuçlar, Şekil 4.31 ve Şekil 4.34'te gösterilen atomik kuvvet mikroskobu (AFM) görüntülerinde görüldüğü gibi, silisyum ilavesinin artmasıyla girinti derinliğinin arttığını göstermektedir. Ayrıca yığılma derecesinin ve penetrasyon derinliğinin alaşım malzemenin sertliğine bağlı olduğu görülmektedir. Şekil 4.36'da indentasyon deneyleri sonucu AFM görüntüleri alınan tek kristalli Si[100] elementinin indentasyon yükü arttıkça gradient değerinin arttığı görülmüştür. Bu olay, yüzeyin bazı bölgelerinde sertliğin belirgin bir şekilde oluşan plastisiteden dolayı yüksek olduğunu göstermektedir. Şekil 4.29 ve Şekil 4.32'de radyal çatlakların alaşımın iç yapısında oluşan plastisiteden dolayı oluşmadığı görülmüştür (Niihara ve ark., 1982; Schneider ve Fett, 2006). Şekil 4.34'te Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarına uygulanan 5000 μN yükte yığılmaların 10000 μN 'a göre daha fazla olduğu görülmektedir. Berkovich uç ile yapılan indentasyon deneylerinde malzemenin yığılma ve penetrasyon derinliğinin alüminyum matrisine eklenen silisyum oranına bağlı olmadığı, silisyumun homojen olmayan dağılımından dolayı Berkovich uç ile yapılan indentasyon deneylerinde silisyum veya alüminyumun yoğun olduğu bölgede yapılan girintilerin sertlik değerlerinde farklılık olduğu görülmektedir. Çizelge 4.3 ve Çizelge 4.4'te görüldüğü üzere sertlik değerlerinin alüminyum matrisi içerisindeki silisyum oranına bağlı olmadığı görülmüştür.

4.4.1. Al-Si alařımları ve tek kristalli Si[100] için nanoindentasyon deneyi sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi



řekil 4.37. Al-Si alařımları ve tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi



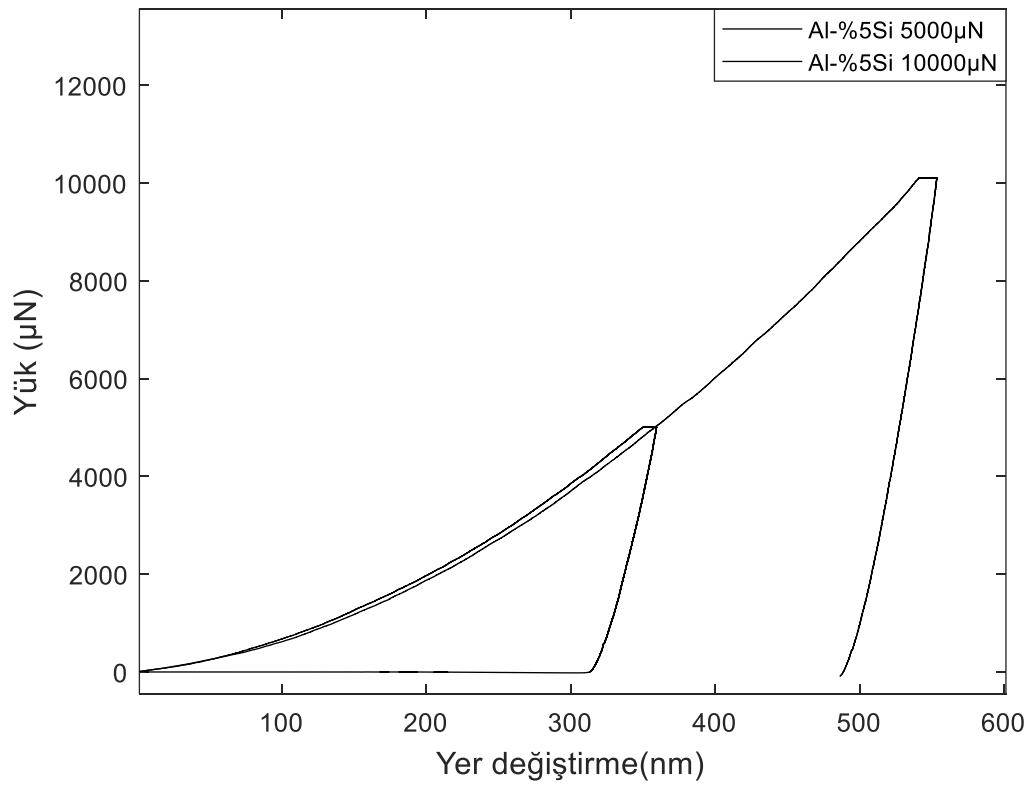
řekil 4.38. Al-Si alařımları ve tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi

Çizelge 4.6. Al-Si alaşımlarının ve tek kristalli Si [100] için girinti verileri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	$P_{\text{max}}(\mu\text{N})$	$h_{\text{max}}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$h_f(\text{nm})$
Si[100]	5000	5006,93	318,40	265,72	140,90
Al-%5Si	5000	5007,66	359,53	334,47	314,14
Al-%10Si	5000	5010,18	403,40	365,21	336,85
Al-%15Si	5000	5005,96	380,29	351,04	325,85
Al-%20Si	5000	5015,67	293,30	266,56	229,81

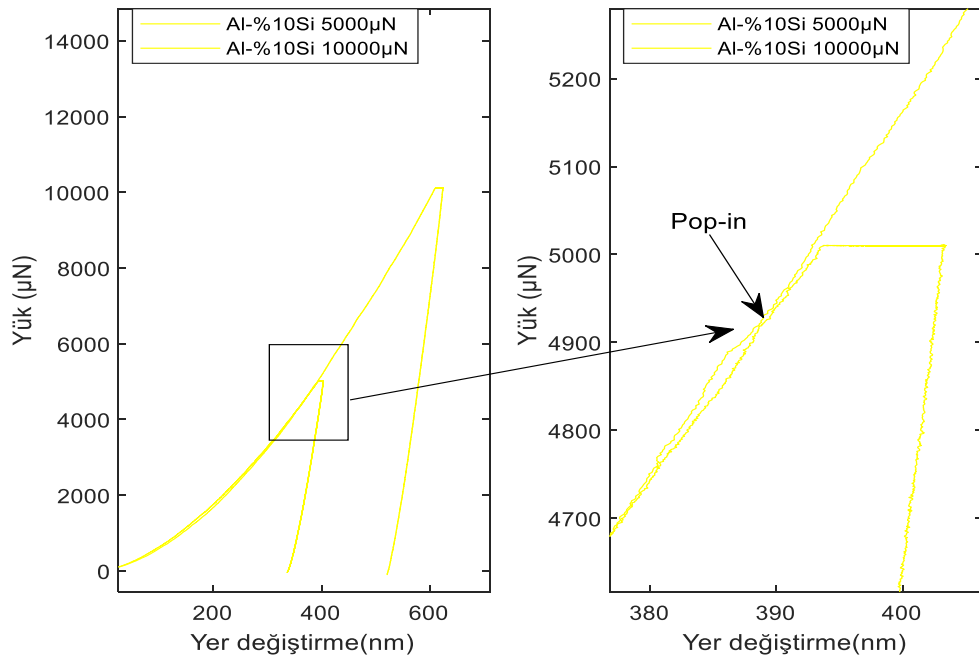
Çizelge 4.7. Al-Si alaşımlarının ve tek kristalli Si [100] için girinti verileri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	$P_{\text{max}}(\mu\text{N})$	$h_{\text{max}}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$h_f(\text{nm})$
Si[100]	10000	10088,23	408,97	354,07	278,31
Al-%5Si	10000	10101,22	553,56	517,85	488,290
Al-%10Si	10000	10106,34	624,58	561,35	523,000
Al-%15Si	10000	10104,71	592,21	543,14	493,850
Al-%20Si	10000	10096,40	499,16	466,99	408,880

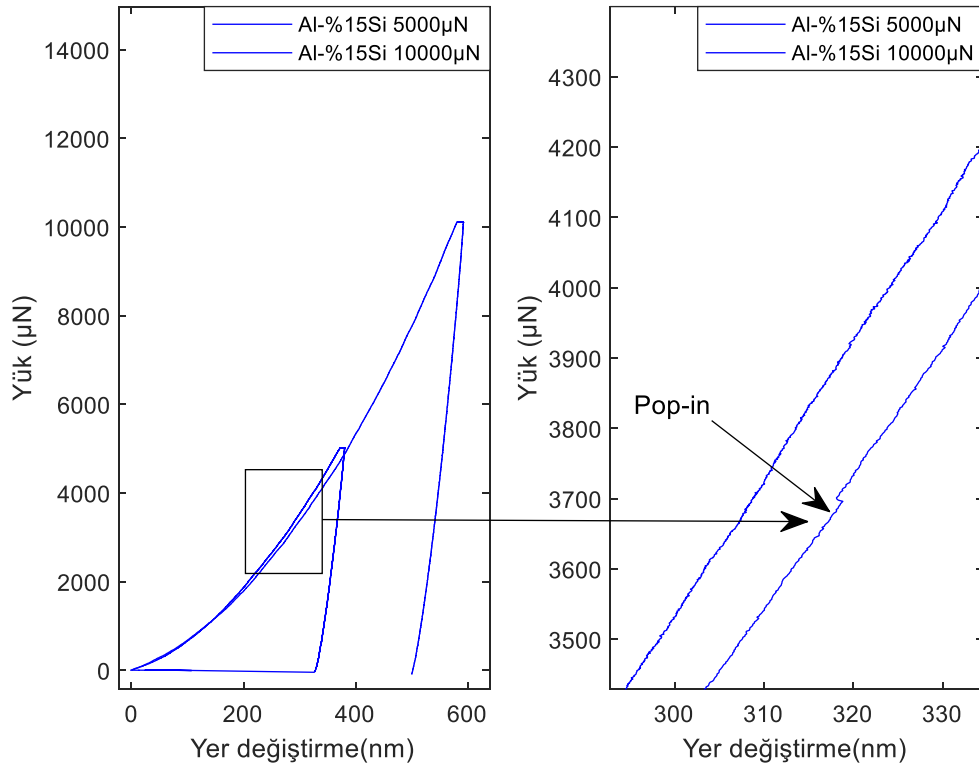


Şekil 4.39. Al-%5Si alaışının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği

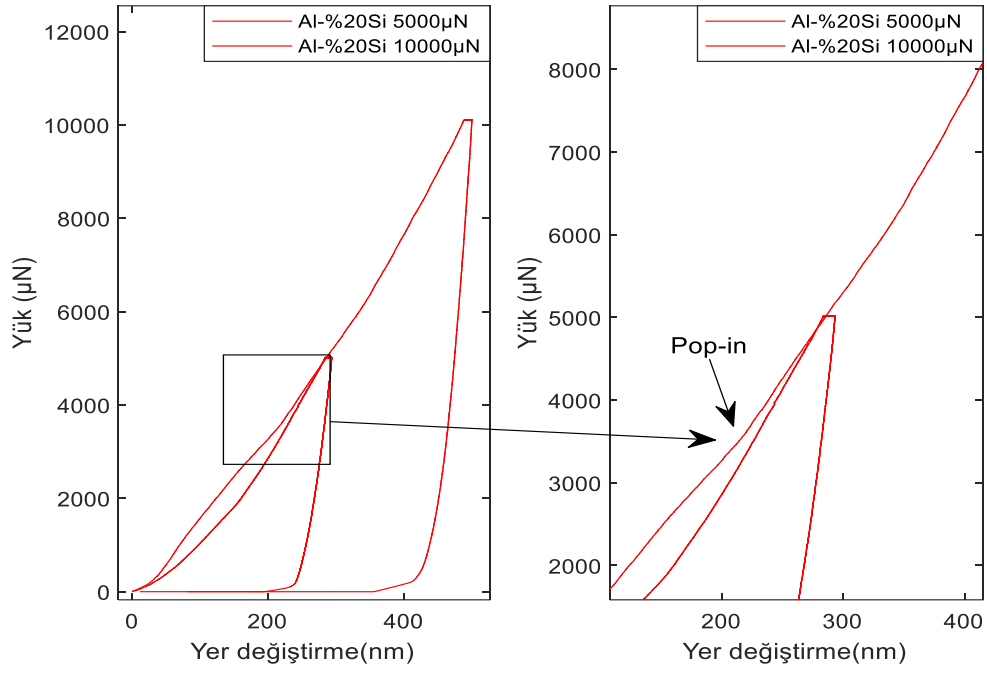
Şekil 4.39'teki grafik incelendiğinde, 5000 μN ve 10000 μN kuvvetler ile yapılan indentasyon deneylerinde %5 Si içeren Al-Si alaışının indentasyon sonucu pop-in ve pop-out olaylarının oluşmadığı görülmektedir.



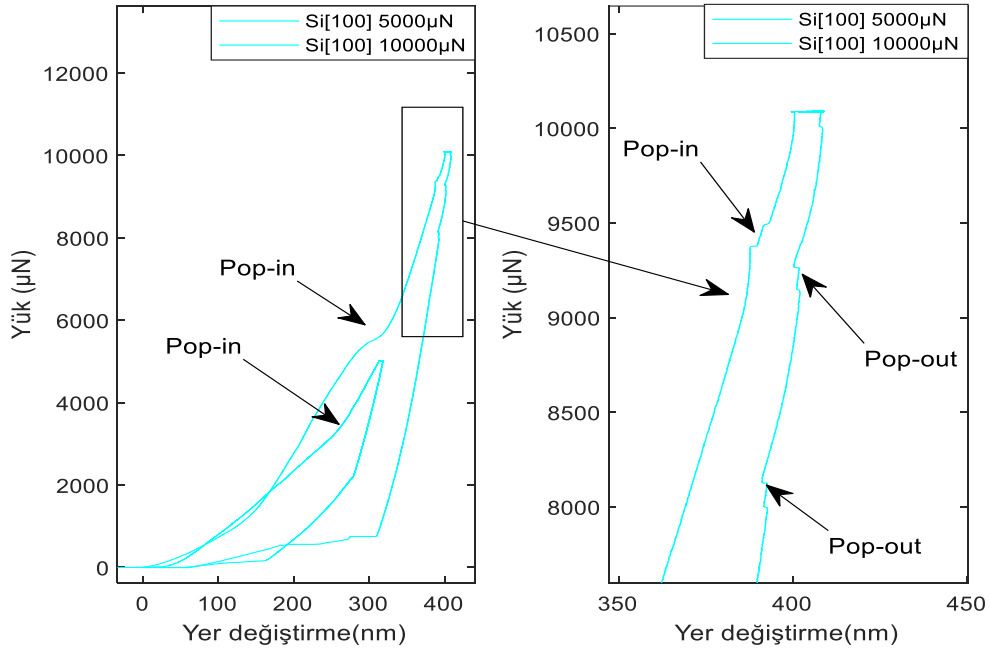
Şekil 4.40. Al-%10Si alaşımının nanoindentasyon deneyi sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.41. Al-%15Si alaşımının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.42. Al-%20Si alaşımının nanoindentasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.43. Tek kristalli Si [100] için nanoindentasyon yük-yer değiştirme grafiği

İndentasyon deneyleri sonucu yük- yer değiştirme grafiklerinde gözlemlenen pop-out olayı, indentasyon sırasında boşaltma eğrisinde gözlenen ani bir malzeme genişlemesidir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Bazı çalışmalar, pop-out sırasındaki ortalama temas

basıncının 3,5 GPa ile 12 GPa arasında değiştiğini bildirmiştir (Juliano ve ark., 2004; Juliano ve ark., 2003). Bu çalışmada Al-Si alaşımlarında uygulanan yükün artmasıyla pop-in olaylarının sayısında bir artış görülmüştür. Bu da literatürle uyumlu olduğunu göstermiştir. Tek kristalli silisyum üzerinde yapılan nanoindentasyon deneyleri, pop-in ve pop-out olaylarının 5000 μN yükte olmadığını, ancak yük 10000 μN 'ye yükseldikçe ortaya çıktığını ve boşaltma sırasında geçen süreye bağlı olduğunu göstermiştir (Schneider ve Fett, 2006). Tek kristalli silisyum (Si[100]) ve Alüminyum-silisyum (Al-Si) alaşımlarında 5000 μN ve 10000 μN yük altında nanoindentasyon deneylerinin yük - derinlik P-h eğrilerinde pop-in olayı, girinti ucu altında yer alan yüksek oranda gerilmiş bir nano hacmin deformasyonundaki ani ilerlemeyi yansıtmaktadır (Corcoran ve ark., 1997). Al-%5Si alaşımında 5000 μN ve 10000 μN yükler ile yapılan indentasyon deneylerinde pop-in olayı görülmezken, Si[100]), Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarının pop-in süresizlikleri oluşmuştur. Si[100]'da oluşan pop-in sayısı, artan çekirdeklenme aktivitesi nedeniyle plastik deformasyonun başladığını belirten bir tetikleyici olarak uygulanan yükün artmasıyla birlikte artma eğiliminde olduğu görülmüştür. Alaşımda, pop-in tanımının aksine mevcut çalışmada yükünün artması ile birlikte pop-in sayısının azaldığı gözlemlenmiştir. Tek kristalli silisyuma uygulanan nanoindentasyon deneylerinde 5000 μN yükte pop in olayı görülmezken 10000 μN yükte pop in tanımına uygun olarak yük artıkça pop-in olayı artmaktadır. Si[100] ve Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si, Al-%20Si alaşımlarının 5000 μN ve 10000 μN 'luk yüklerle gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucunda malzemeye uygulanan kuvvet, basınç, maximum derinlik ve iz derinliği Çizelge 4.6 ve Çizelge 4.7'de gösterilmiştir.

4.4.2. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü değerleri

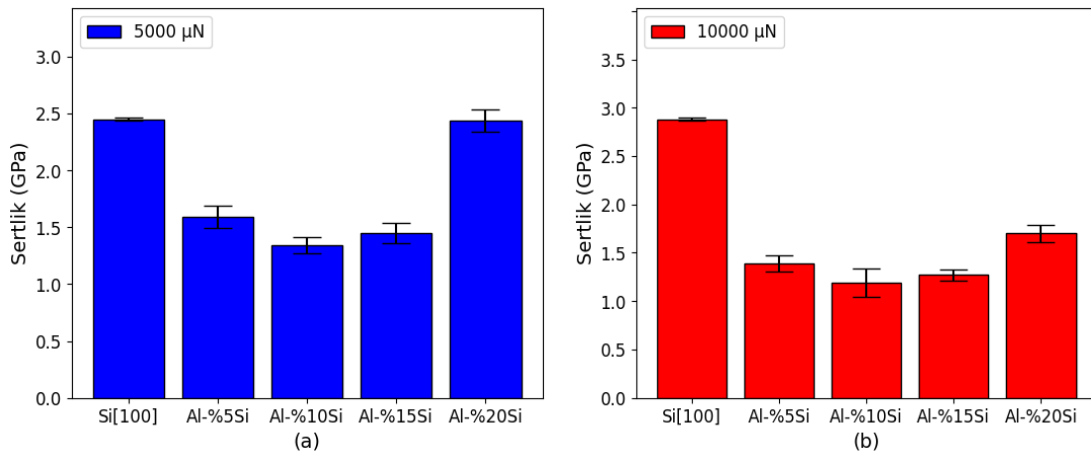
Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si[100] elementinin nanoindentasyon yöntemi ile 5000 μN ve 10000 μN yükler uygulanarak sertlik ve indirgenmiş elastisite modül (E_r (GPa)) değerleri Çizelge 4.8 ve 4.9'da gösterilmiştir.

Çizelge 4.8. Al-Si alaşımları ile tek kristalli Si [100] için sertlik ve indirgenmiş elastisite modül değerleri

Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	H(GPa)	E _r (GPa)
Si[100]	5000	2,45	38,65
Al-%5Si	5000	1,59	73,71
Al-%10Si	5000	1,34	44,79
Al-%15Si	5000	1,45	60,84
Al-%20Si	5000	2,44	86,11

Çizelge 4.9. Al-Si alaşımları ile tek kristalli Si [100] için sertlik ve indirgenmiş elastisite modülü değerleri

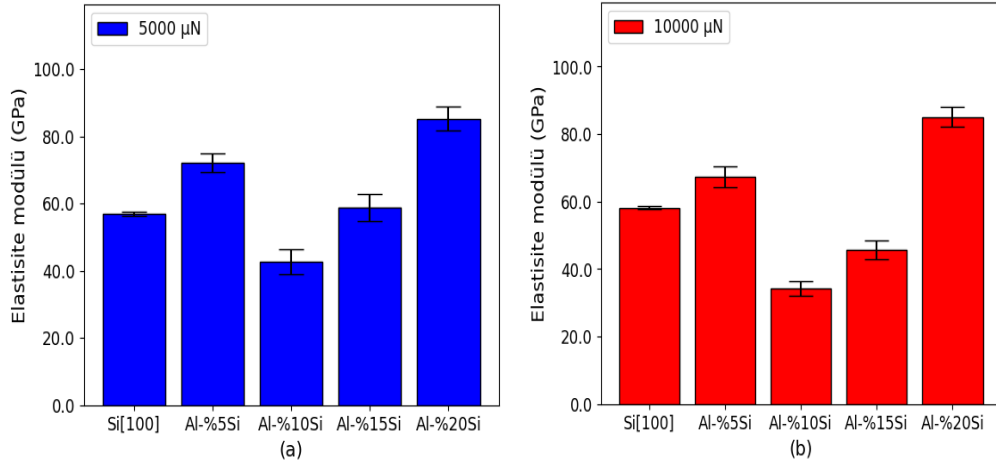
Alaşımlar	Uygulanan Yük(μN)	H(GPa)	E _r (GPa)
Si[100]	10000	2,88	66,29
Al-%5Si	10000	1,39	69,03
Al-%10Si	10000	1,19	36,11
Al-%15Si	10000	1,27	47,88
Al-%20Si	10000	1,70	85,86



Şekil 4.44. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için sertlik değerleri

Çizelge 4.10. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100]'ye ait elastisite modül ve indirgenmiş elastisite modül değerleri

Alaşımlar	E _m (GPa) 5000 (μN)	E _m (GPa) 10000 μN
Si[100]	56,97	58,12
Al-%5Si	72,14	67,27
Al-%10Si	42,69	34,15
Al-%15Si	58,84	45,76
Al-%20Si	85,27	85,01



Şekil 4.45. Al-Si alaşımları ve tek kristalli Si [100] için elastisite modül değerleri

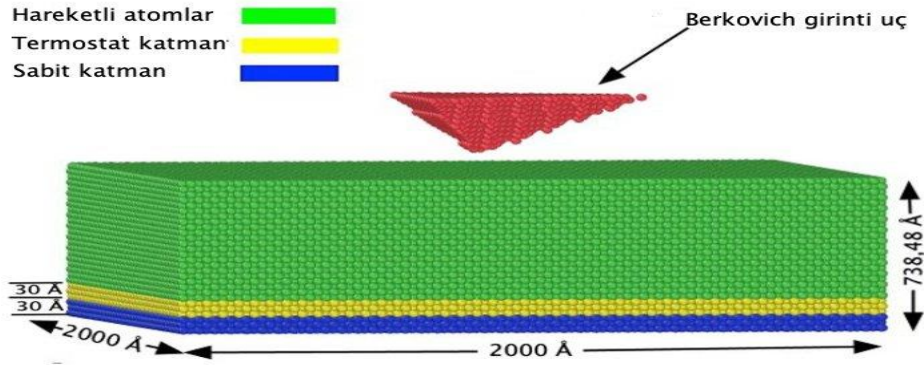
4.5. Moleküller Dinamik Simülasyon Sonuçları ve Analizi

Periyodik sınırlara sahip Cu[100], Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımların simülasyon modeli, Şekil 4.61’de gösterildiği gibi elmas girinti uç ile birlikte iki ana bileşenden oluşmaktadır. C++ yazılım dili kullanılarak moleküller dinamik simülasyon betiği oluşturulmuştur. Simülasyon modelinin ölçüleri 2000x2000x738,48 Å olup 112681 atomdan oluşmaktadır. İndentasyon girinti ucu için Berkovich uçlu bir elmas (karbon) uç modellenmiştir. İndentasyon girinti ucu olan Berkovich uç modeli [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır simülasyon modelin yüzeyine 16 Å uzaklıkta konumlandırılmıştır. Simülasyon modelinin kafes yapısı yüzey merkezli kübik yapı (YMK), kafes sabiti de 3,615 Å olarak ayarlanmıştır. (Szczërba ve ark., 2017). Boyut etkisini azaltmak için model, X ve Y yönlerine periyodik sınır koşulu kullanırken, Z yönünde serbest sınır koşulu kullanılmıştır. Kristal yönelimi X, Y ve Z yönlerinde sırasıyla [1 0 0], [0 1 0] ve [0 0 1] olarak belirlenmiştir. Simülasyon modelinde periyodik sınır koşulları, alt tabakanın genel olarak yer değiştirme yapmasını önlemek için sabit sınır tabakası, sistem sıcaklığını sabit tutmak için termostatik tabaka, temas bölgesinin, atom hareketini Newton denklemleriyle tanımlamak için newton tabakası oluşturulmuştur. Hareket denklemi femtosecond(fs) (Martys ve Mountain, 1999) zaman adımıyla entegre etmek için hız-verlet algoritmasını kullanılmıştır. Sıcaklık ve basıncı kontrol etmek için Nose-Hoover termostadı ve barostat uygulanmıştır (Holian ve ark., 1985). Sistemin denge durumundaki sıcaklığı ve basıncı sırasıyla 300 K ve 1 bar olarak ayarlanmıştır. Toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adım, tüm sistem için 1170000 (fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için

GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli(Daw ve Baskes,1984), Cu-C etkileşimi için morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Modellenen malzemenin kristal yapı analizi için (CAT) (Stukowski ve ark., 2012) kullanılarak, sonuçlar OVITO'da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

4.5.1. Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımların MD simülasyon sonuçları ve analizi

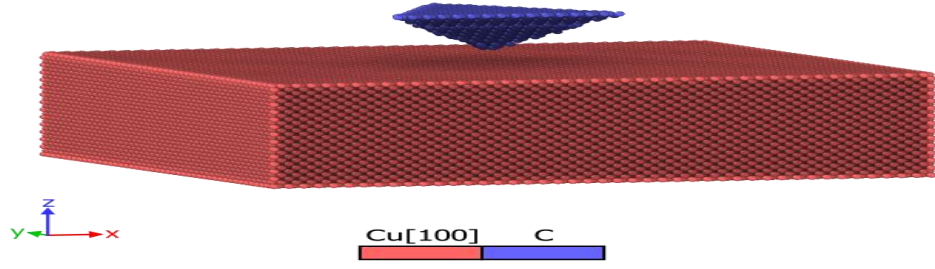
Tek kristalli Cu[100] metali ve Si[100] yarı metali ile Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si, Al-%20Si ve Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının moleküller dinamik simülasyon modeli Şekil 4.46'da gösterilmiştir.



Şekil 4.46. MD simülasyonlar için oluşturulan simülasyon modeli

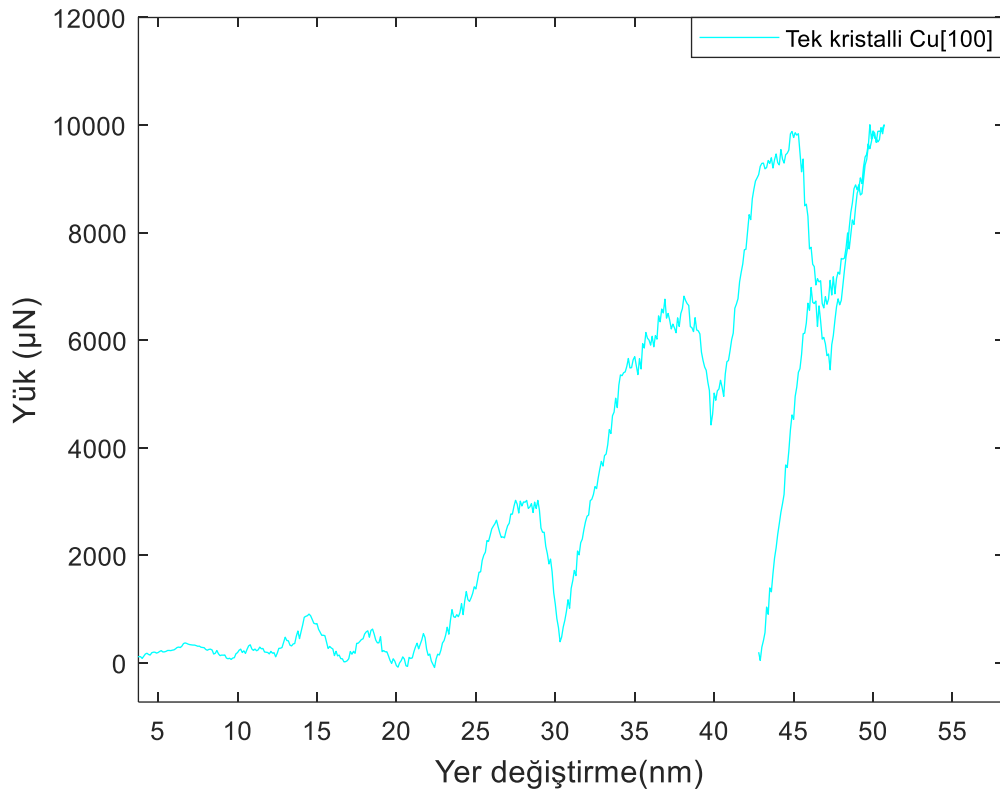
4.5.1.1. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon deney sonuçları ve analizi

Şekil 4.47'de görülen tek kristalli Cu[100] metalinin simülasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli, Cu-C etkileşimi için Morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır.



Şekil 4.47. Tek kristalli Cu [100] metalinin simülasyon modeli

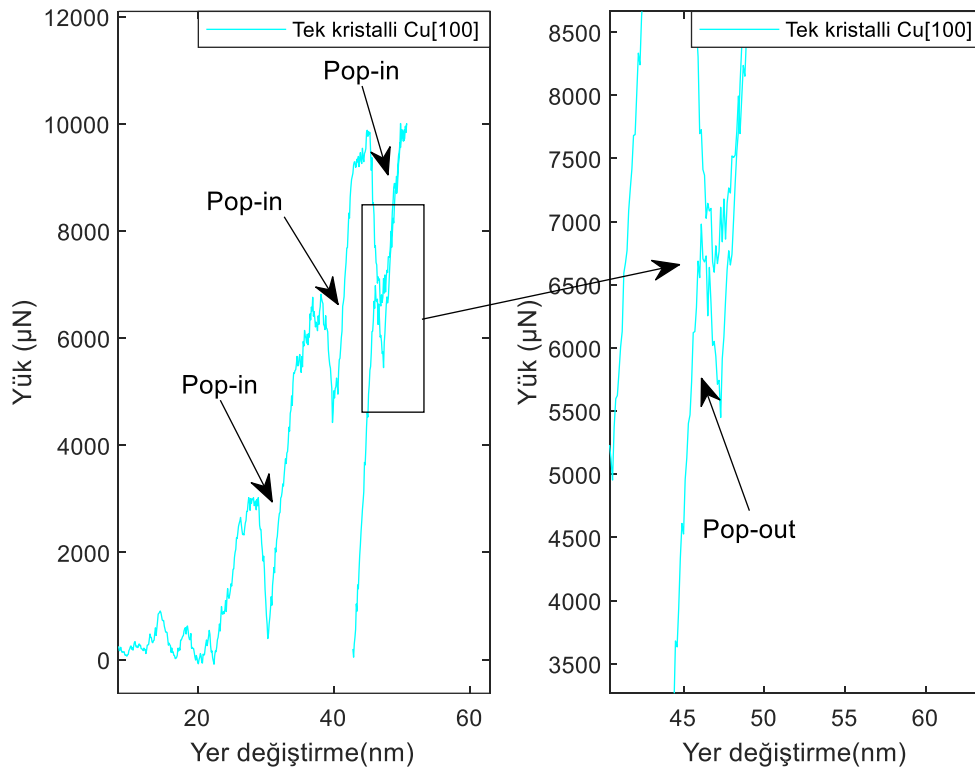
Metal ve metal alaşımları için geliştirilen GAM potansiyelleri önceki indentasyon çalışmalarında fcc ve bcc kristallerindeki metal plastisitesini araştırmak için yaygın olarak kullanılmıştır(Alhafez ve ark., 2015; Ruestes ve ark., 2017; Varillas ve ark., 2017; Remington ve ark., 2014).



Şekil 4.48. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.48’de Tek kristalli Cu[100] metalinin moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu elde edilen veriler kullanılarak yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyinde girinti yükü 10006,46 µN yüke kadar artırılıp indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket

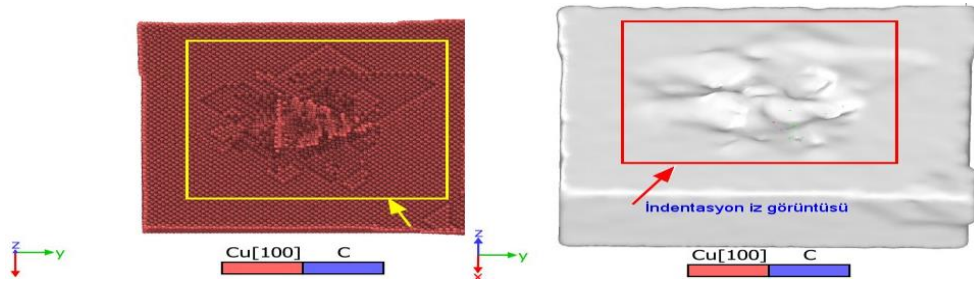
denklemlerinin zaman entegrasyonu için 1 femtosecond (fs)'lik bir zaman adımına sahip hız Verlet algoritması kullanılarak 1170000 (fs) adım da ve $T=300K$ sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.48'de görüldüğü üzere yük boşaltma sırasında girintinin hareketi ile yük değeri kademeli olarak sıfıra düşmüştür. İndentasyon sonucu girinti derinliği 40 nm'den büyük olduğundan, plastik deformasyonun oluştuğunu göstermektedir.



Şekil 4.49. Tek kristalli Cu[100] metalinin indentasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

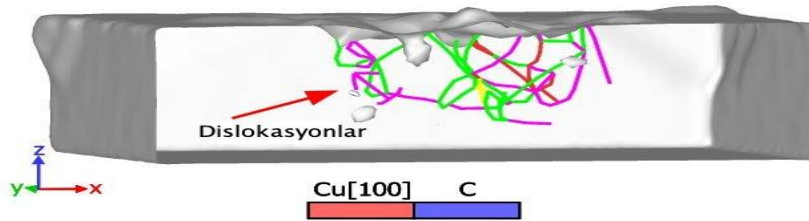
Şekil 49'da görüldüğü üzere yük-yer değiştirme eğrisinde pop-in olayları olarak adlandırılan süreksizlikler oluşmuştur. Pop-in olaylarının altında yatan mekanizma, çeşitli araştırmacılar tarafından deneysel olarak açıklanmıştır (Wang ve ark., 2011; Wu ve ark., 2015; Morris ve ark., 2011). İlk pop-in olayı, yeni başlayan plastisitenin başlangıcı olarak adlandırılan elastik bölgeden plastik bölgeye geçiş, deneysel sonuçlarla bildirildiği gibi, indenter tarafından uygulanan maksimum kuvvet teorik kesme mukavemetini aştığında meydana gelir (Wu, ve ark., 2014; Wu ve ark., 2015; Morris ve ark., 2011). Pop-in olayları, homojen dislokasyon çekirdeklenmesinden veya mevcut dislokasyonun aktivasyonundan kaynaklanmaktadır (Xiong ve Gu, 2015; Wu ve ark., 2015; Morris ve

ark., 2011). Şekil 4.49’da yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. Bir pop-in olayında, sabit yükte ani bir gerinim patlaması (veya girintinin batması) genellikle dislokasyon hareketinin (veya yeni başlayan plastisitenin) başlangıcı olarak kabul edilmektedir. Başka bir deyişle, elastiklikten plastikliğe geçişin göstergesidir. Şekil 4.49’da görülen yük-boşaltma eğrisinde gözlemlenen pop-out olayında ani bir malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Bu olay, patlama oluşumunun maksimum girinti yükünden ve yükleme / boşaltma oranlarından önemli ölçüde etkilendiği söylenebilir (Juliano ve ark., 2003; Juliano ve ark., 2004; Ruffell ve ark., 2007; Cheong ve Zhang, 2000). Şekil 4.50’de indentasyon sonucu malzeme yüzeyinde oluşan plastik deformasyon gösterilmiştir.



Şekil 4.50. MD simülasyon sonucu tek kristalli Cu[100] metalinin yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.51’deki grafik incelendiğinde, 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun [100] kristalografik yöneline sahip tek kristalli Cu[100] metalinin yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. İndetasyon deneyi sonucunda tek kristalli Cu[100] metalinin yüzeyi elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği meydana geldiği görülmektedir.



Şekil 4.51. MD simülasyon sonucu Cu[100] metalinin iç yapısında oluşan dislokasyonlar

bölgesinde oluştuğu ve daha kolay hareket edebildiği gözlemlenmiştir. Dislokasyonun eğme gerilimi aşağıdaki denklemden elde edilebilmektedir (Kato ve ark., 2008).

$$\tau_c = \frac{\mu b}{2\pi L} \ln\left(\frac{L}{10b}\right) \quad (4.1)$$

μ elastisite modülü, b Burgers vektörü büyüklüğü, L sabitleme noktaları arasındaki mesafedir. Dislokasyonun dışarı çıkması için gerekli olan stres τ_c 'dir. Çizelge 4.11'de indentasyon deneyi sonucu oluşan dislokasyon çeşitleri ve Burgers vektör yönleri görülmektedir.

Çizelge 4.11. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
				
1/6[-1 2 -1]	-	1/6[1 0 -1]	1/3[-1 0 0]	1/18[-1 -1 -4]
1/6[-2 1 -1]		1/6[-1 -1 0]	1/3[0 0 -1]	1/6[3 0 1]
1/6[1 -2 -1]		1/6[0 -1 -1]		1/18[-2 -7 1]
1/6[-2 1 -1]		1/6[-1 0 -1]		
1/6[-1 -1 2]		1/6[0 -1 1]		
1/6[-1 1 2]		1/6[1 1 0]		
1/6[1 2 1]		1/6[0 1 1]		
1/6[-2 1 1]		1/6[-1 1 0]		
1/6[-1 -2 1]		1/6[1 0 1]		
1/6[2 1 1]				
1/6[2 1 -1]				

Deney sonucu elde edilen veriler ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik ve elastisite modül hesaplanmıştır. Sertlik, bir malzemenin dışsal bir kuvvet tarafından uygulanan lokalize plastik deformasyona karşı gösterdiği direnci ifade eden önemli bir özelliktir. MD yöntemi ile yapılan indentasyon deneyinde Çizelge 4.25'deki veriler kullanılarak sertlik (Oliver ve Pharr,2004) ve elastisite modül değerleri hesaplanmıştır(Oliver ve Pharr,1992;Curtin ve Miller,2003; Park ve Liu,2004).

Çizelge 4.12. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	P _{max} (μN)	h _{max} (nm)	h _c (nm)	A(nm ²)
Cu[100]	10000,46	50,7	50,2	2968,72

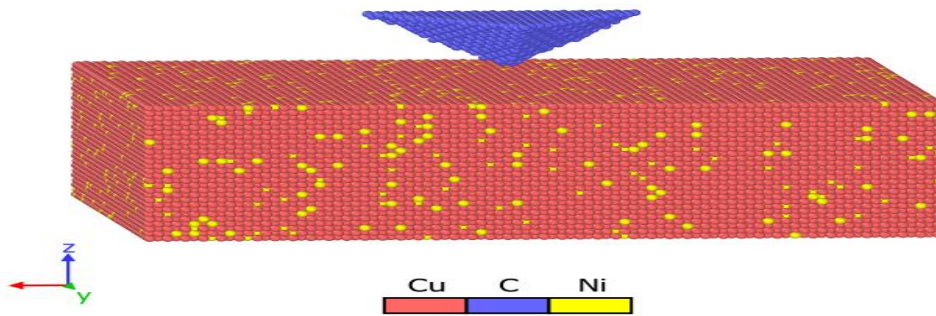
Çizelge 4. 13. Tek kristalli Cu[100] metalinin MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(\text{GPa})$	$E_m(\text{GPa})$	$H(\text{GPa})$
Cu[100]	117	114,3321	0,337

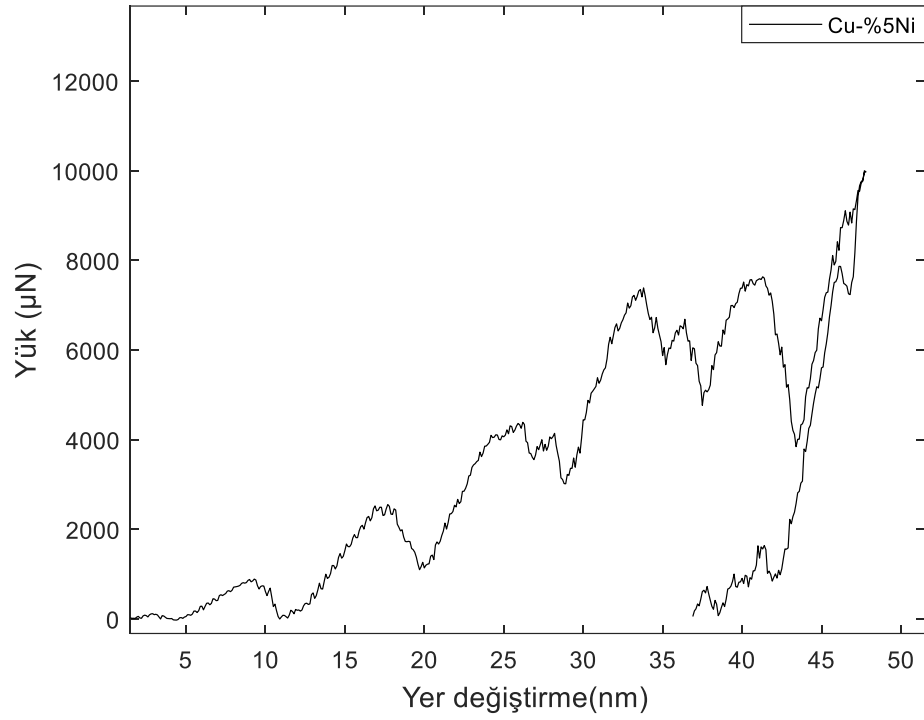
Çizelge 4.25 ve Çizelge 4.26’de moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak 1170000(fs) simülasyon adım ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu tek kristalli Cu[100] metalinin yüzeyinde girinti ucun uygulandığı kuvvet, derinlik, girinti iz verileri, indirgenmiş elastisite modülü, elastisite modülü ve sertlik değerleri gösterilmiştir.

4.5.1.2. Cu-%5Ni alaşımın MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.53’te görülen Cu-%5Ni alaşım simülasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli, Cu-C ve Ni-C etkileşimi için Morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Deney sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Deney sonuçları, bilimsel bir veri görselleştirme ve analiz yazılımı olan Ovito’da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

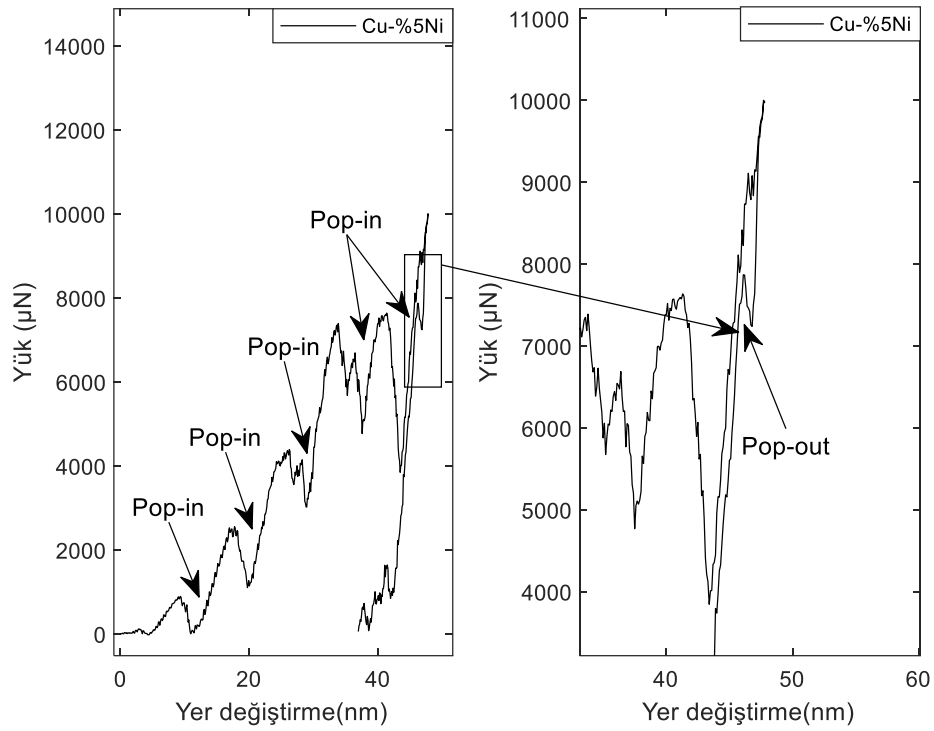


Şekil 4.53. Cu-%5Ni alaşımın simülasyon modeli



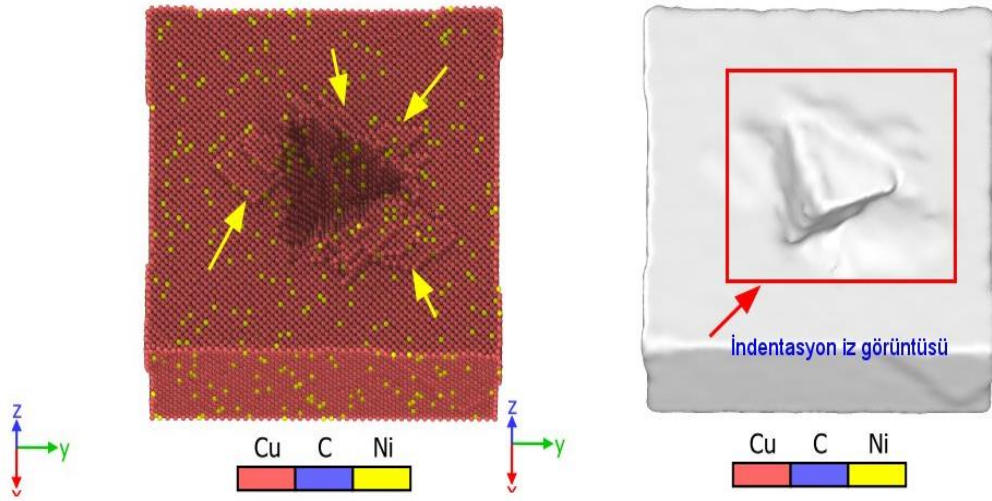
Şekil 4.54. Cu-%5Ni alaşımlarının MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.54'teki grafikte %5 nikel içeren bakır-nikel alaşımlarının moleküler dinamik simülasyon (MD) yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonuçlarına dayalı olarak elde edilen yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyi, başlangıçta indentasyon yükünün 0 μN olduğu ve yükün artırılarak 10001,49 μN 'a çıkarılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için 1 picoseconds (fs) zaman adımı kullanılan hız Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.55'te görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin 47,1 nm olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, malzeme üzerinde girinti oluşumu sırasında plastik deformasyonun meydana geldiğini göstermektedir. Şekil 4.56'da indentasyon deneyi sonucu Cu-%5Ni alaşım yüzeyinde oluşan plastik deformasyon görülmektedir.



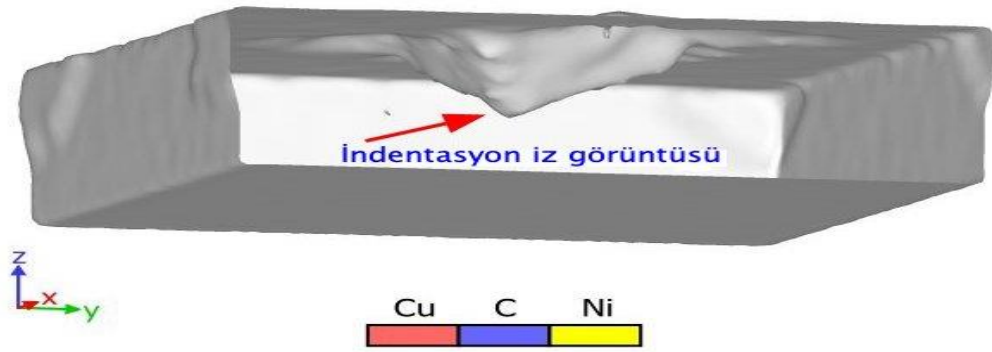
Şekil 4.55. Cu-%5Ni alaşımların MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

Şekil 4.55'te Cu-%5Ni alaşım simülasyonunun yüzeyinde uygulanan indentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirme grafiğinde pop-in olayları olarak adlandırılan süreksizlikler belirgin bir şekilde oluşmuştur. İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. Girinti yükün artması ile birlikte oluşan ani ilk gerinim patlaması (veya girintinin batması) Cu-%5Ni alaşım simülasyonunda dislokasyon hareketinin (veya yeni başlayan plastisitenin) başlangıcı olduğu söylenebilir. Şekil 4.55'te Cu-%5Ni alaşımda girinti yükün boşalması sırasında 7000 μN – 8000 μN yükleri arasında ilk pop-out olayı gözlemlenmiştir. Bu da ilk olarak bu yükte malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükünün tamamen boşalmadan önce 0 μN - 2000 μN yükler arasında çok sayıda pop-out olayı gözlemlenmiştir.



Şekil 4.56. MD simülasyon sonucu Cu-%5Ni alaşımın yüzeyinde oluşan deformasyonlar

İndentasyon deneylerinde 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Cu-%5Ni alaşımının yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. İndentasyon deneyi sonucunda Cu-%5Ni alaşım malzeme yüzeyinde girinti bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği meydana geldiği görülmektedir.



Şekil 4.57. MD simülasyon sonucu Cu-%5Ni malzemesinin iç yapısı ve girinti iz görüntüsü

Şekil 4.57’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucun %5 nikel içeren bakır-nikel (Cu-%5Ni) alaşımın iç yapısında dislokasyonların oluşmadığı gözlemlenmiştir. Bu da pop-in ve pop-out olaylarının dislokasyon oluşumundan bağımsız bir Şekilde olduğu söylenebilir. Deney sonucu elde edilen veriler ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik ve elastisite modül analiz edilmiştir. Sertlik, bir malzemenin dışsal bir kuvvet tarafından uygulanan lokalize plastik deformasyona karşı gösterdiği direnci ifade eden önemli bir özelliktir. Sertlik

değeri, girinti testi tamamlandığında Çizelge 4.15 ve Çizelge 4.16’da indentasyon deneyleri sonucu elde edilen değerler kullanılarak hesaplanan sertlik (Oliver ve Pharr,2004) ve elastisite modül(Oliver ve Pharr,1992;Curtin ve Miller,2003; Park ve Liu,2004) değerleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.14. Cu-%5Ni alaşımanın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

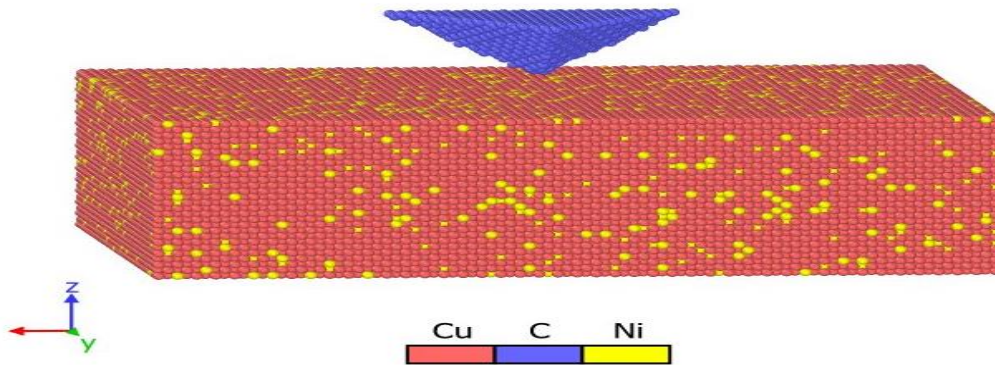
Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Cu-%5Ni	10001,49	47,8	47,1	18659,49

Çizelge 4.15. Cu-%5Ni alaşımanın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m(GPa)$	$H(GPa)$
Cu-%5Ni	127	126,30	0,536

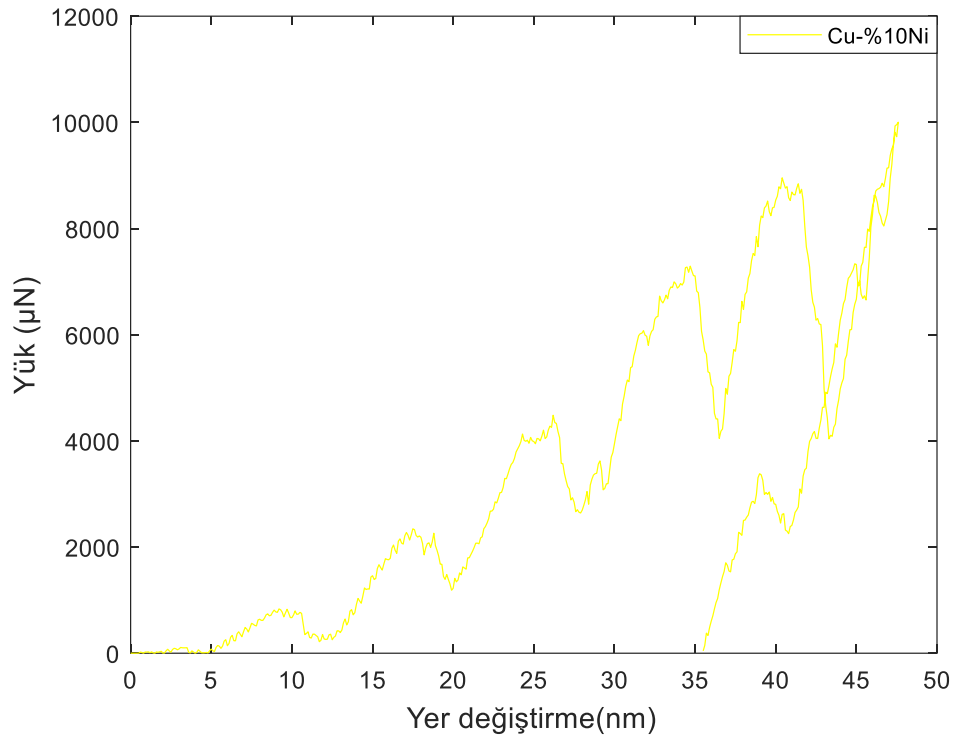
4.5.1.3. Cu-%10Ni alaşımasının MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.58’de görülen Cu-%10Ni alaşım simülasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli, Cu-C ve Ni-C etkileşimi için morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. İndentasyon deneyleri sonucu malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Deney sonuçları veri görselleştirme ve analiz yazılımı olan OVITO’da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

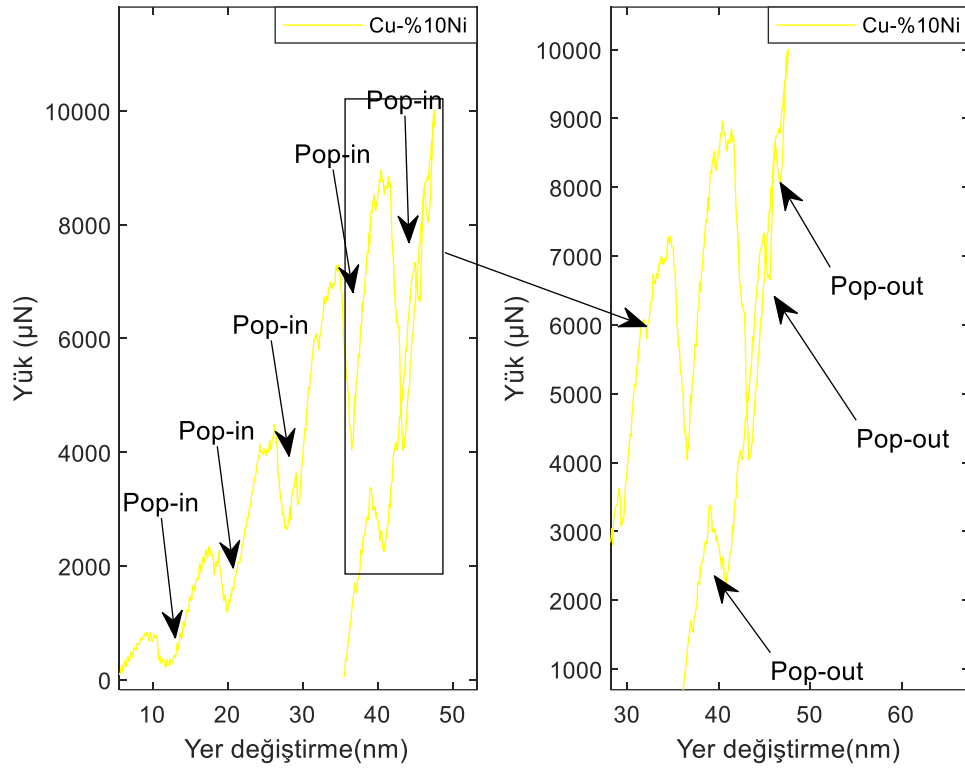


Şekil 4.58. Cu-%10Ni alaşımanın simülasyon modeli

Şekil 4.59’da %10 nikel içeren bakır-nikel alaşımına uygulanan indentasyon deneyinin moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile elde edilen yük-yer değiştirme grafiği gösterilmektedir. İndentasyon deneyi, başlangıçta indentasyon yükünün 0 μN olduğu ve yükün artırılarak 10002,58 μN ’a çıkarılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton’un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için 1 femtosecond (fs) zaman adımı kullanılan hız Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300 K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.59’da görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin izi 35 nm’nin üzerinde bir değer olduğu görülmüştür. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun meydana geldiğini göstermektedir. Şekil 4.61’de indentasyon sonucu Cu-%10Ni alaşım yüzeyinde oluşan plastik deformasyon görülmektedir.

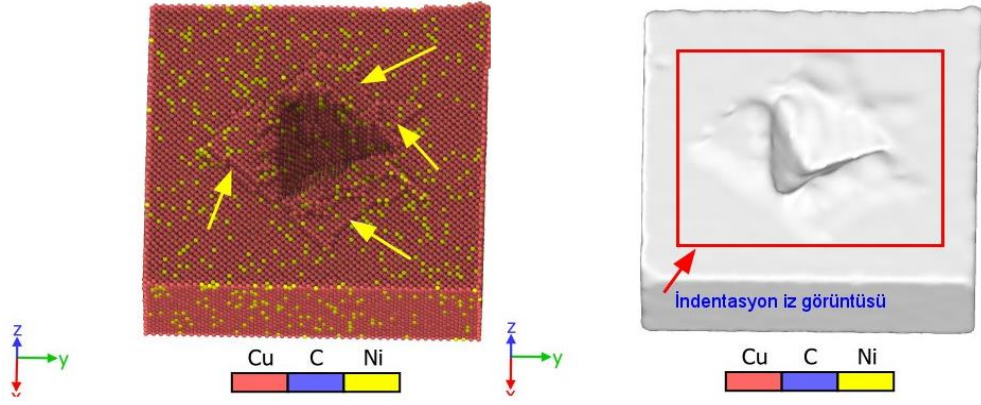


Şekil 4.59. Cu-%10Ni alaşımı için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği



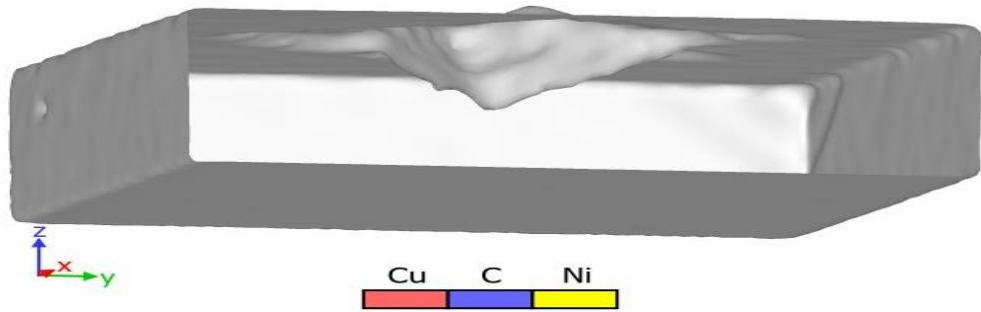
Şekil 4.60. Cu-%10Ni alaşımlarının indentasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

Şekil 4.60'ta Cu-%10Ni alaşım simülasyonu üzerinde yapılan indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde pop-in olayları olarak adlandırılan süreksizlikler belirgin bir şekilde oluşmuştur. İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. En büyük pop-in olayı 8000 μN ile 10000 μN kuvvetleri arasında olduğu görülmüştür. Şekil 4.60'da Cu-%10Ni alaşımında girinti yükün boşalması sırasında belirli yük aralığında pop-out olaylarının olduğu gözlemlenmiştir. Bu da ilk olarak bu yükte malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükünün 2000 μN 'dan tamamen boşalmasına kadar herhangi bir pop-out olayının oluşmadığı gözlemlenmiştir.



Şekil 4.61. MD simülasyon sonucu Cu-%10Ni alaşımanın yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.61 incelendiğinde, 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Cu-%10Ni alaşımasının yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. Berkovich uç ile gerçekleştirilen deneyde girdi uç etrafında yığılmaların ve penetrasyonların gerçekleştiği gözlemlenmiştir. Cu-%10Ni alaşım malzeme yüzeyinde maksimum 10002.58 μN girinti yüküne kadar yapılan indentasyon deneyi sonucu indent bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği meydana geldiği görülmektedir. Şekil 4.62’de indentasyon sonucu Berkovich ucun oluşturduğu plastik bölge gösterilmiştir.



Şekil 4.62. MD simülasyon sonucu Cu-%10Ni alaşımasının iç yapısı ve girinti iz görüntüsü

Şekil 4.62’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucun %10 nikel içeren bakır-nikel (Cu-%10Ni) alaşımanın iç yapısında dislokasyonların oluşmadığı gözlemlenmiştir. Şekil 4.60’da görüldüğü üzere indentasyon sonucu Cu-%10Ni alaşımaında oluşan pop-in ve pop out olaylarının dislokasyon oluşumundan bağımsız bir Şekilde olduğu söylenebilir. Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile yapılan indentasyon deneyi için kullanılan parametreler ve indentasyon sonucu elde edilen veriler

ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik, elastisite modül ve indirgenmiş elastisite modül değerleri hesaplanmıştır. Sertlik değeri, elastisite modülü ve indirgenmiş elastisite modül değerleri indentasyon deneyi sonucu Çizelge 4.17’de indentasyon deneyleri sonucu elde edilen ve hesaplanan veriler gösterilen kullanılarak hesaplanan, sertlik (Oliver ve Pharr,2004), elastisite modülü ve indirgenmiş elastisite modül(Oliver ve Pharr,1992; Curtin ve Miller,2003) değerleri Çizelge 4.18’de gösterilmiştir.

Çizelge 4.16. Cu-%10Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

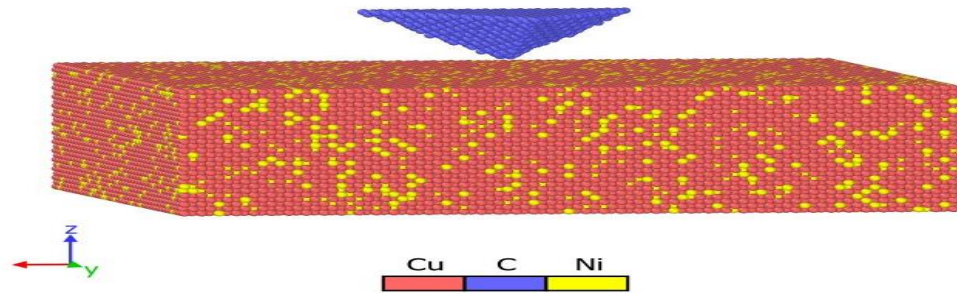
Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Cu-%10Ni	10002,58	47,6	46,9	17216,14

Çizelge 4.17. Cu-%10Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m(GPa)$	$H(GPa)$
Cu-%10Ni	129	128,5477	0,581

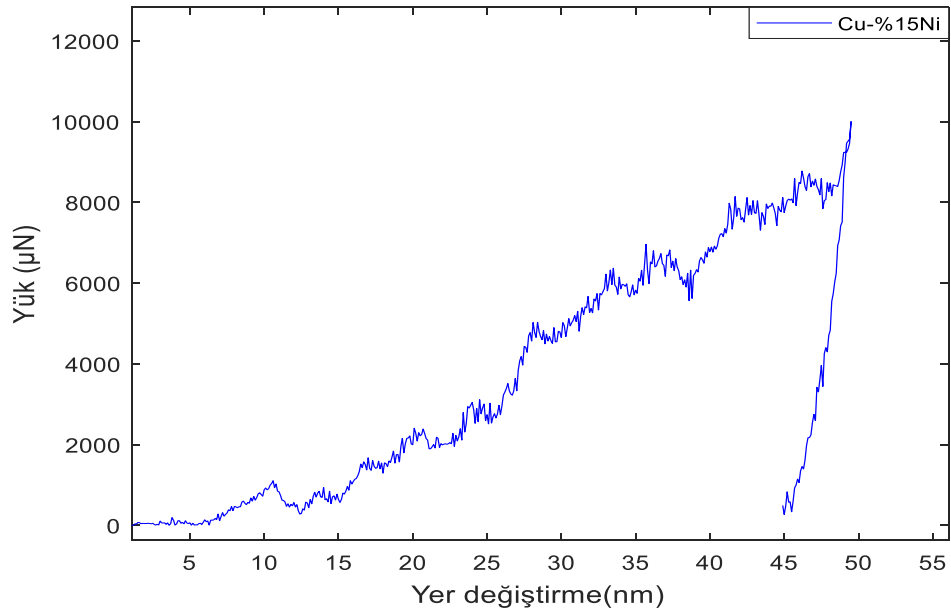
4.5.1.4. Cu-%15Ni alaşımın MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.63’teki Cu-%15Ni alaşımın simülasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli, Cu-C ve Ni-C etkileşimi için Morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. İndentasyon deneyi sonucu malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Deney sonucu malzeme yüzeyinde oluşan deformasyonlar ve dislokasyonları görselleştirmek ve analiz etmek için OVITO(Stukowski, 2009) görselleştirilme programı kullanılmıştır.

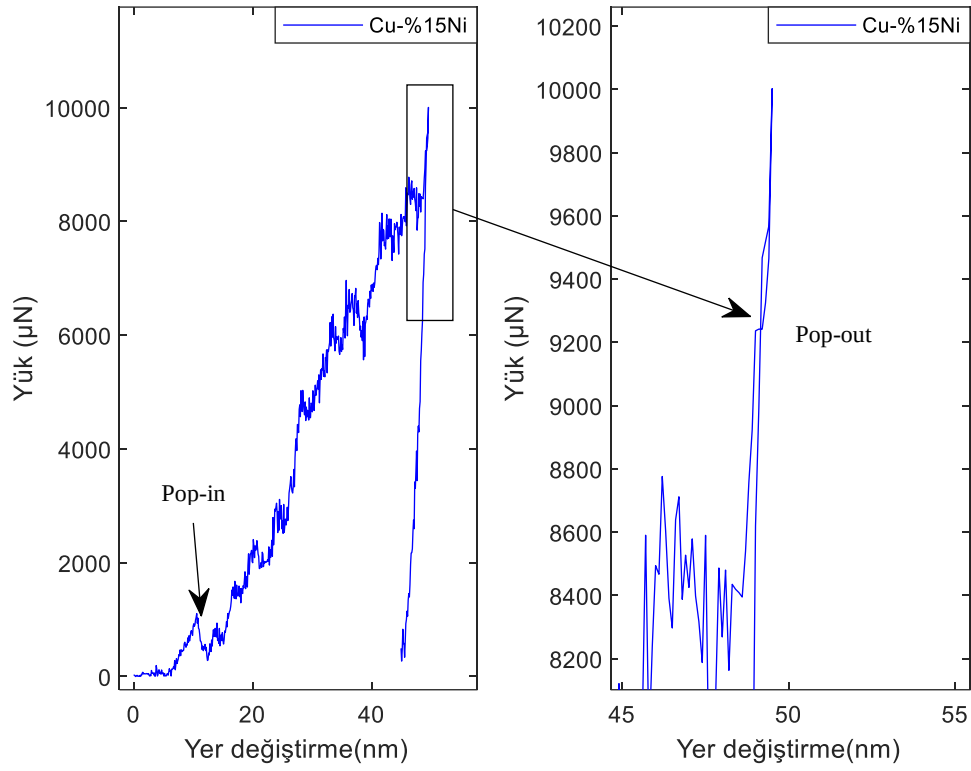


Şekil 4.63. Cu-%15Ni alaşımın simülasyon modeli

Şekil 4.64'teki grafikte %15 nikel içeren bakır-nikel alaşımının moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonuçlarına dayalı olarak elde edilen yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyin de girinti yükünü 10030,46 μN 'a çıkarılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için femtoseconds (fs) zaman adımı kullanılan hız Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.64'te görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin izi 45 nm'den büyük olduğu gözlenmektedir. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun meydana geldiğini göstermektedir.

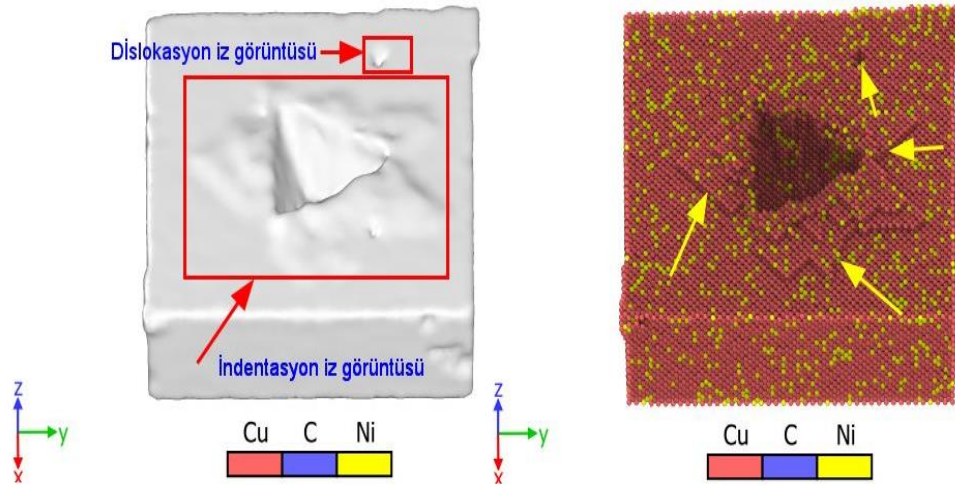


Şekil 4.64. Cu-%15Ni alaşımı için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği



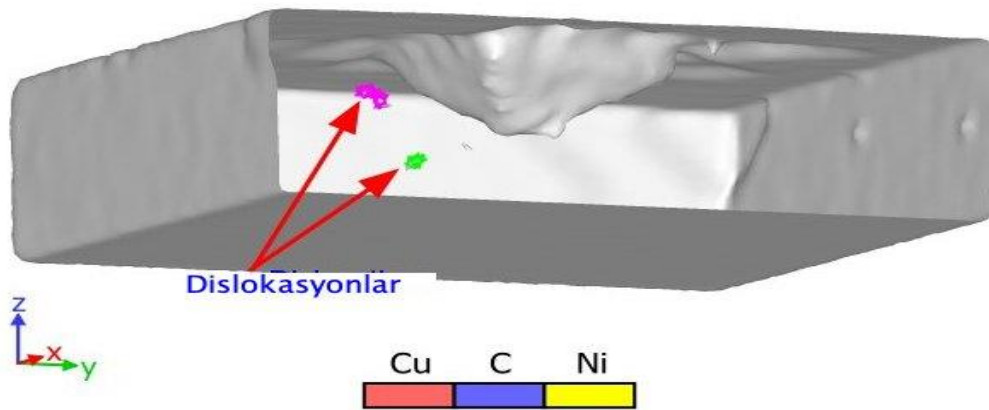
Şekil 4.65. Cu-%15Ni MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

Şekil 4.65'te Cu-%15Ni alaşım simülasyonu üzerinde yapılan indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde alaşım içerisinde nikel oranının artması ile birlikte pop-in olayları olarak adlandırılan süreksizlikler %5 ve %10 nikel içeren Cu-Ni alaşımlarına göre daha fazla pop-in olayının olduğu görülmüştür. İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Bu olay dislokasyon hareketinin (veya yeni başlayan plastisitenin) başlangıcı olduğu da söylenebilir. Girinti yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. En büyük pop-in olayı 4000 μN ile 8000 μN kuvvetleri arasında olduğu görülmüştür. Şekil 4.65'te Cu-%15Ni alaşımda girinti yükün boşalması sırasında belirli yük aralığında pop-out olaylarının olduğu gözlemlenmiştir. Bu da ilk olarak bu yükte malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükün 6000 μN 'dan tamamen boşalmasına kadar herhangi bir pop-out olayı gözlemlenmemiştir.

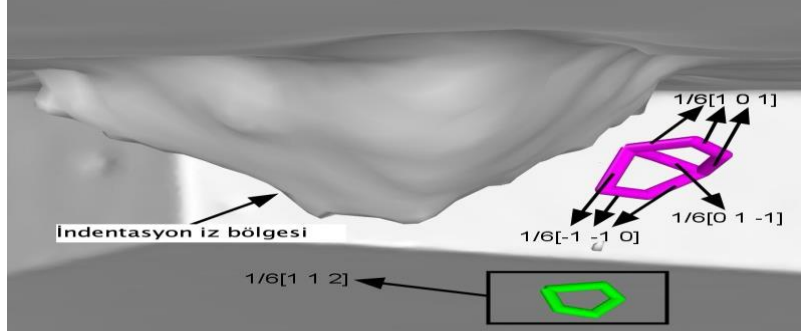


Şekil 4.66. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşıminin yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.66 incelendiğinde, 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Cu-%15Ni alaşıminin yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. Berkovich uç ile gerçekleştirilen deneyde girdi uç etrafında yığılmaların ve penetrasyonların nikel oranının artmasına bağlı olarak arttığı gözlemlenmiştir. Cu-%15Ni alaşım malzeme yüzeyinde maksimum 10030,46 μN girinti yüküne kadar yapılan indentasyon deneyi sonucu indent bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği meydana geldiği görülmektedir. Şekil 4.67 ve Şekil 4.68’de indentasyon sonucu Berkovich ucun oluşturduğu iz görüntüsü ve plastik bölge ve dislokasyonlar gösterilmiştir.



Şekil 4.67. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşıminin iç yapısı ve girinti iz görüntüsü



Şekil 4.68. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar

Şekil 4.67 ve Şekil 4.68’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich tip girinti uç ile gerçekleştirilen indentasyon deneyinde %15 nikel içeren Cu-%15Ni alaşımın iç yapısında Shockley ve Stair-rod, dislokasyonların olduğu gözlemlenmiştir. Cu-%15Ni alaşımında oluşan bu dislokasyonların plastik bölgede yoğunlaşmadığı görülmüştür. Çizelge 4.19’da Cu-%15Ni alaşım malzemesinde yapılan indentasyon deneyi sonuçlarına dayalı olarak dislokasyonların ve bu dislokasyonların burgers vektörlerinin kristalografik yönelimleri verilmiştir.

Çizelge 4.18. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
1/6[1 1 2]	-	1/6[-1 -1 0] 1/6[1 0 1] 1/6[0 1 -1]	-	-

Çizelge 4.20’de moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak 1170000(fs) simülasyon adım ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu %15 nikel ilaveli Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar gösterilmiştir.

Çizelge 4.19. MD simülasyon sonucu Cu-%15Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar

Burger vektörü	Uzamsal burger vektörü	Uzunluk	Küme	Kristal yapı
1/6[1 1 2]	0.6013 0.6006 1.2178	144.168	1	FCC
1/6[-1 -1 0]	-0.6006 -0.6006 0.0003	105.479	1	FCC
1/6[1 0 1]	0.6008 -0.0001 0.6088	107.309	1	FCC
1/6[0 1 -1]	-0.0002 0.6007 -0.6091	574.269	1	FCC

Deney sonucu elde edilen veriler ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik ve elastisite modül analiz edilmiştir. Sertlik, bir malzemenin dışsal bir kuvvet tarafından uygulanan lokalize plastik deformasyona karşı gösterdiği direnci ifade eden önemli bir özelliktir. Sertlik değeri, girinti testi tamamlandığında Çizelge 4.33'te gösterildiği gibi elde edilen veriler kullanılarak sertlik(Oliver ve Pharr,2004) ve elastisite modülü(Oliver ve Pharr,1992;Curtin ve Miller,2003; Park ve Liu,2004) değerleri hesaplanmıştır.

Çizelge 4.20. Cu-%15Ni alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Cu-%15Ni	10030,46	48,3	47,7	17943,57

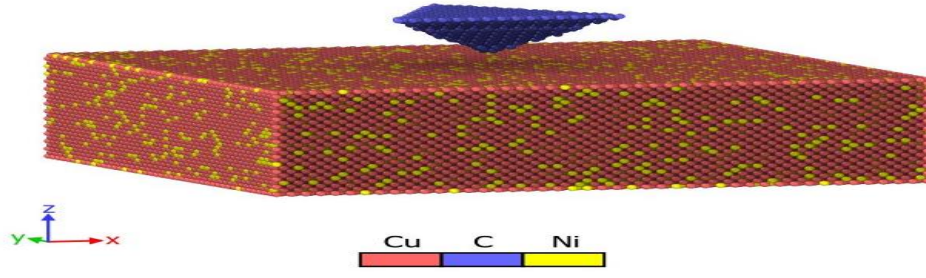
Çizelge 4.21. Cu-%15Ni alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m(GPa)$	$H(GPa)$
Cu-%15Ni	144	145,64	0.559

Çizelge 4.21'de moleküller dinamik simülasyon sonucu girinti ucun uygulandığı kuvvet, derinlik, girinti iz verileri kullanılarak hesaplanan indirgenmiş elastisite modülü, elastisite modülü ve sertlik değerleri Çizelge 4.22'de gösterilmiştir.

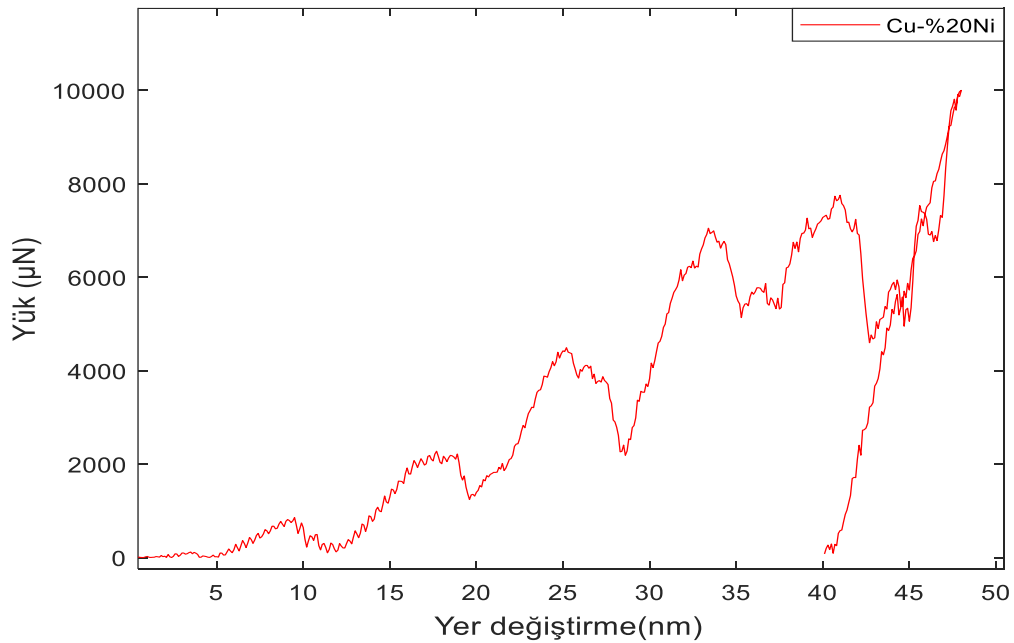
4.5.1.5. Cu-%20Ni alaşımın MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.84'te gösterilen Cu-%20Ni alaşımın alaşımın simülasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda Cu-Cu etkileşimi için GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli, Cu-C ve Ni-C etkileşimi için Morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Simülasyon sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Ayrıca deney sonucu malzeme yüzeyinde oluşan deformasyonlar ve dislokasyonlar OVITO'da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

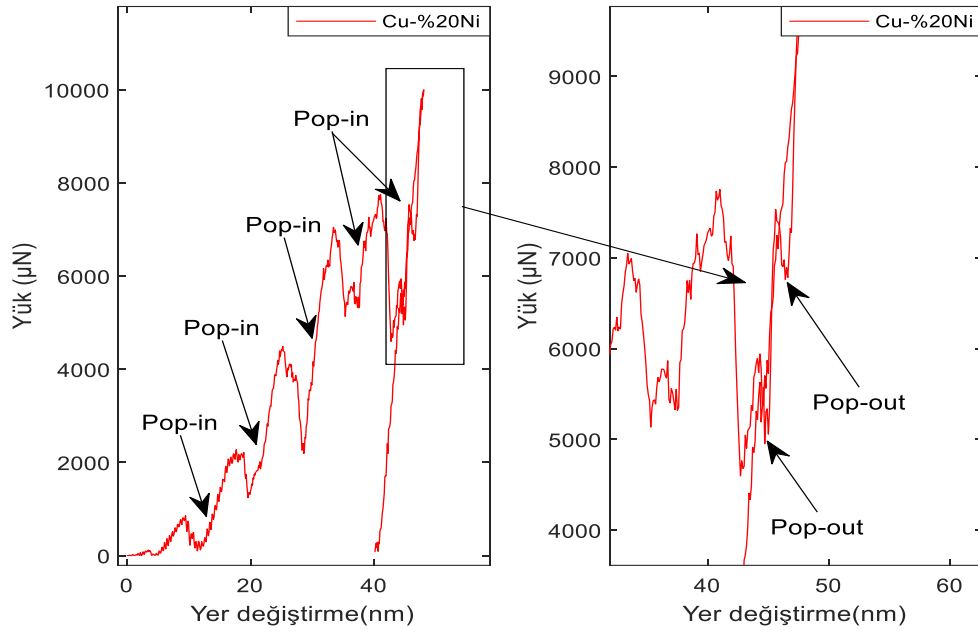


Şekil 4.69. Cu-%20Ni alaşımanın simülasyon modeli

Şekil 4.70’te ağırlıkça %20 nikel içeren bakır-nikel alaşımasının moleküler dinamik simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyin de girinti yükünü 10000,63 μN ’a çıkarılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için femtoseconds (fs) zaman adımı kullanılan hız Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.70’te görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin izi 40 nm’den büyük olduğu görülmüştür. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik deformasyonun meydana geldiğini göstermiştir.



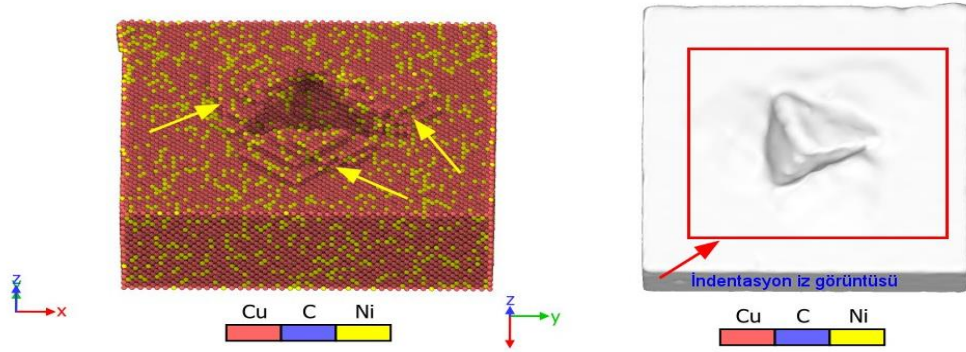
Şekil 4.70. Cu-%20Ni alaşımı için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.71. Cu-%20Ni alaşımında MD simülasyon sonucu oluşan pop-in ve pop-out olayları

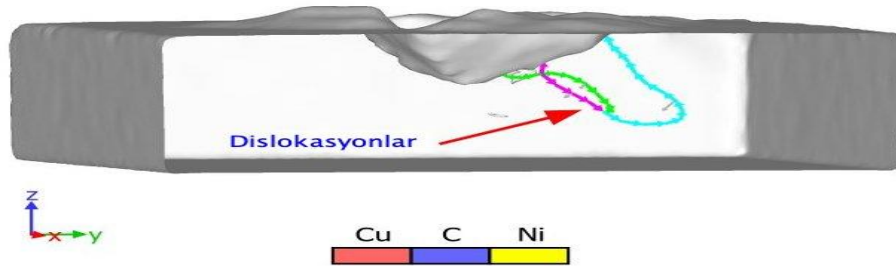
Şekil 4.71’de Cu-%20Ni alaşımının indentasyon deneyi sürece girinti ucun malzeme yüzeyinde indentasyon süresince uygulanan kuvvet yavaşça artmaktadır. Fakat bazı noktalarda ani bir kuvvet artışı gözlemlenmiştir. Bu artış, girintinin daha fazla derinleşmesi sırasında meydana gelen bir dislokasyon (kristal yapıdaki atomların yer değiştirmesi) veya diğer plastik deformasyon olaylarının başladığını göstermiştir. Ayrıca oluşan bu pop-in olayları Cu-%20Ni alaşımında girinti ucun girinti bölgesinde elastik davranıştan plastik deformasyona geçişin başlangıcı olduğu gözlemlenmiştir(Morris ve ark., 2011). Şekil 4.71’de görülen yük-yer değiştirme eğrisinde gözlemlenen pop-out olayında ani bir malzeme genişlemesinin olduğu gözlemlenmiştir(Juliano ve ark., 2004). İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Bu olay dislokasyon hareketinin (veya yeni başlayan plastisitenin) başlangıcı olduğu da söylenebilir. Girinti yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. En büyük pop-in olayı 4000 μN ile 8000 μN kuvvetleri arasında olduğu görülmüştür. Şekil 4.71’de Cu-%20Ni alaşımında girinti yükün boşalması sırasında 5000 μN ile 8000 μN yük aralığında pop-out olaylarının olduğu gözlemlenmiştir. Bu da ilk olarak bu yükte malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükünün 5000 μN ’dan 0 μN değer aralığında girinti yükünün tamamen boşalmasına yakın bir değerde pop-out olaylarının oluşmadığı gözlemlenmiştir. Fakat girinti yükü tamamen boşaldıktan sonra Cu-%20Ni

alaşımında pop-out olayının olduğu görülmüştür. Bu olay, moleküler dinamik simülasyon deneylerinde indentasyon deneylerinde yük tamamen boşaldığında görünen "pop-out" olayları, malzemenin atomik yapısının ve mekanik davranışının özelliklerini yansıtmaktadır. Bu olaylar, malzemenin yüzey enerjileri, atomik düzenlemeleri ve tane sınırı enerjileri gibi faktörlere bağlı olarak gerçekleşebilir. İndentasyon deneyi sırasında uygulanan yük, yüzey geometrisi ve moleküler dinamik simülasyonların sınırları, bu pop-out olaylarının ortaya çıkmasını etkileyebilmektedir.

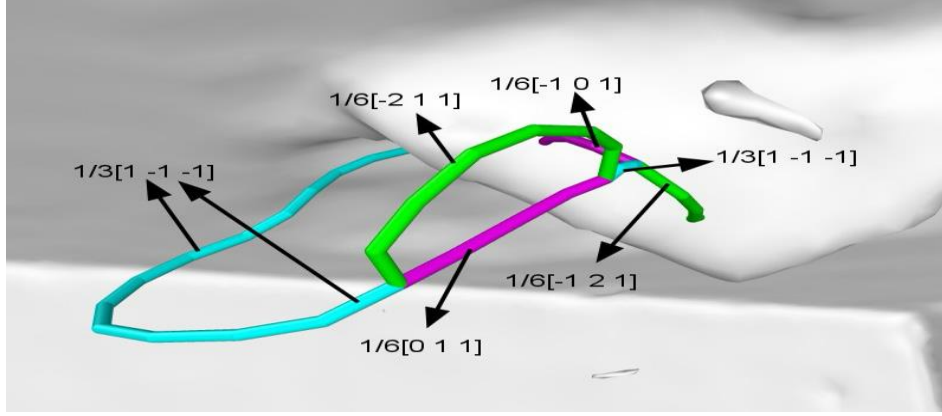


Şekil 4.72. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımin yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.72'in analizinde, 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Cu-%20Ni alaşıminin yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. Berkovich uç ile gerçekleştirilen deneyde indent uç etrafında indentasyon süresince yığılmaların olduğu ve deney sonunda girinti iz etrafında plastik Şekil değişikliği sonucu oluşan yığılmalar gözlemlenmiştir. Cu-%20Ni alaşım malzeme yüzeyinde maksimum 10000,63 μN girinti yüküne kadar yapılan indentasyon deneyi sonucu indent bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği meydana geldiği görülmektedir. Şekil 4.73'de indentasyon sonucu Berkovich ucun oluşturduğu iz görüntüsü ve plastik bölge gösterilmiştir.



Şekil 4.73. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımin iç yapısı ve girinti iz görüntüsü



Şekil 4.74. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar

Şekil 4.73 ve Şekil 4.74'te 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Cu-%20Ni alaşımın Berkovich tip indenter ile yapılan indentasyon deneyinde oluşan dislokasyonların fiziksel detayları için Hertz teorisi kullanılmıştır. Şekil 4.74'te indentasyon sonucu girinti bölgesinde dislokasyonların oluşumunun yoğun olduğu gözlemlenmiştir. MD simülasyon sonucu ağırlıkça %20 nikel içeren Cu-%20Ni alaşımın iç yapısında Çizelge 4.23'te görüldüğü üzere Shockley ve Stair-rod ve Perfect tip dislokasyonların oluştuğu gözlemlenmiştir. Cu-%20Ni alaşımında oluşan bu dislokasyonların plastik bölgede yoğunlaştığı görülmüştür.

Çizelge 4.22. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
$1/6[2 -1 -1]$	$1/3[1 -1 -1]$	$1/6[0 -1 -1]$	-	-
$1/6[-1 2 1]$		$1/6[-1 0 1]$		

Çizelge 4.24'te moleküller dinamik simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyon çeşitleri ve burgers vektörlerinin yönelimleri ve kristal yapılar gösterilmiştir.

Çizelge 4.23. MD simülasyon sonucu Cu-%20Ni alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar

Burger vektörü	Uzamsal burger vektörü	Uzunluk	Küme	Kristal yapı
$1/6[0 -1 -1]$	0.0002 -0.6007 -0.6085	194.347	1	FCC
$1/6[2 -1 -1]$	1.2007 -0.6002 -0.6079	309.843	1	FCC
$1/6[-1 2 1]$	-0.6004 1.2009 0.6078	250.976	1	FCC
$1/6[-1 0 1]$	-0.6006 0.0000 0.6085	190.434	1	FCC
$1/3[1 -1 -1]$	1.2009 -1.2009 -1.2163	596.649	1	FCC

Moleküller dinamik simülasyon sonucu elde edilen veriler ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik ve elastisite modül değerleri analiz edilmiştir. Çizelge 4.25'te gösterilen indentasyon deneyi sonucu elde edilen veriler ile hesaplanan malzemenin sertlik, indirgenmiş elastisite modülü ve elastisite modül (Oliver ve Pharr,1992;Curtin ve Miller,2003; Park ve Liu,2004) değerleri Çizelge 4.26'da gösterilmiştir.

Çizelge 4.24. Cu-%20Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

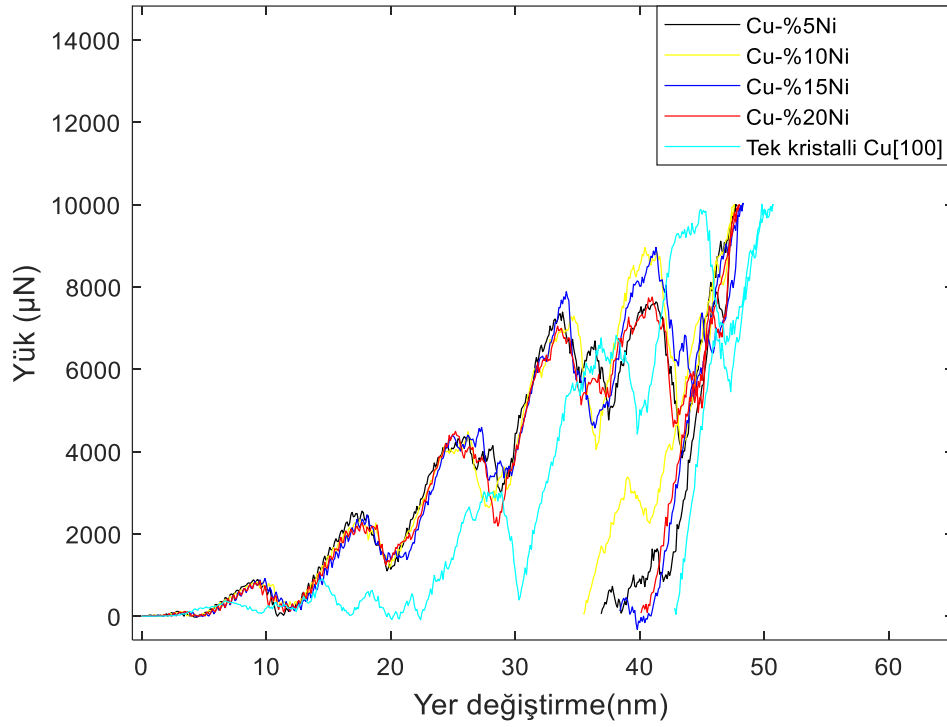
Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Cu-%20Ni	10000,63	48	47,5	16950,22

Çizelge 4.25. Cu-%20Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m(GPa)$	$H(GPa)$
Cu-%20Ni	178	186,34	0.59

4.5.1.6. Tek kristalli Cu [100] ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması

Moleküler dinamik simülasyonu kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyleriyle, [100] kristalografik yönetime sahip saf tek kristalli Cu[100] metali ile Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının mekanik özellikleri karşılaştırılmıştır. Bu simülasyon, her bir alaşımların mekanik davranışlarını ve plastik deformasyon mekanizmalarını atomistik düzeyde inceleme imkânı sunmuştur. Tek kristalli Cu[100] metalinin, diğer alaşımların mekanik performanslarını değerlendirmek için bir referans noktası olarak kullanılmıştır. Nikel katkısının artışıyla birlikte, sertlik ve elastisite modülündeki değişimler ile plastik deformasyonun karakteristik özellikleri karşılaştırmalı olarak analiz edilmiştir.



Şekil 4.75. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu yük-yer değiştirme grafiği

Tek kristalli Cu[100] metalinin ve Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşım simülasyon modelleri 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich tip indenter ile yapılan indentasyon deneyinde yük-yer değiştirme eğrileri Şekil 4.75'te gösterilmiştir. Yükleme aşamasında, matris atomları ile girinti atomu arasındaki itme kuvveti nedeniyle yükleme eğrisinin yük değeri pozitiftir. Girinti aşağı doğru hareket ettikçe, atomlar arasındaki itme kuvveti artar ve yük değeri kademeli olarak artmaktadır. Pop-in olayları tüm simülasyonlar sonucu yük yer değiştirme eğrilerinde benzer olaylar olduğu görülmüştür (Panda ve ark., 2021). Cu[100], Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımların Berkovich tip uç ile gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri sonucu girinti uç etrafında her 5 numune de yığılmaların ve penetrasyonların gerçekleştiği gözlemlenmiştir. Tek kristalli Cu[100] metali ve Cu-Ni alaşımlarda oluşan mekanik tepkinin malzemelerin iç mikroyapılarına ve ilgili uzunluk ölçeklerine (tane boyutu ve dislokasyon aralığı) bağlı olduğu söylenebilir (Huang ve Zhou, 2017). Şekil 4.75'te görüldüğü üzere yük boşaltma sırasında girintinin hareketi ile yük değeri kademeli olarak sıfıra düşer ve artık girinti derinliği tüm simülasyon numunelerinde 3×10^{-8} m'den büyük olduğu görülmüştür. Bu da malzemedeki indentasyon sırasında plastik deformasyonun oluştuğunu göstermektedir (Huang ve ark., 2021). Deneyler sonucu oluşturulan yük-yer değiştirme grafikleri ve elde edilen veriler ile sertlik ve elastisite

modül değerleri hesaplanmıştır (Goel ve ark., 2015; Gao ve ark.,2015). Şekil 4.90’da MD simülasyon sonucu oluşan yük-yer değiştirme grafiklerindeki ani yük düşme olaylarına(pop-in) neden olan temel mekanizma olarak girinti ucu altında dislokasyon çekirdeklenmesinin oluşumuna neden olduğu söylenebilir(Ukwatta ve Achuthan, 2014). Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile yapılan indentasyon deneyleri sonucu oluşan dislokasyonların Cu-Ni alaşımlarında nikel miktarı ile orantılı olmadığı görülmüştür. Simülasyonlar sonucu [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli bakır(Cu[100]), Cu-%5Ni,Cu-%10Ni,Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni simülasyon modellerinde dislokasyon sayı ve çeşidi olarak en fazla tek kristalli Cu[100] metalinde olduğu görülmüştür. Cu-%5Ni ve Cu-%10Ni alaşımlarında indentasyon deneyi sonucunda dislokasyonların oluşmadığı fakat malzeme yüzeyine uygulanan yükün artırılması ve azaltılması ile dislokasyonlar ve kayma bantları olduğu görülmüştür. İndentasyon sırasında oluşan dislokasyon ve kayma bantlarının plastik Şekil değiştirme ile bağlantılı olduğu söylenebilir. Cu-%15 ve Cu-%20Ni alaşımlarında indentasyon deneyinde dislokasyonların tane sınırlarından çekirdeklendiği, simülasyon süresinin artması ve indentasyon ucun girdiği derinliğin artmasıyla dislokasyonlar indentasyon çevresinde arttığı gözlemlenmiştir. Ayrıca bakır-nikel alaşımların içindeki nikel oranının artması ile düzlemsel kayma bantlarının deformasyonunun geciktiği ve sonrasında dalgalı kayma bantlarının olduğu görülmüştür. Çizelge 4.27’de MD simülasyon sonucu gerçekleştirilen indentasyon işlemi sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz değerleri verilmiştir.

Çizelge 4.26. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	P _{max} (μ N)	h _{max} (nm)	hc(nm)	A(nm ²)
Cu[100]	10000,46	50,7	50.2	2968.72
Cu-%5Ni	10001,49	47,8	47.1	18659.49
Cu-%10Ni	10002,58	47,6	47.8	17216,14
Cu-%15Ni	10030,46	48,3	47.7	17943,57
Cu-%20Ni	10000,63	48	47.5	16950,22

Çizelge 4.27’de indentasyon deneyi sonucu girinti iz derinliğinin en fazla tek kristalli Cu[100] metalinde olduğu görülmüştür. En az girinti iz derinliği de Cu-%10Ni alaşımında olduğu görülmüştür. Bu olay Cu-Ni alaşımı içerisindeki nikel miktarının artması ve Cu-Ni alaşımın sertliği ile orantılı olmadığı görülmüştür. Çizelge 4.28’de Cu-%10Ni alaşımın sertlik değerinin Cu-%5Ni ve Cu-%15Ni alaşımlarının sertlik

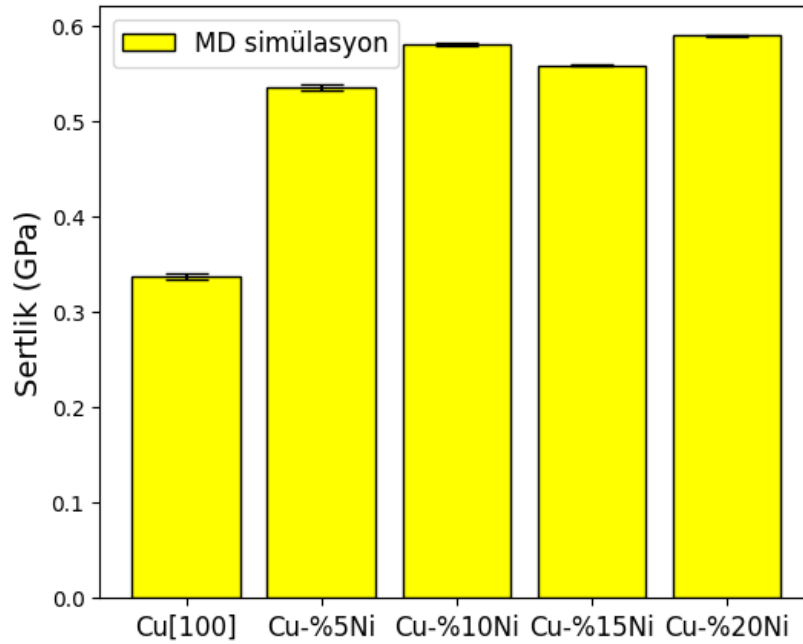
değerlerinden fazla olduğu hesaplanmıştır. Bu da girinti derinliğinin Cu-%5Ni ve Cu-%15Ni alaşımlara göre sertlik değeri ile girinti derinliği arasındaki ilişkiyi doğrulamaktadır. Ayrıca Cu-Ni alaşımında nikel miktarının artmasına rağmen sertlik değerlerindeki nikel miktarına göre orantılı değişmemesini dislokasyonların malzeme içinde plastik deformasyona neden olduğu için malzemelerde sertliği azaltabilmektedir. Fakat Cu-%20Ni alaşımındaki sertlik değerinin ve girinti değerinin Cu-%10Ni alaşıma göre daha yüksek olduğu ve nikel miktarının artmasına orantılı bir şekilde sertlik değerinin arttığı görülmüştür. Ayrıca Cu-Ni alaşımı içerisindeki nikel miktarının arttıkça, dislokasyonlar sonucu oluşan plastisite nedeniyle sertlik değerleri ve girinti iz derinliklerinin değişebildiği görülmüştür.

Çizelge 4.27. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri

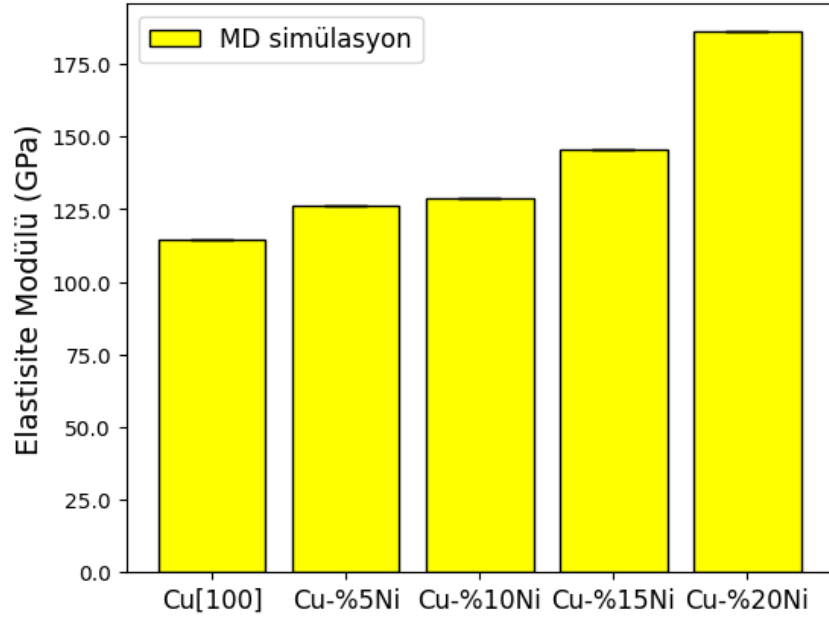
Malzeme	E_r (GPa)	E_m (GPa)	H(GPa)
Cu[100]	117	114,33	0,337
Cu-%5Ni	127	126,30	0,536
Cu-%10Ni	129	128,54	0,581
Cu-%15Ni	144	145,64	0,559
Cu-%20Ni	178	186,34	0,59

Şekil 4.90’da görülen Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan indentasyon eğrilerinde sertlik ve elastisite modülü ölçmek için kabul edilen iki teknik vardır: Hertz yaklaşımı (Hills ve ark., 2016) ve Oliver-Pharr yöntemi [Oliver ve Pharr, 2004; Oliver ve Pharr,1992]. Elastisite modülü hesaplamak için indentasyon eğrisinin başlangıçtaki elastik bölgesini kullanırken, ikincisi indirgenmiş elastisite modülü ve sertliği hesaplamak için boşaltma eğrisinin eğimini ve öngörülen temas alanı kullanılmaktadır. Oliver-Pharr, birçok girinti şekline uygulanabildiği için gerçek hayattaki nanoindentasyon deneylerini analiz etmek için tercih edilen yöntemdir. Hertz yöntemi, girinti derinliği küçük olduğunda küresel girintilerle simülasyonlar için yararlı olabilmektedir (Njeim ve Bahr, 2010). Ayrıca, bir kuvvet alanının öngörülen mekanik özellikleri uygulanan teste bağlı olduğundan, yükleme ve boşaltma adımları tarafından öngörülen elastik modül arasında mevcut olan tutarsızlıkları araştırmak önemlidir (Pratt ve ark., 2020). MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan yük-yerdeğiştirme grafik eğrilerinden sertlik değerleri, indirgenmiş elastisite modülleri ve elastisite modülleri hesaplamak için her iki yöntem de kullanılmış ve deneysel veriler karşılaştırılmıştır.

Elastisite modülü, bir malzemenin yük altında deformasyonu ve yükün kaldırılması sonucu orijinal şeklini yeniden kazanma yeteneğini tanımlamaktadır. Genellikle elastisite modülü arttıkça sertlik de artmaktadır. Ancak, bu ilişki malzemenin özelliklerine ve yapısına bağlı olarak değişebilmektedir (Goel ve ark, 2015; Gao ve ark., 2015). Çizelge 4.27’de MD simülasyon ile yapılan indentasyon deneyi sonucu hesaplanan elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri verilmiştir. Çizelge 4.28’de görüldüğü üzere moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile yapılan indentasyon deneyleri sonucu en düşük sertlik ve elastisite modül değerlerinin tek kristalli Cu[100] metalinde olduğu görülmüştür. Cu-Ni alaşım içerisindeki nikel miktarının artmasına bağlı olarak sertlik (H) ve elastisite modül(E_m)değerlerinin arttığı görülmüştür. Şekil 4.76’da görüldüğü üzere indentasyon sonucu oluşan dislokasyonları %15 nikel içeren Cu-%15Ni alaşımın sertlik değerinin %10 nikel içeren Cu-%10Ni alaşımın sertlik değerinden daha düşük olmasını indentasyon deneyi sırasında oluşan dislokasyonların girinti bölgesinde oluşturduğu plastisiteden dolayı olduğu gözlemlenmiştir.



Şekil 4.76. Tek kristalli Cu [100] metali ve Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu sertlik değerleri



Şekil 4.77. Tek kristalli Cu [100] metali, Cu-Ni alaşımlarının MD simülasyon sonucu elastisite modül değerleri

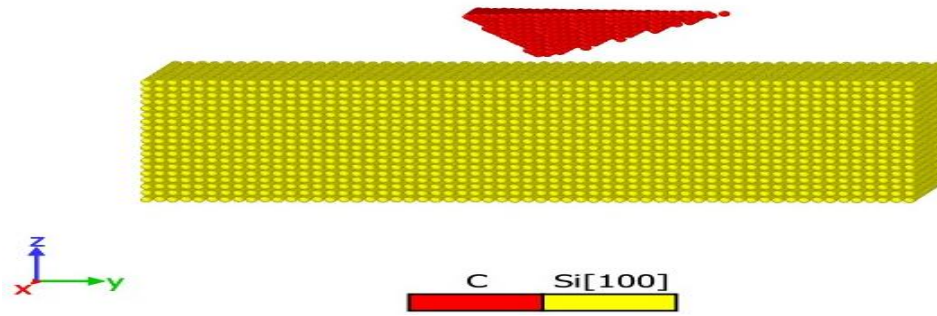
Şekil 4.77’de moleküller dinamik simülasyon ile yapılan indentasyon deneylerinde elastisite modül değerlerin nikel miktarının artmasına bağlı olarak artış göstermiştir. Şekil 4.76’da ki grafikte görüldüğü üzere %15 nikel içeren Cu-%15Ni alaşımının indentasyon sonucu oluşan sertlik değerindeki azalması ile birlikte elastisite modülünde azalmanın oluşmadığı görülmüştür.

4.5.2. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların MD simülasyon deney sonuçları ve analizi

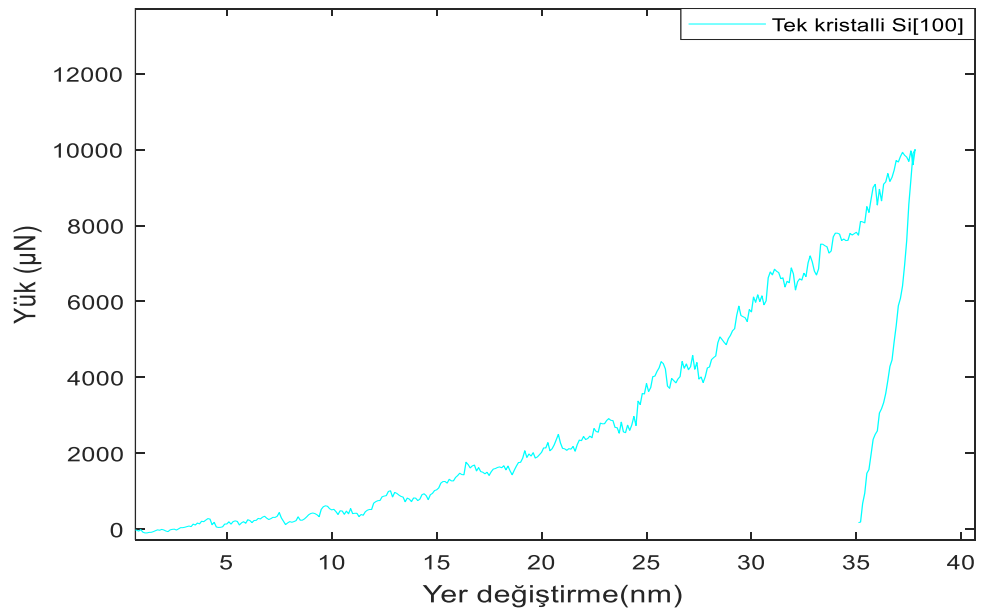
Nano ölçekte malzeme davranışlarını anlamak, özellikle nanoindentasyon yöntemleri ile, malzeme mühendisliği ve nanoteknoloji alanlarında kritik öneme sahiptir. Silisyumun, endüstriyel uygulamalarda geniş bir kullanım alanına sahip olan önemli bir yarı iletken malzemedir. Ancak, alaşımların mekanik özellikleri üzerindeki etkileri, özellikle Al-Si alaşımları gibi karmaşık sistemlerde, detaylı bir incelemeyi gerektirir. Tek kristalli Si[100] elementi, Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarının indentasyon deneyleri sonucu elde edilen mekanik özellikler karşılaştırılıp analiz edilmiştir.

4.5.2.1. Tek kristalli Si[100] için MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.78’de Tek kristalli Si[100] elementin simülasyon modelinde girinti ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adımdır. İndentasyon deneyi için toplam 1170000(fs) adım olarak ayarlanmıştır. MD simülasyonda Si-Si etkileşimi için hibrid GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli ve Si-C etkileşimi için Morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Deney sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Deney sonucu, simülasyon modelleri için bilimsel bir veri görselleştirme ve analiz yazılımı olan, OVITO’da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

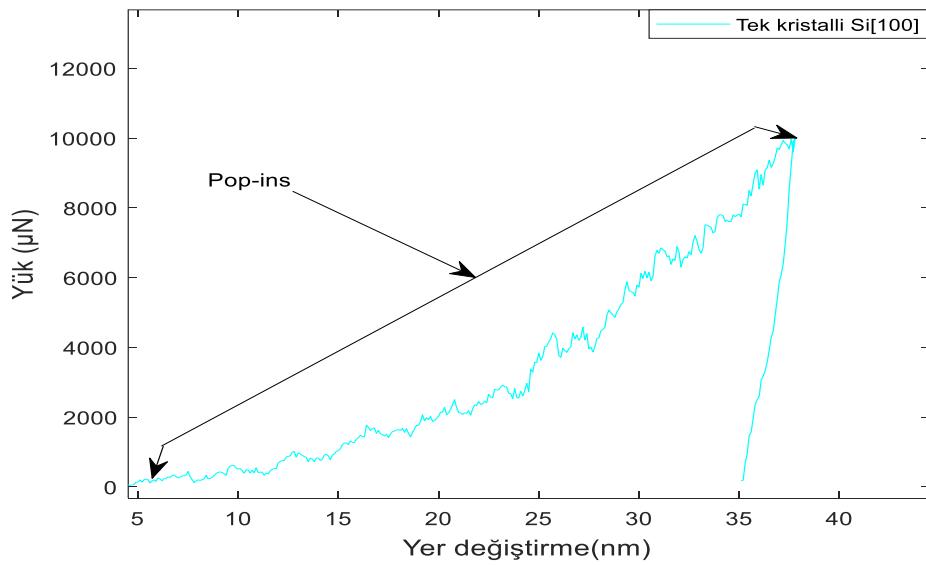


Şekil 4.78. Tek kristalli Si [100] için oluşturulan simülasyon modeli



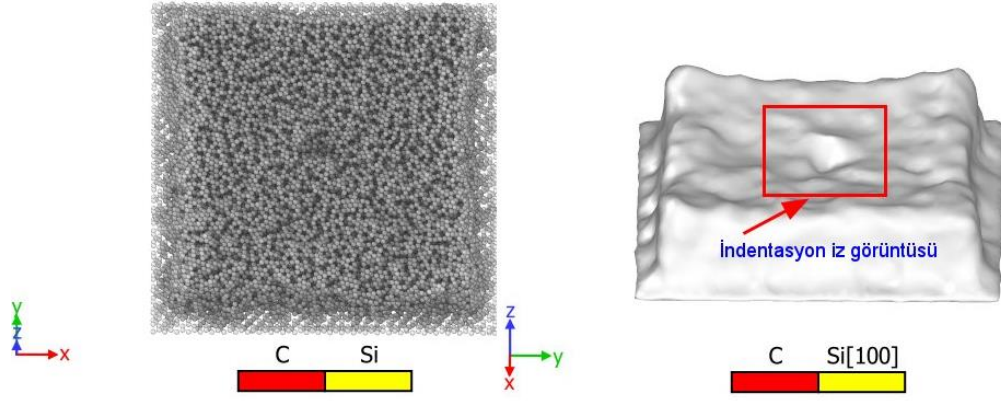
Şekil 4.79. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyonu sonucu elde edilen yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.79'da [100] kristalografik yönelimli tek kristali silisyum elementin moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyinde yükünü 10002,40 μN ' a kadar çıkartılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, Verlet algoritması (Verlet, 1967) ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.80'de yük boşaltma aşamasında girintinin yük değeri aşamalı olarak sıfıra indirilmiştir. Fakat grafikte görüldüğü üzere girinti yükü tamamen boşalmasına rağmen tek kristalli Si[100] elementinde bazı pop-out olaylarının olduğu Şekil 4.80'de görülmektedir.



Şekil 4.80. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

Şekil 4.80'de Tek kristalli Si[100] elementin malzeme yüzeyinde indentasyon süresince uygulanan kuvvet yavaşça artırılmıştır. Girinti derinliği arttıkça oluşan dislokasyon (Kristal yapıdaki atomların yer değiştirmesi) veya plastik deformasyon olaylarının başlamasından dolayı bazı noktalarda ani bir kuvvet artışı gözlemlenmiştir. Pop-in olarak adlandırılan bu olay tek kristali Si[100] elementinde girinti yükü 10002,40 μN ' a kadar çok sayıda pop-in olayının olduğu görülmüştür. Bu da ilk olarak bu yükte malzeme genişlemesinin olduğu söylenebilir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükünün tamamen boşalmasında pop-out olaylarının oluşmadığı gözlemlenmiştir.



Şekil 4.81. MD simülasyonu sonucu tek kristalli Si [100] yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.81’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun tek kristalli Si[100] elementin yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. İndentasyon deneyi boyunca tek kristalli Si[100] elementin iç yapısında dislokasyonların oluşmadığı gözlemlenmiştir(Goel ve ark., 2015). Bu da tek kristalli Si [100] elementinde oluşan pop-in ve pop out olaylarının dislokasyon oluşumundan bağımsız bir Şekilde olduğunu göstermektedir. Deney sonucu elde edilen veriler ile oluşturulan yük-yer değiştirme grafiğinde malzemelerin mekanik özellikleri olan sertlik ve elastisite modül değerleri analiz edilmiştir. İndentasyon deneyi sonucu Çizelge 4.29’da gösterilen veriler kullanılarak Çizelge 4.30’da gösterilen sertlik (Oliver ve Pharr, 2004) ve elastisite modülü(Oliver ve Pharr,1992;Curtin ve Miller,2003; Park ve Liu,2004) değerleri hesaplanmıştır.

Çizelge 4.28. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

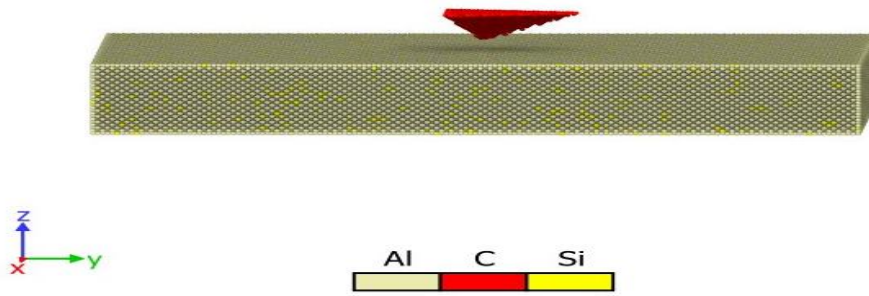
Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Si[100]	10002,40	37,8	37,2	17893,38

Çizelge 4.29. Tek kristalli Si [100] için MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

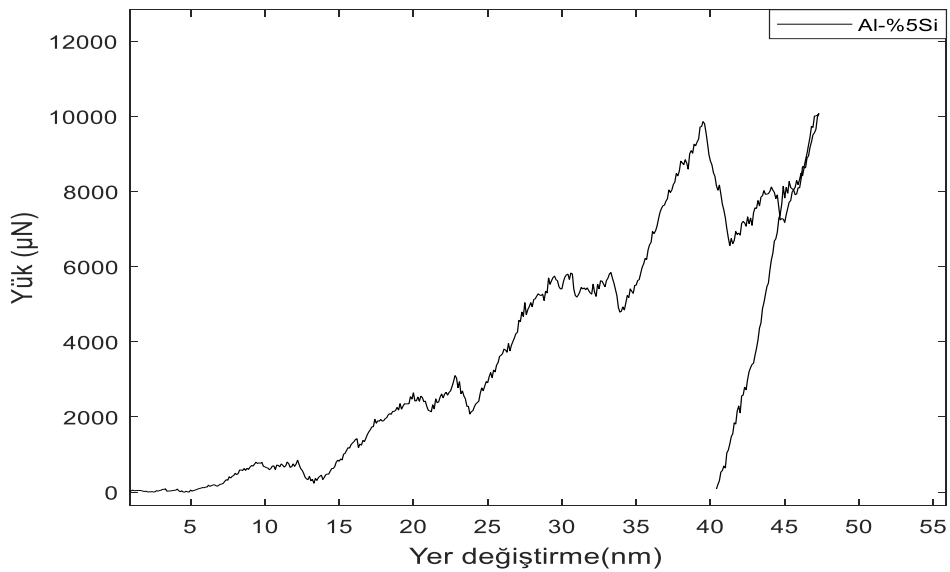
Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m (GPa)$	$H(GPa)$
Si[100]	144	145,64	0.559

4.5.2.2. Al-%5Si alařımının MD Simölasyon deney sonuçları ve analizi

řekil 4.82’de gösterilen Al-%5Si alařımının simölasyon modelinde indenter ucun teması öncesi toplam gevřeme süresi 20000 (fs) adımdır. Molekölleler dinamik simölasyonda GAM (Gömölü atom methodu) potansiyeli ve morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıřtır. Deney sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerekleřtirilmiřtir. Deney sonucu malzeme yüzeyinde oluřan deformasyonlar ve dislokasyonlar simölasyon modelleri için bilimsel bir veri görselleřtirme ve analiz yazılımı olan OVITO’da (Stukowski, 2009) görselleřtirilmiřtir. Ağırlıka %5 silisyum ieren alüminyum-silisyum alařımının molekölleler dinamik simölasyon ile gerekleřtirilen indentasyon deneyi sonuçlarına dayalı olarak oluřturulan yük-yer deęiřtirme grafięi řekil 4.83’te gösterilmiřtir.

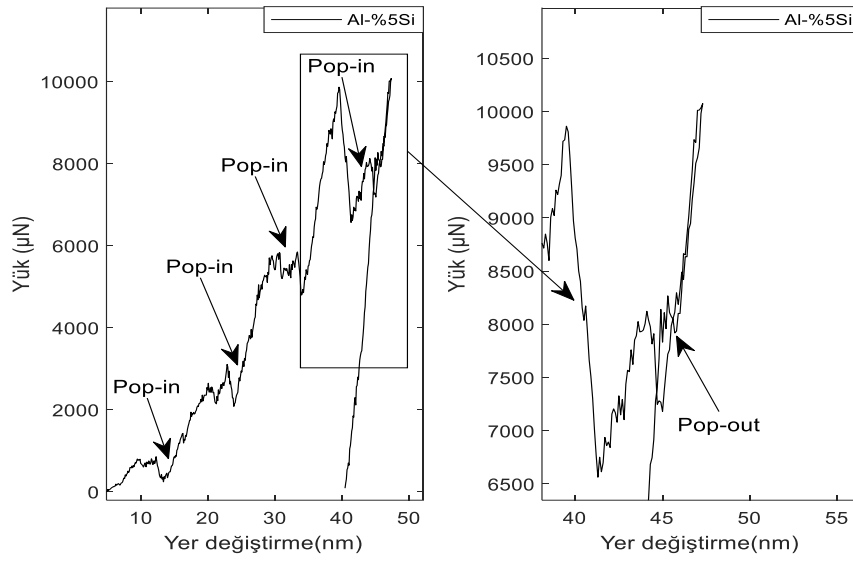


řekil 4.82. Al-%5Si alařımının simölasyon modeli



řekil 4.83. Al-%5Si alařımının MD simölasyon sonucu yük-yer deęiřtirme grafięi

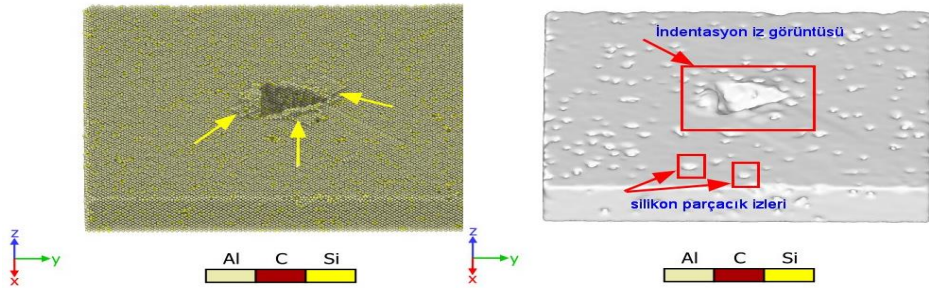
İndentasyon deneyinde girinti yükü 10073,66 μN 'a çıkarılarak indention deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.83'te görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indention sonucu girinti derinliğinin izi 40 nm'den fazla olduğu gözlemlenmiştir. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun meydana geldiğini göstermektedir. Şekil 4.85'te indention sonucu Al-%5Si alaşım yüzeyinde oluşan plastik deformasyon görülmektedir.



Şekil 4.84. Al-%5Si alaşımın MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

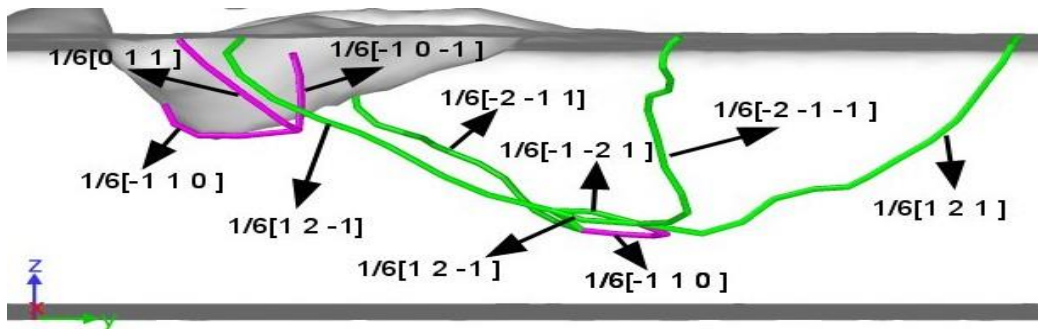
Şekil 4.84'te Al-%5Si alaşımın indention deneyinde girinti ucun malzeme yüzeyine uyguladığı kuvvet belirli bir oranda artırılmıştır. Fakat bazı noktalarda ani bir kuvvet artışı gözlemlenmiştir. Bu artış, girintinin daha fazla derinleşmesi sırasında meydana gelen bir dislokasyon (Kristal yapıdaki atomların yer değiştirmesi) veya diğer plastik deformasyon olaylarının başladığını göstermektedir. Oluşan bu pop-in olayları Al-%5Si alaşımında elastik davranıştan plastik deformasyona geçişin başlangıcı olduğunu göstermektedir (Morris ve ark., 2011). İlk pop-in olayı 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Bu olay dislokasyon hareketinin (veya yeni başlayan plastisitenin) başlangıcı olduğunu göstermiştir. Girinti yükün artması ile birlikte pop-in sayısının ve ani gerinim patlamasının şiddetinin arttığı görülmektedir. En büyük pop-in olayı 6000 μN ile 10000 μN kuvvetleri arasında olduğu görülmüştür. Şekil 4.84'te Al-%5Si alaşımında girinti yükün boşaltması sırasında 7500 μN ve 8500 μN yük aralığında ilk

pop-out olayının olduğu gözlemlenmiştir. Bu da ilk olarak bu yükte malzemede genişlemenin olduğu görülmektedir (Sidiropoulos ve ark., 2017). Girinti yükünün tamamen boşalmasına kadar pop-out olaylarının oluşmadığı gözlemlenmiştir. Fakat girinti yükü tamamen boşaldıktan sonra Al-%5Si alaşımında pop-out olayının olduğu görülmüştür. Bu olay, moleküler dinamik simülasyonlarda indentasyon deneylerinde yük tamamen boşaldığında görünen pop-out olayları, malzemenin atomik yapısının ve mekanik davranışının karakteristik özelliklerini yansıtmaktadır. Bu olaylar, malzemenin yüzey enerjileri, atomik düzenlemeleri ve tane sınırı enerjileri gibi faktörlere bağlı olarak gerçekleşebilmektedir. İndentasyon deneyi sırasında uygulanan yük, yüzey geometrisi ve moleküler dinamik simülasyonların sınırları, bu pop-out olaylarının ortaya çıkmasını etkileyebilmektedir.



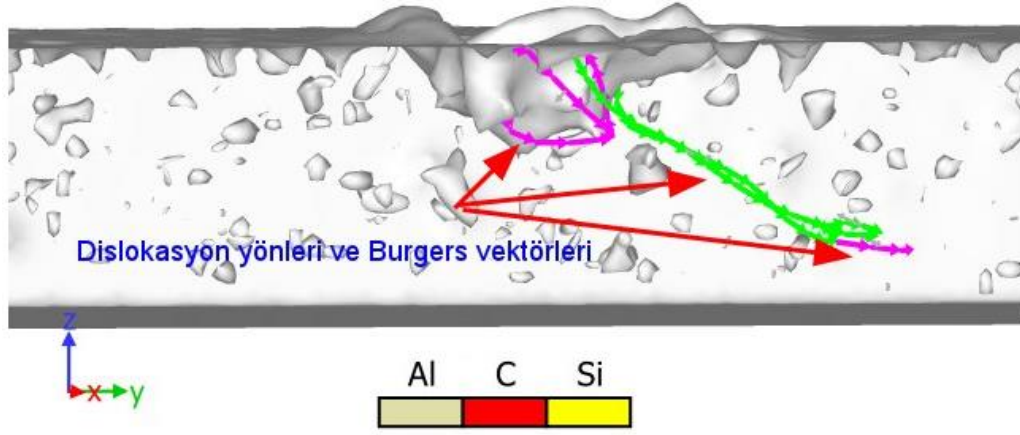
Şekil 4.85. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşım yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.85'te Berkovich girinti ucun Al-%5Si alaşımın yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü gösterilmiştir. Berkovich uç ile gerçekleştirilen deneyde girinti uç etrafında indentasyon süresince yığılmaların olduğu ve deney sonunda girinti iz etrafında plastik Şekil değişikliği sonucu oluşan yığılmalar gözlemlenmiştir. Şekil 4.86'da indentasyon sonucu dislokasyonlar, iz görüntüsü ve plastik bölge gösterilmiştir.



Şekil 4.86. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşımın iç yapısı ve dislokasyonlar

Şekil 4.86 ve Şekil 4.87’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich tip girinti uç ile gerçekleştirilen indentasyon deneyinde %5 silisyum içeren alüminyum-silisyum (Al-%5Si) alaşımında uç etrafında yığılmaların ve penetrasyonların gerçekleştiği gözlemlenmiştir. Ayrıca dislokasyonların tane sınırlarından çekirdeklendiği, simülasyon süresinin artmasıyla ve indentasyon ucun girdiği derinliğin artmasıyla Shockley ve Stair-rod, dislokasyonların indentasyon çevresinde geliştiği gözlemlenmiştir. Bu davranış, düzlemsel kayma bantlarının deformasyonun erken aşamalarında oluştuğunu ve daha sonra deformasyon mekanizmasını dalgalı kayma bantlarının izlediğini göstermektedir.



Şekil 4.87. Al-%5Si malzemesinin dislokasyon yönleri ve Burgers vektörleri

Çizelge 4.30. Al-%5Si alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve Burgers vektörlerinin yönelimleri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
				
$1/6[-1 -2 1]$	-	$1/6[-1 1 0]$	-	-
$1/6[-2 -1 1]$		$1/6[-1 0 -1]$		
$1/6[-2 -1 -1]$		$1/6[0 -1 -1]$		
$1/6[1 2 -1]$		$1/6[-1 1 0]$		
$1/6[-1 -2 1]$				
$1/6[1 2 1]$				

Çizelge 4.32’de moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak 1170000(fs) simülasyon adım ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu %5Si silisyum ilaveli alüminyum-silisyum(Al-%5Si) alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar gösterilmiştir.

Çizelge 4.31. MD simülasyon sonucu Al-%5Si alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar

Burger vektörü		Uzamsal burger vektörü			Uzunluk	Küme	Kristal yapı
	1/6[-1 1 0]	-0.6798	0.6901	0.0036	227.495	16	FCC
	1/6[-1 -2 1]	-0.6708	-1.3432	0.6808	724.676	1	FCC
	1/6[-2 -1 1]	-1.3426	-0.6714	0.6810	700.863	1	FCC
	1/6[-1 0 -1]	-0.6717	0.0004	-0.6810	201.479	1	FCC
	1/6[-2 -1 -1]	-1.3429	-0.6710	-0.6811	611.873	1	FCC
	1/6[1 2 -1]	0.6708	1.3432	-0.6808	580.234	1	FCC
	1/6[0 -1 -1]	0.0237	-0.6553	-0.7049	259.187	16	FCC
	1/6[1 2 -1]	0.6708	1.3432	-0.6808	133.308	1	FCC
	1/6[-1 -2 1]	-0.6708	-1.3432	0.6808	135.855	1	FCC
	1/6[1 2 1]	0.6711	1.3428	0.6813	692.845	1	FCC
	1/6[-1 1 0]	-0.6718	0.6718	0.0002	206.551	1	FCC

Çizelge 4.32 ve Çizelge 4.33'te moleküller dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak 1170000(fs) simülasyon adım ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu %5Si silisyum ilaveli alüminyum-silisyum(Al-%5Si) alaşım yüzeyinde girinti ucun uygulandığı kuvvet, derinlik, girinti iz verileri, indirgenmiş elastisite modülü, elastisite modülü ve sertlik değerleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.32. Al-%5Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	P _{max} (μN)	h _{max} (nm)	h _c (nm)	A(nm ²)
Al-%5Si	10073,66	47,3	46,6	42149,20

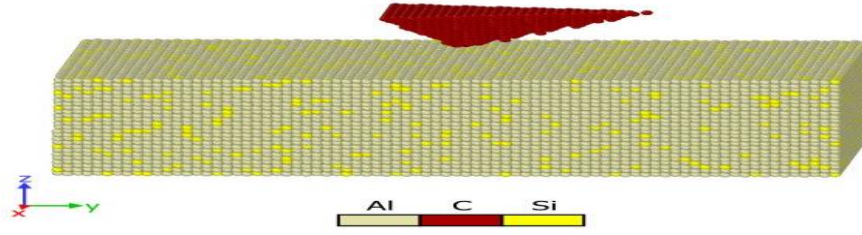
Çizelge 4.33. Al-%5Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	E _r (GPa)	E _m (GPa)	H(Gpa)
Al-%5Si	50,2	48,08	0.239

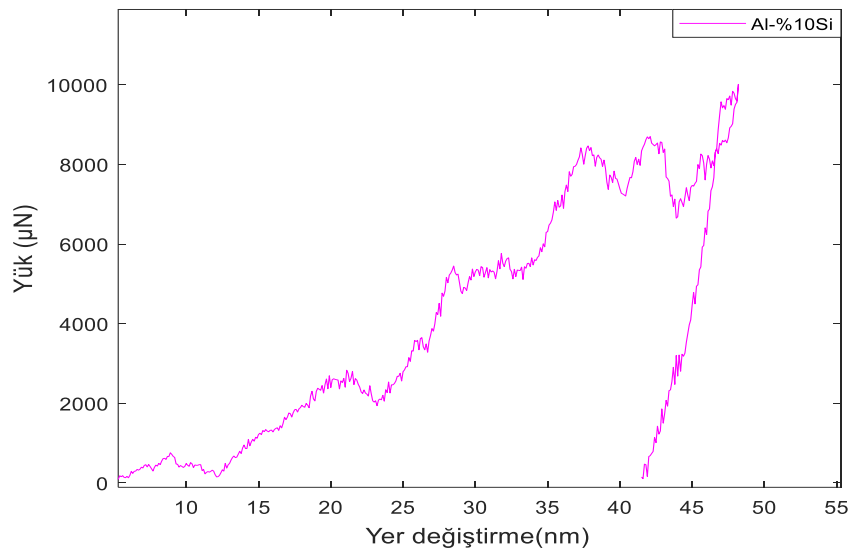
4.5.3. Al-%10Si alaşımın MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.88'de gösterilen Al-%10Si alaşımın simülasyon model ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adım olarak ayarlanmıştır. MD simülasyon deneylerinde GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli ve morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Deney sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Ayrıca deney sonucu malzeme yüzeyinde oluşan deformasyonlar ve dislokasyonlar hesaplamalı malzeme bilimi, fizik ve kimya disiplinlerinde yaygın olarak kullanılan moleküler ve

parçacık tabanlı simülasyon modelleri için veri görselleştirme ve analiz yazılımı olan OVITO'da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

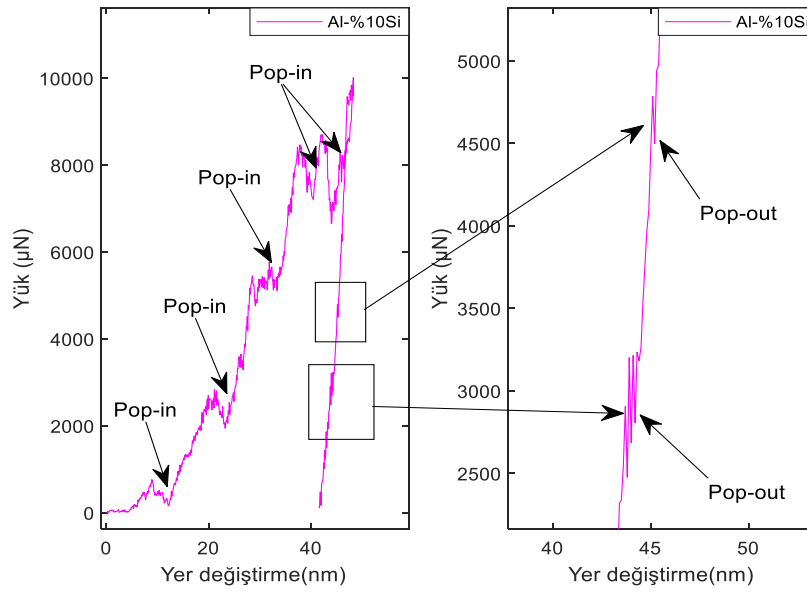


Şekil 4.88. Al-%10Si alaşımın simülasyon modeli



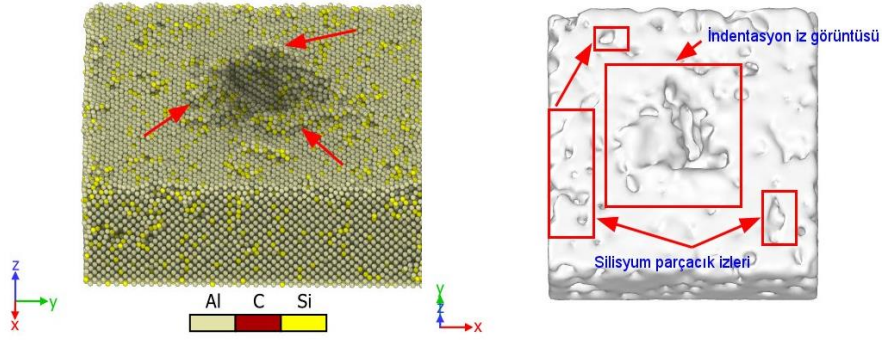
Şekil 4.89. Al-%10Si alaşımı için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği

Şekil 4.89’de ağırlıkça %10 silisyum içeren alüminyum-silisyum alaşımının moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucunda yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyin de girinti yükü 10002,27 μN ’a çıkartılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için 1 femtosecond (fs) zaman adımı kullanılan hız Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300 K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.89’da görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin izi 40 nm’den büyük olduğu gözlemlenmiştir. Bu da alaşım yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun oluştuğu görülmüştür.



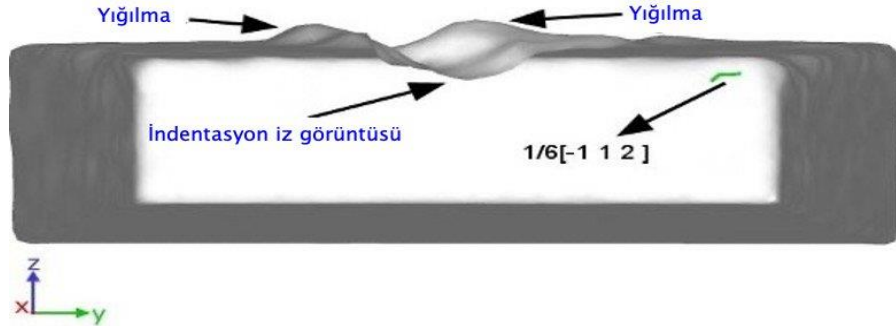
Şekil 4.90. Al-%10Si alařımın MD simülasyon sonucu a) pop-in olayları b) pop-out olayları

Şekil 4.90’da Al-%10Si alařımın indentasyon deneyinde girinti ucun malzeme yüzeyine uyguladıęı kuvvet belirli bir oranda artırılmıřtır. Ancak, bazı noktalarda ani bir kuvvet artıřı gözlemlenmiřtir. Bu artıř, girintinin daha fazla derinleřmesi sırasında meydana gelen bir dislokasyonların (Kristal yapıdaki atomların yer deęiřtirmesi) veya dięer plastik deformasyon olaylarının bařladıęını göstermektedir. Oluřan bu pop-in olayları Al-%10Si alařımda girinti uc bölgesinde elastik davranıřtan plastik deformasyona geçiřin bařlangıcı olduęunu göstermektedir (Morris ve ark., 2011). İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduęu görölmektedir. Bu olay dislokasyon hareketinin (veya yeni bařlayan plastisitenin) bařlangıcı olduęu da söylenebilir. Girinti yükün artması ile birlikte pop-in sayısının arttıęı görölmüřtür. En büyük pop-in olayı 6000 μN ile 10000 μN kuvvetleri arasında olduęu görölmüřtür. Şekil 4.90 ’da Al-%10Si alařımda girinti yükün boşalması sırasında ilk pop-out olayı 6400 μN ve 6200 μN yük aralıęında olduęu gözlemlenmiřtir. Bu da malzeme geniřlemesinin hala devam ettięini göstermektedir. Ayrıca girinti yükü tamamen boşaldıktan sonra Al-%10Si alařımda birkaç pop-out olayının olduęu görölmüřtür. Bu olay, malzemenin yüzey enerjileri, atomik düzenlemeleri ve tane sınırı enerjileri gibi faktörlere baęlı olarak gerçekleşebilmektedir. Şekil 4.91’de indentasyon sonucu Al-%10Si alařım yüzeyinde oluřan plastik deformasyon görölmektedir.



Şekil 4.91. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımın yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.91’de incelendiğinde, 1170000(fs) simülasyon adımı sonunda Berkovich girinti ucunun Al-%10Si alaşımının yüzeyinde oluşturduğu deformasyonlar ve iz görüntüsü görülmektedir. Berkovich uç ile gerçekleştirilen deneyde indent uç etrafında indentasyon süresince yığılmaların ve penetrasyonların olduğu ve deney sonunda girinti iz etrafında plastik Şekil değişikliği olduğu gözlemlenmiştir. Şekil 4.92’de indentasyon sonucu Berkovich ucun oluşturduğu iz görüntüsü ve plastik bölge gösterilmiştir.



Şekil 4.92. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımın iç yapısı ve dislokasyonlar

Şekil 4.92’de Ağırlıkça %10 silisyum içeren Al-%10Si alaşımın iç yapısında indentasyon sonucu Shockley dislokasyonların olduğu gözlemlenmiştir. Al-%10Si alaşımında oluşan bu dislokasyonların plastik bölgeye yakın bir bölgede oluşmadığı görülmüştür.. Ayrıca, Çizelge 4.35 ve Çizelge 4.36’da indentasyon deneyleri sonucu oluşan dislokasyonlar ve bunların uzamsal burgers vektörleri, uzunlukları, kümeleme eğilimleri ve kristal yapıları gösterilmiştir.

Çizelge 4.34. MD simülasyon sonucu Al-%10Si alaşımında oluşan dislokasyon türleri ve Burgers vektörlerinin yönelimleri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
				
$1/6[-1\ 1\ 2]$	-	-	-	-

Çizelge 4.35. MD simülasyon sonucu Al-%15Si alaşımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar

Burger vektörü	Uzamsal burger vektörü	Uzunluk	Küme	Kristal yapı
	$1/6[-1\ 1\ 2]$	-0.6736 0.6713 1.3550	8.238	1
				FCC

Çizelge 4.37 ve Çizelge 4.38’de MD simülasyon yöntemi kullanılarak 1170000(fs) simülasyon adım ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu Al-%10Si alaşımın yüzeyinde girinti ucun uygulandığı kuvvet, derinlik, girinti iz verileri, indirgenmiş elastisite modülü, elastisite modülü ve sertlik değerleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.36. Al-%10Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

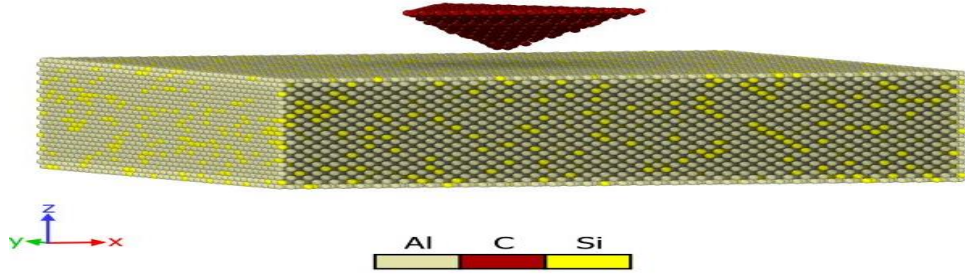
Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Al-%10Si	10010,32	48,2	47,9	62957,98

Çizelge 4.37. Al-%10Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m(GPa)$	$H(GPa)$
Al-%10Si	75,8	74,86	0.159

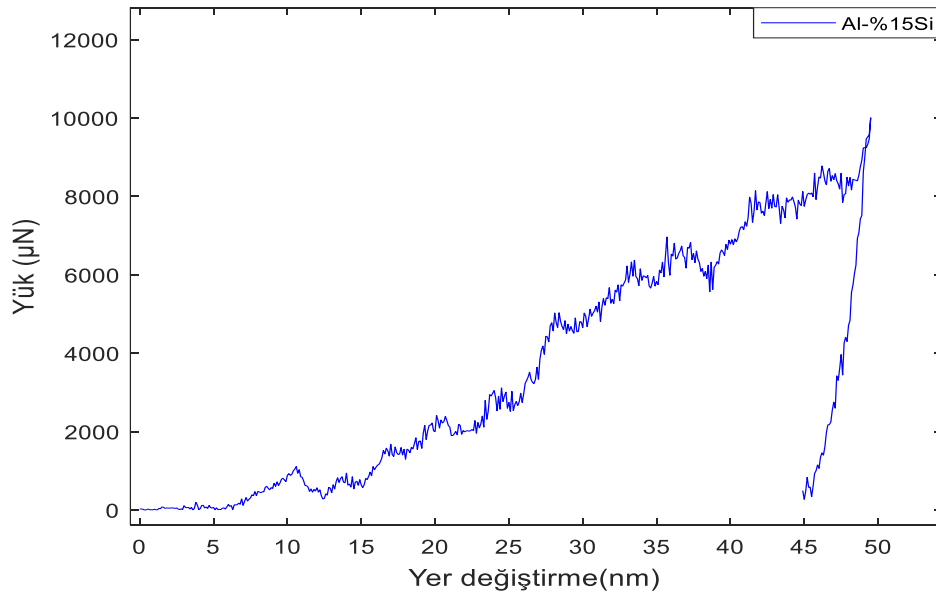
4.5.3.1. Al-%15Si alaşımın MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.93’te gösterilen Al-%15Si alaşımın simülasyon model ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde indenter ucun teması öncesi toplam gevşeme süresi 20000 (fs) adım olarak ayarlanmıştır. Moleküller dinamik simülasyonda GAM (Gömülü atom methodu) potansiyeli ve morse potansiyeli (Zhang ve ark., 2009) kullanılmıştır. Deney sonucu elde edilen veriler ile malzemenin karakterizasyonu ve analizleri gerçekleştirilmiştir. Deney sonuçları, veri görselleştirme ve analiz yazılımı olan OVITO’da (Stukowski, 2009) görselleştirilmiştir.

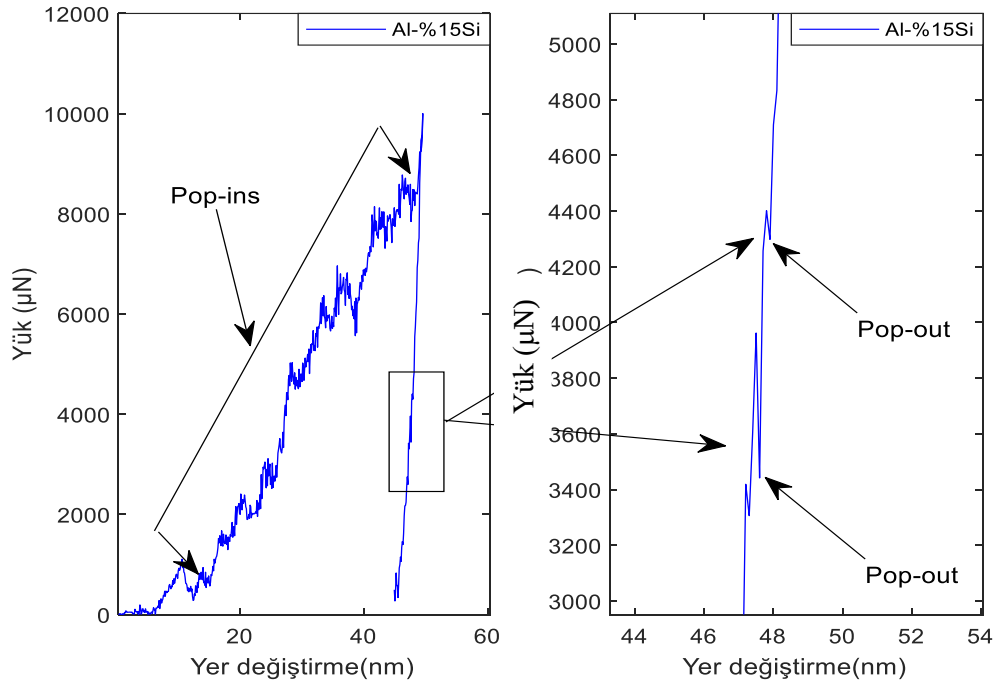


Şekil 4.93. Al-%15Si alaşımanın simülasyon modeli

Şekil 4.94 'te grafikte %15 silisyum içeren alüminyum-silisyum alaşımasının moleküler dinamik simülasyon yöntemi kullanılarak gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucunda yük-yer değiştirme grafiği oluşturulmuştur. İndentasyon deneyin de girinti yükü 10002,27 μN 'a çıkartılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. Deney, newton'un hareket denklemlerinin zaman entegrasyonunu yapmak için femtosecond (fs) zaman adımı kullanılmıştır. Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs) adımda ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.106'da görüldüğü üzere, yük boşaltma aşamasında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin 40 nm'den büyük olduğu gözlemlenmiştir. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun oluştuğunu göstermektedir



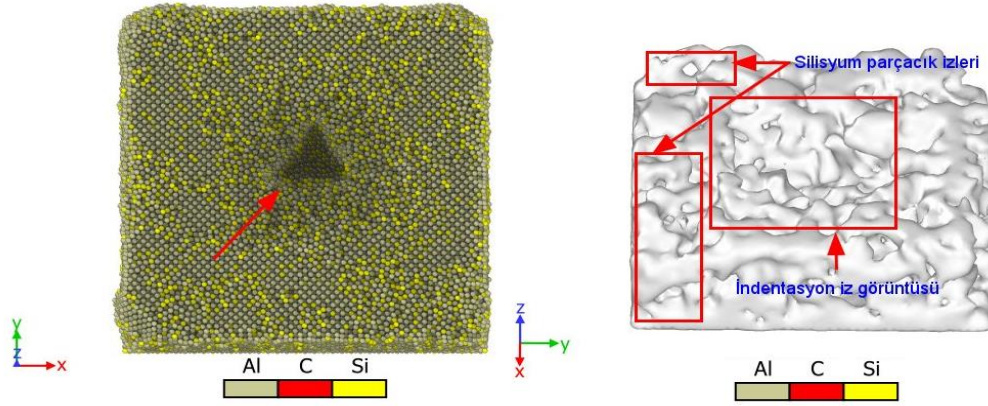
Şekil 4.94. Al-%15Si alaşımı için MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği



Şekil 4.95. Al-%15Si alaşımanın MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

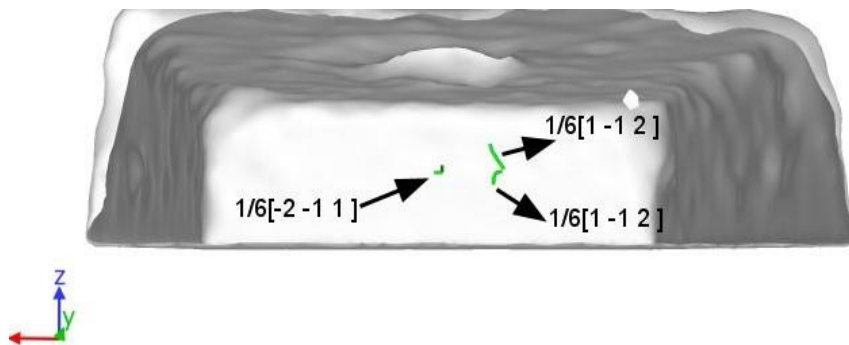
Şekil 4.95'te Al-%15Si alaşımanın indentasyon deneyinde girinti ucun malzeme yüzeyine 10000 μN 'a kuvvet uygulanmıştır. İndentasyon deneyinde Berkovich tip girinti ucu malzeme içinde z yönünde ilerlemesi ile malzeme içyapısında oluşturduğu dislokasyon (Kristal yapıdaki atomların yer değiştirmesi) veya diğer plastik deformasyon oluşturmuştur. İndentasyon sırasında malzemede oluşan ilk pop-in olayı girinti uç bölgesinde elastik davranıştan plastik deformasyona geçişin başlangıcı olduğunu göstermektedir (Morris ve ark., 2011). İlk pop-in olayı, 2000 μN girinti yükü öncesi olduğu görülmektedir. Girinti yükün artması ile birlikte pop-in sayısının arttığı görülmüştür. Şekil 4.95'te Al-%15Si alaşımında girinti yükün boşalması sırasında ilk pop-out olayı 4400 μN ve 4200 μN yük boşaltma aralığında olduğu gözlemlenmiştir. Girinti yükü boşalmaya devam ederken 4000 μN ve 3200 μN kuvvetleri arasında pop-out olaylarının olduğu görülmüştür. Bu da malzeme genişlemesinin hala devam ettiğini göstermektedir. Ayrıca girinti yükü tamamen boşaldıktan sonra Al-%15Si alaşımında oluşan pop-out olaylarının malzemenin yüzey enerjileri, atomik düzenlemeleri ve tane sınırı enerjileri gibi faktörlere bağlı olarak gerçekleşebilmektedir. Ayrıca indentasyon deneyi sırasında uygulanan yük, yüzey geometrisi ve moleküler dinamik simülasyonların sınırları, bu pop-out olaylarının ortaya çıkmasını etkileyebilmektedir. Şekil 4.96'da

indentasyon sonucu Al-%15Si alařım yüzeyinde oluřan plastik deformasyon gösterilmiřtir.



řekil 4.96. MD simülasyon sonucu Al-%15Si alařımın yüzeyinde oluřan deformasyonlar

řekil 4.96’da 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Al-%15Si alařımında silisyum miktarının artması ile birlikte ağırlıka %5 ve %10 silisyum eklenmiř olan Al-Si alařımlara göre yüzeyde oluřan deformasyonlar ve iz görüntüleri daha az oluřtuğı görölmüřtür. Al-%15Si alařım malzeme yüzeyinde maksimum 10002,27 μN girinti yüküne kadar yapılan indentasyon deneyi sonucu girinti bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik řekil değıřikliğı meydana gelmiřtir. řekil 4.97’de ağırlıka eklenen silisyum miktarının artması ile birlikte oluřan dislokasyonlar gösterilmiřtir.



řekil 4.97. MD simülasyon sonucu Al-%15Si malzemesinin içyapısı ve girinti iz görüntüsü

řekil 4.97’de 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich tip girinti uç ile gerekleřtirilen indentasyon deneyinde ağırlıka %15 silisyum içeren Al-%15Si alařımın iç yapısında sadece Shockley dislokasyonların oluřtuğı gözlemlenmiřtir. Al-%15Si alařımında oluřan bu dislokasyonların plastik bölgeye yakın bir noktada oluřtuğı görölmüřtür. izelge 4.39

ve Çizelge 4.40'ta indentasyon deneyi sonucu oluşan dislokasyonlar ile bunların uzamsal burgers vektörleri, uzunlukları, kümeleme eğilimleri ve kristal yapıları detaylı bir Şekilde sunulmaktadır.

Çizelge 4.38. Al-%15Si alaışımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Shockley	Perfect	Stair-rod	Hirth	Frank
				
$1/6[-2 -1 1]$	-	-	-	-
$1/6[1 -1 2]$				

Çizelge 4.39. MD simülasyon sonucu Al-%15S alaışımında oluşan dislokasyonlar, uzamsal burgers vektörleri, dislokasyon uzunlukları ve kristal yapılar

Burger vektörü	Uzamsal	burger vektörü	Uzunluk	Küme	Kristal yapı
	1/6[2 -1 1]	-1.3486 - 0.6744 0.6760	763.195	1	FCC
	1/6[1 -1 2]	0.6746 -0.6745 1.3525	72.241	1	FCC
	1/3[1 -1 2]	0.6459 - 0.5724 1.3970	5.955	38	FCC

Çizelge 4.41 ve Çizelge 4.42’de MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu Al-%15Si alaışımın yüzeyinde girinti ucun uygulandığı kuvvet, derinlik, girinti iz verileri, indirgenmiş elastisite modülü, elastisite modülü ve sertlik değerleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.40. Al-%15Si alaışımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	$P_{max}(\mu N)$	$h_{max}(nm)$	$h_c(nm)$	$A(nm^2)$
Al-%15Si	10002,27	49,5	49,3	100020

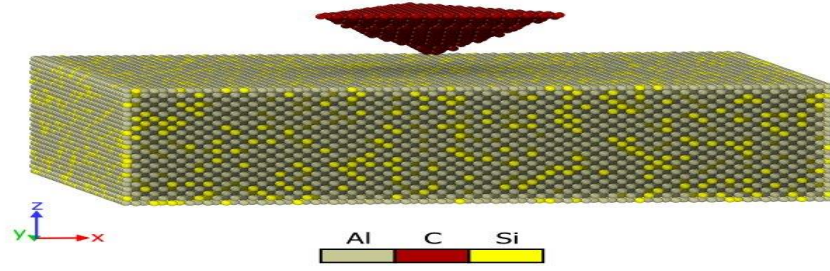
Çizelge 4.41. Al-%15Si alaışımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(GPa)$	$E_m (GPa)$	$H(GPa)$
Al-%15Si	83,6	83,17	0.1

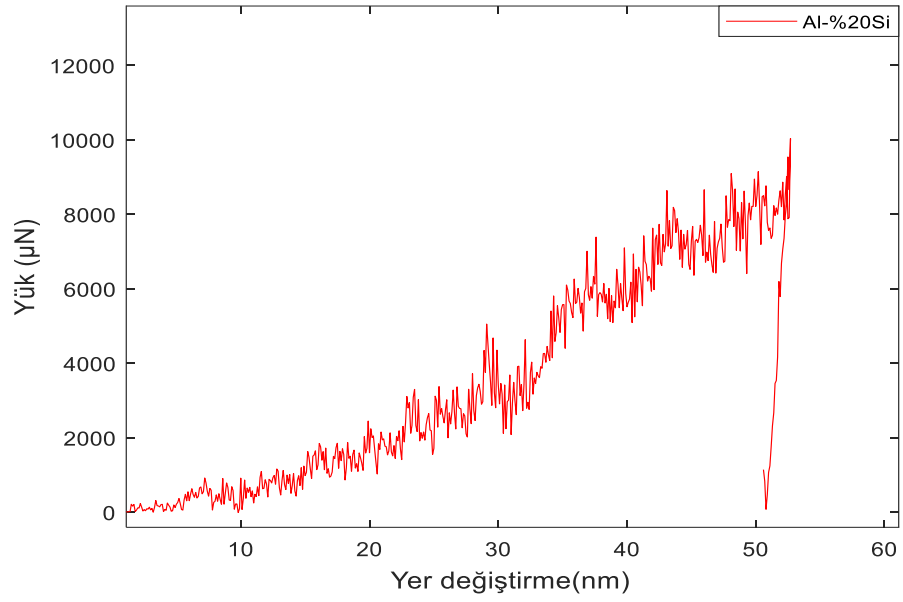
4.5.3.2. Al-%20Si MD simülasyon sonuçları ve analizi

Şekil 4.98’de gösterilen Simülasyon modeli ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirme grafiği Şekil 4.99’da gösterilmiştir. İndentasyon deneyinde girinti yükü 10035,40 μN ’a çıkartılarak indentasyon deneyi gerçekleştirilmiştir. MD simülasyon deneyi, Verlet algoritması ile toplamda 1170000 (fs)

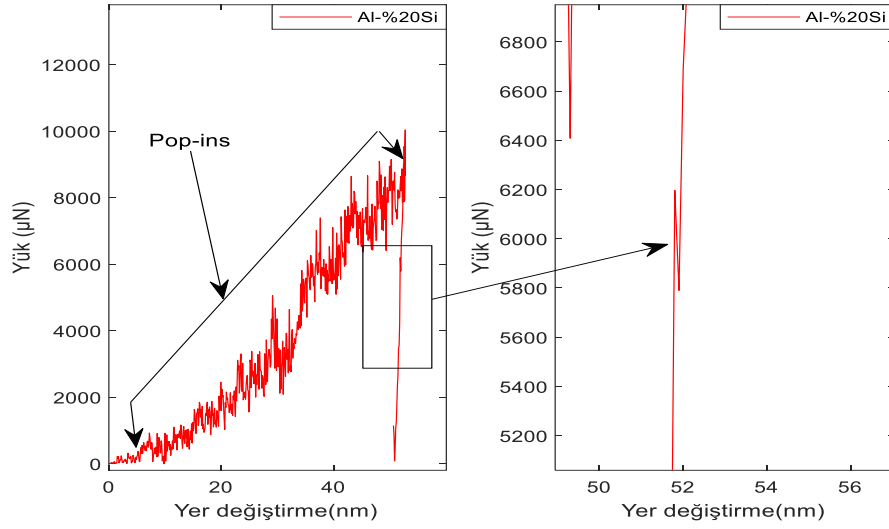
adımında ve 300K sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Şekil 4.99’da görüldüğü üzere, yük boşaltıldığında girintinin hareketiyle yük değeri aşamalı olarak sıfıra yaklaşırken, indentasyon sonucu girinti derinliğinin izi 50 nm’den büyük olduğu gözlenmektedir. Bu da malzeme yüzeyine uygulanan girinti uç bölgesinde plastik deformasyonun oluştuğunu göstermektedir



Şekil 4.98. Al-%20Si alaşımanın simülasyon modeli

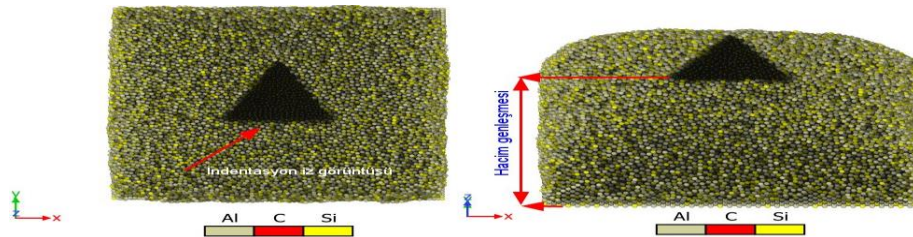


Şekil 4.99. Al-%20Si alaşımanın MD simülasyonu sonucu yük-yer değiştirme grafiği



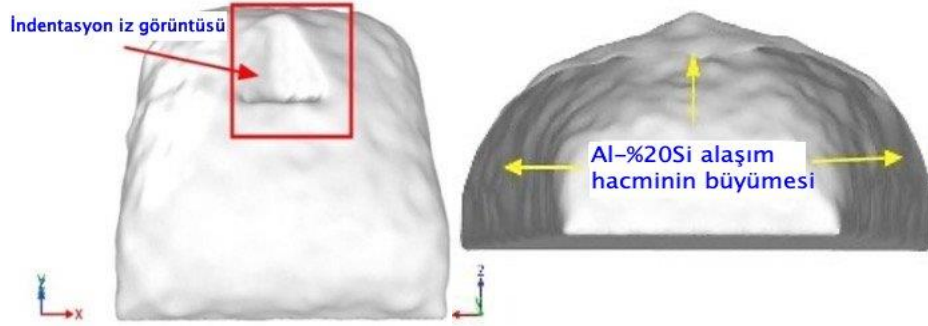
Şekil 4.100. Al-%20Si alaşımının MD simülasyon sonucu pop-in ve pop-out olayları

Şekil 4.100’de Berkovich tip girinti ucu malzeme içinde z yönünde ilerlemesi boyunca çok sayıda pop-in olayları oluşmuştur. Al-%20Si alaşımında girinti yükün boşalması sırasında ilk pop-out olayı 6200 μN ile 5800 μN yük boşaltma aralığında olduğu gözlemlenmiştir. Girinti yükü boşalmaya devam ederken 2000 μN kuvvetinden sonra pop-out olayının olduğu görülmüştür. Bu da malzeme genişlemesinin hala devam ettiğini göstermektedir. Ayrıca girinti yükü tamamen boşaldıktan sonra Al-%20Si alaşımında oluşan pop-out olaylarının malzemenin yüzey enerjileri, atomik düzenlemeleri ve tane sınırı enerjileri gibi faktörlere bağlı olarak gerçekleşebilmektedir. Ayrıca indentasyon deneyi sırasında uygulanan yük, yüzey geometrisi ve moleküler dinamik simülasyonların sınırları, bu pop-out olaylarının ortaya çıkmasını etkileyebilmektedir. Şekil 4.101 ve Şekil 4.102’de, 1170000 (fs) adım simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Al-%20Si alaşımında silisyum miktarının artması ile birlikte yüzeyde oluşan deformasyonlar ve iz görüntüleri gösterilmiştir.



Şekil 4.101. MD simülasyon sonucu Al-%20Si alaşımının yüzeyinde oluşan deformasyonlar

Şekil 4.101 ve Şekil 4.102 incelendiğinde, 1170000 (fs) adım simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun Al-%20Si alaşımında silisyum miktarının artması ile birlikte %5, %10 ve %20 silisyum ilaveli Al-Si alaşımlara göre yüzeyde oluşan deformasyonlar ve iz görüntüleri daha az oluştuğu görülmüştür. Bu da silisyumun miktarının ağırlıkça artması ile birlikte oluştuğu görülmüştür. Şekil 4.101 ve Şekil 4.102’de Al-%20Si alaşım malzeme yüzeyinde maksimum 10035,40 μN ’a girinti yüküne kadar yapılan indentasyon deneyi sonucu indent bölgesinde malzemenin elastik özelliğini kaybedip plastik Şekil değişikliği tüm malzemede meydana geldiği görülmüştür. Ayrıca Şekil 4.102’de görüldüğü üzere Al-%20Si alaşımın iç yapısında dislokasyonların oluşmadığı görülmüştür.



Şekil 4.102. MD simülasyon sonucu Al-%20Si alaşımın iç yapısı ve girinti iz görüntüsü

Çizelge 4.42. Al-%20Si alaşımın MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	$P_{\max}(\mu\text{N})$	$h_{\max}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$A(\text{nm}^2)$
Al-%20Si	10035,40	52,7	52,6	272701,08

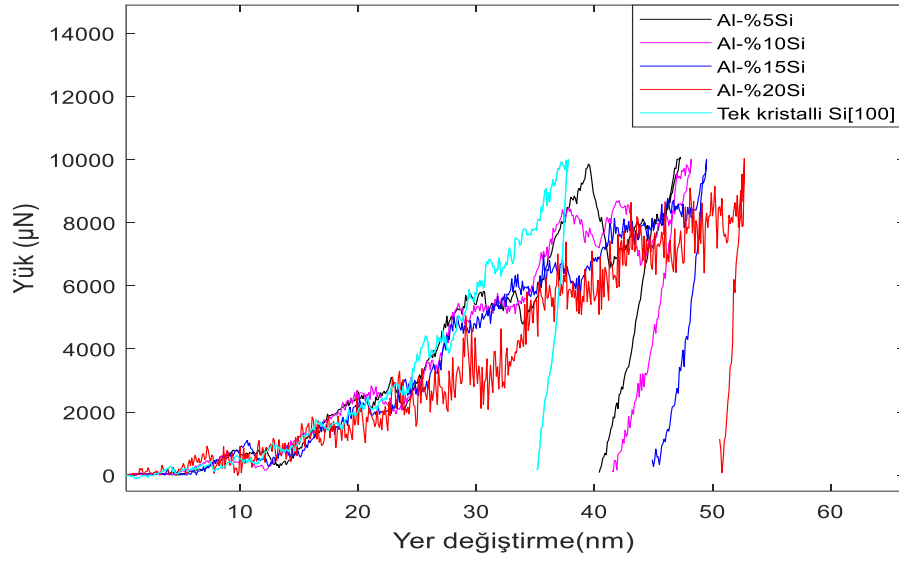
Çizelge 4.43. Al-%20Si alaşımın MD simülasyon sonucu elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değeri

Malzeme	$E_r(\text{GPa})$	$E_m(\text{GPa})$	$H(\text{GPa})$
Al-%20Si	91,5	91,72	0.0368

4.5.3.3. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının MD simülasyon deney sonuçlarının karşılaştırılması

Si[100] elementi ve Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımların simülasyon modelleri 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich tip indenter

ile yapılan indentasyon deneyinde yük-yer deęiřtirme eęrileri řekil 4.1103'te gsterilmiřtir.



řekil 4.103. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alařımlarının MD simlasyon sonucu yk-yer deęiřtirme grafięi

Ykleme sırasında, matris atomları ile girinti atomu arasındaki itme kuvveti nedeniyle ykleme eęrisinin yk deęeri pozitifdir. Girinti ařaęı doęru hareket ettike, atomlar arasındaki itme kuvveti artar ve yk deęeri kademeli olarak artmaktadır. řekil 4.80, řekil 4.84, řekil 4.90, řekil 4.95 ve řekil 4.100'de oluřan yk-yer deęiřtirme eęrilerinde ok sayıda pop-in olaylarının oluřtuęu grlmřtir(Panda ve ark., 2021). Tek kristalli silisyum Si[100], Al-%5Si, Al-%10Si ve Al-%15Si alařımların Berkovich tip u ile gerekleřtirilen indentasyon deneyleri sonucu girdi u etrafında her numunede de yıęılmaların ve penetrasyonların gerekleřtięi gzlemlenmiřtir. Fakat Al-%20Si alařımında alminyum matrisi ierisindeki silisyum miktarının artması ile birlikte penetrasyonların ve dislokasyonların oluřmadıęı grlmřtir. Ayrıca řekil 4.103'te Al-%20Si alařımın indentasyon deneyi sonucu girinti derinlięinin Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si alařımları ve tek kristalli Si[100] elementinden daha fazla olduęu grlmřtir. Silisyum miktarının alminyum matrisi ierisindeki aęırlıka miktarının artması ile birlikte dislokasyonların kaybolduęu ve yer deęiřtirmenin daha fazla olduęu grlmřtir. řekil 4.103'te yk-yer deęiřtirme grafięinde yer deęiřtirmenin en az olduęu tek kristalli Si[100] elementinin olduęu grlmřtir.

Çizelge 4.44. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının MD simülasyon sonucu kuvvet, derinlik ve girinti iz verileri

Malzeme	$P_{\max}(\mu\text{N})$	$h_{\max}(\text{nm})$	$h_c(\text{nm})$	$A(\text{nm}^2)$
Si [100]	10002,40	37,8	37,2	17893,38
Al-%5Si	10073,66	47,3	46,6	42149,20
Al-%10Si	10010,32	48,2	47,9	62957,98
Al-%15Si	10002,27	49,5	49,3	100020
Al-%20Si	10035,40	52,7	52,6	272701,08

Çizelge 4.45'te Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile yapılan indentasyon deneyleri sonucu elde edilen veriler ile hesaplanan sertlik ve elastisite modül değerleri Çizelge 4.46'da gösterilmiştir. Ayrıca alüminyum matrisi içindeki silisyum miktarının artması ile birlikte yükün yer değiştirme oranının düştü görülmüştür. Alüminyum matrisi içerisine eklenen silisyum miktarının artması ile indentasyon deneylerinde Berkovich ucun temas alanının arttığı Çizelge 4.45'te görülmektedir. Tek kristalli Si[100] elementinde temas alanının Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlara göre daha az olduğu görülmüştür. İndentasyon deneylerinde girinti yapılan bölgede malzemede oluşan plastik bölgenin dislokasyonlarla ilişkili olduğu için (Ma ve Yang, 2003) plastisitenin en az olduğu malzeme Tek kristalli Si[100] elementi olduğu görülmüştür.

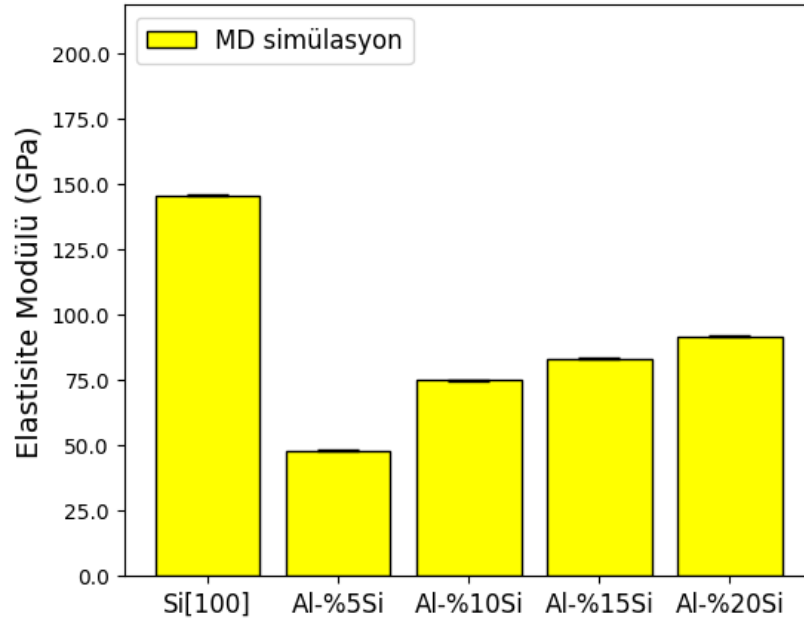
Çizelge 4.45. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilen elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri

Malzeme	$E_r(\text{GPa})$	$E_m(\text{GPa})$	$H(\text{GPa})$
Si [100]	144	145,64	0,559
Al-%5Si	50,2	48,08	0,239
Al-%10Si	75,8	74,86	0,159
Al-%15Si	83,6	83,17	0,1
Al-%20Si	91,5	91,72	0,036

Şekil 4.103'te moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan yük-yer değiştirme grafik eğrilerinden sertlik ve elastisite modülü ölçmek için Hertz yöntemi (Hills ve ark., 2016) ve Oliver-Pharr yöntemleri kullanılmıştır [Oliver ve Pharr, 2004; Oliver ve Pharr, 1992]. Elastisite modülü hesaplanması için indentasyon eğrisinin başlangıçtaki elastik bölgesini kullanırken, indirgenmiş elastisite modülü ve sertliği hesaplamak için boşaltma eğrisinin eğimini ve öngörülen temas alanını kullanmıştır. Oliver-Pharr, birçok girinti şekline uygulanabildiği

için gerçek hayattaki indentasyon deneylerini analiz etmek için tercih edilen yöntemdir. Hertz yöntemi, girinti derinliği küçük olduğunda küresel girintilerle nano girinti simülasyonları için yararlı olabilmektedir (Njeim ve Bahr, 2010). Ayrıca, bir kuvvet alanının öngörülen mekanik özellikleri uygulanan teste bağlı olduğundan, yükleme ve boşaltma adımları tarafından öngörülen elastik modül arasında mevcut olan tutarsızlıkları araştırmak önemlidir (Pratt ve ark., 2020). Moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu oluşturulan yük-yer değiştirme grafik eğrilerinden sertlik değerleri, indirgenmiş elastisite modülleri ve elastisite modülleri hesaplamak için her iki teknik için kullanılmış ve deneysel verilerle karşılaştırılmıştır. Elastisite modülü, bir malzemenin yük altında deformasyonu ve yükün kaldırılması sonucu orijinal şeklini yeniden kazanma yeteneğini tanımlamaktadır. Genellikle elastisite modülü arttıkça sertlik de artar, ancak bu ilişki malzemenin özelliklerine ve yapısına bağlı olarak değişebilmektedir (Goel ve ark., 2015; Gao ve ark., 2015). Çizelge 4.46'da MD simülasyon yöntemi ile yapılan indentasyon işlemi sonucu hesaplanan elastisite modülü, indirgenmiş elastisite modülü ve sertlik değerleri verilmiştir. Çizelge 4.46'da görüldüğü üzere indentasyon deneyleri sonucu en yüksek sertlik ve elastisite modül değerlerinin tek kristalli Si[100] olduğu görülmüştür. Sertlik (H) değerlerinin Al-Si alaşımları içerisindeki silisyum miktarının artmasına bağlı olarak artmadığı görülmüştür. Alaşımlardaki sertlik değerleri, dislokasyonların davranışlarına bağlı olarak değişebilmektedir. Eklenen elementler, dislokasyon hareketini engelleyebilmektedir veya kolaylaştırabilmektedir. Bu da malzemenin sertliğini etkilemektedir. Al-Si alaşımlarında oluşan dislokasyonların, alaşımlara eklenen silisyumun artmasına bağlı olarak dislokasyonların azaldığı ve %15 silisyum ilaveli alaşımdan sonra dislokasyonların oluşmadığı görülmüştür. Çizelge 4.58'de görüldüğü üzere Al matrisi içerisine eklenen silisyum miktarının artması ile dislokasyonların azaldığı ve sertlik değerlerinin dislokasyonların azalması ile birlikte azaldığı görülmüştür; bu da Oliver ve Pharr yöntemine göre, malzemelerdeki sertlik değerlerinin temas alanı ile ters orantılı görüşünü doğrulamaktadır (Doerner ve Nix, 1986). Berkovich tipli girintinin temas ettiği bölgenin kenarlarında yığılmanın ortaya çıkması, temas alanının olduğundan az tahmin edilmesine ve young modülü ve sertlik değerlerinin olduğundan fazla tahmin edilmesine neden olmaktadır (Misra ve ark., 2009). Bu nedenle, yığılma meydana geldiğinde, Oliver ve Pharr yöntemi ile belirlenen sertlik ve indirgenmiş modül değerleri çok yüksek olmaktadır. Çünkü, bu yöntem yükü destekleyen gerçek temas alanı yerine orijinal yüzeyin düzlemindeki temas alanına dayanmaktadır (Moharrami ve Bull, 2014). Çizelge

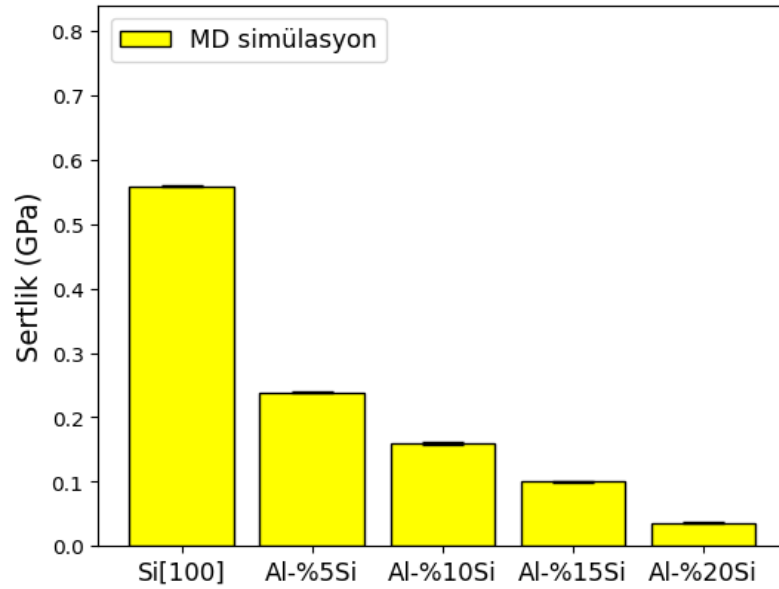
4.45'te görüldüğü üzere temas alanın eklenen silisyum miktarı ile ters orantılı olduğu görülmüştür. Yığılmaların eklenen silisyum miktarının artması ile birlikte azaldığı görülmüştür. Ayrıca, alüminyum matrisi içerisine eklenen silisyum miktarının artması ile birlikte penetrasyon derinliğinin arttığı ve sertliğin azaldığı görülmüştür (Doerner ve Nix, 1986; McElhaney ve ark., 1998; Wolf ve Richter, 2003). Al-Si alaşımların elastisite modül değerlerinin eklenen silisyum miktarı ile orantılı olarak artmıştır. Ayrıca [100] kristalografik yönelimli tek kristalli silisyumun elastisite modül değerinin literatürle uyumlu olduğu görülmüştür (Smith ve Zheng, 2000).



Şekil 4.104. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilen elastisite modül değerleri

Şekil 4.105'te görüldüğü üzere, moleküler dinamik (MD) simülasyonlarıyla gerçekleştirilen nanoindentasyon analizlerinde, Al matrisine artan Si içeriğiyle birlikte sertlik değerlerinde bir azalma gözlemlenmiştir. Bu durum, yapının artan Si oranıyla birlikte daha düzensiz ve amorf bir hale gelmesiyle ilişkilendirilmektedir. Elde edilen bulgular, literatürde benzer sistemler üzerine yapılan çalışmalarla uyumluluk göstermektedir. Örneğin, Lan ve Liu (2013), moleküler dinamik simülasyonlarla gerçekleştirdikleri çalışmalarında, Si katkılı elmas benzeri karbon (Si-DLC) filmlerinde artan Si içeriğinin sertliği azalttığını belirtmiş ve bu azalmanın sp^3/sp^2 (C) oranındaki düşüşten kaynaklandığını göstermiştir. İlginç bir Şekilde, sp^3/sp^2 (C+Si) oranının %20 Si içeriğinde maksimuma ulaştığı, ancak bu noktadan sonra azalma eğilimi gösterdiği ifade

edilmiştir(Lan ve Liu, 2013). Bu bulgular, yüksek Si içeriğinin atomik düzensizlikleri artırarak amorflaşmayı teşvik ettiğini ortaya koymaktadır. Benzer Şekilde, Zhao (2014), moleküler dinamik simülasyonlarla yürüttükleri nanoindentasyon çalışmasında, monokristalin silisyumun faz dönüşümleri geçirerek kristal yapıdan amorf yapıya geçtiğini ve bu geçişlerin deformasyonu kolaylaştırarak sertliği azalttığını raporlamıştır(Zhao, 2014). Ayrıca, Chen ve arkadaşları (2018), amorf SiO₂ kaplı silisyumun moleküler dinamik simülasyonlarıyla incelendiği çalışmalarında, SiO₂ film kalınlığındaki artışın sertlikte azalmaya ve deformasyonun daha kolay gerçekleşmesine neden olduğunu ortaya koymuştur. Bu durumun, amorf yapıların yük altında yerel zayıf bölgeler oluşturmamasından kaynaklandığı vurgulanmıştır(Chen ve ark., 2018). Ayrıca, Si oranı arttıkça sistemdeki atomik düzenin bozulması ve kristal yapıdan amorf yapıya geçiş eğilimi, sertliğin düşmesinde önemli bir rol oynamaktadır(Li ve ark., 2013; Kong ve ark., 2023). Bu durum, özellikle %15 ve %20 Si içeren yapılarda belirginleşmektedir. Simülasyonlarda gerçek üretim sürecindeki katılma davranışları, Si partikül çökelmeleri ve faz sınırları modellenemediğinden, artan Si içeriği sistemde düzensizliklere ve zayıf bölgelerin oluşmasına yol açarak yük altında deformasyonu kolaylaştırmaktadır(Wang ve ark., 2013).



Şekil 4.105. Tek kristalli Si [100] ve Al-Si alaşımlarına ait MD simülasyonu sonucu elde edilensertlik değerleri

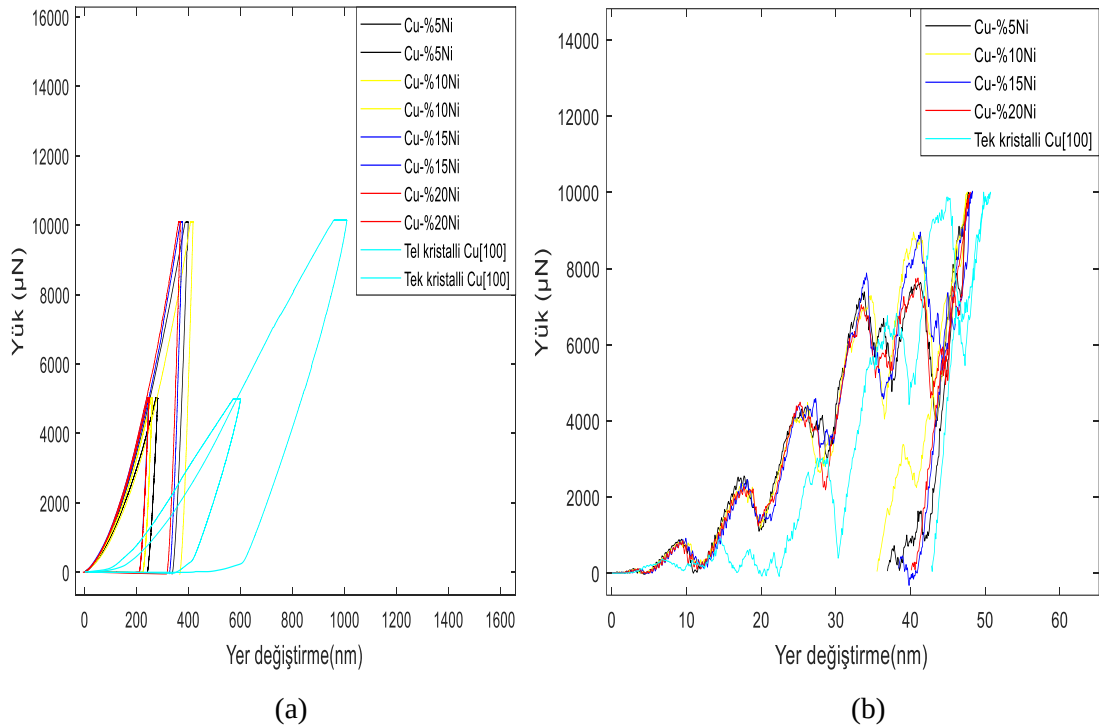
4.6. Nanoindentasyon Deneyleri ile MD Simülasyonların Karşılaştırılması

Bu çalışmada, tek kristalli Cu[100] ve Si[100] ile Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının nano-test cihazı ve MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu hesaplanan sertlik, elastisite modülü ve deformasyonlar karşılaştırılmıştır. Nanoindentasyon deneyleri, malzeme yüzeylerinde mikroskobik deformasyonları inceleyen bir tekniktir. Geleneksel olarak mikro ucu olan bir girinti kullanılarak laboratuvar ortamında gerçekleştirilir. Diğer yandan, MD simülasyon ile gerçekleştirilen deneyler, atomistik seviyede malzeme davranışlarını anlamak için kullanılan bir bilgisayar modelleme yöntemidir ve malzeme yüzeyinin nanoindentasyon süreçlerini atom ve moleküller düzeyde taklit etmektedir. Bu çalışmanın temel amacı, her iki yöntemin de avantajlarını ve sınırlamalarını anlamak, laboratuvar deney sonuçları ile simülasyon deneylerinin sonuçlarını karşılaştırmak ve nanomalzemelerin mekanik özelliklerini değerlendirmek için etkili stratejiler belirlemektir. Bu karşılaştırma hem deneysel hem de hesaplamalı yaklaşımların birbirini tamamlama potansiyelini vurgulayarak, nanomalzeme mühendisliğinin gelişmesinde önemli bir yer almaktadır.

4.6.1. Tek kristalli Cu [100], Cu-Ni alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri ile MD simülasyonların karşılaştırılması

[100] kristalografik yöneline sahip tek kristalli Cu[100] ve %5,%10,%15 ve %20Ni nikel içeren bakır-nikel(Cu-Ni) alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon ile yapılan indentasyon deneyleri sonucu oluşan yük-yer değiştirme grafikleri Şekil 4.106'da gösterilmiştir. Şekil 4.121 a'da 5000 μN 'yüke kadar yapılan indentasyon deneylerinde pop-in (Corcoran ve ark., 1997) ve pop-out(Sidiropoulos ve ark., 2017) olayları görülmemiştir. Fakat MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon işlemlerinde kesme bantlarının oluşumu ve yüzeyde elastik özelliğinden plastik özelliğe geçişlerin oluşması (Banovic ve ark., 1998) ile birlikte pop-in olaylarının başladığı görülmüştür. Şekil 4.121 c'de Cu-%5Ni alaşımında 10000 μN 'luk bir kuvvet altında herhangi bir pop-out olayı gözlenmezken, tek kristal Cu[100], Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarında pop-in olaylarının görülmüştür. Cu-%20Ni alaşımında ve moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerindeki Cu [100] ve Cu-Ni alaşımlarında yükteki artışla birlikte hem pop-in hem de pop-out olaylarında bir artış gözlemlenmiştir. 10000 μN yük altında gerçekleştirilen deneysel

nanoindentasyon deneylerinde oluşan pop-out olayları yük boşaltım sırasında geçen süreye bağlı olduğu görülmüştür. Chang ve arkadaşlarının yapmış olduğu çalışmada pop-out olayının yük boşaltma sürecine ve daha yüksek yük seviyelerinde meydana gelmesine bağlı olduğunu belirtilmiştir. Ayrıca, daha düşük bir yük boşaltma hızı veya daha yüksek bir maksimum indentasyon yükü, pop-out oluşma olasılığını artırdığını bildirmişlerdir(Chang ve Zhang, 2009). Laboratuvar ortamında ve moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen nanoindentasyon deneylerinde yük-yer değiştirme grafiklerinde tek kristalli Cu [100] her iki yöntemde de indentasyon sırasında nanoindentasyon uç Cu-Ni alaşımlara göre yer değiştirmesi daha fazla olduğu görülmüştür. Ayrıca laboratuvar ortamında nano test cihazı ile gerçekleştirilen indentasyon deneyinde Cu-Ni alaşımlarının yük-yer değiştirme grafiklerinin MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon işlemleri sonucu Cu-Ni alaşımın simülasyon modellerinin yük-yer değiştirme grafiklerinin atomik boyutta ve nano düzeyde orantısız olarak farklılıklar oluşmadığı görülmüştür.

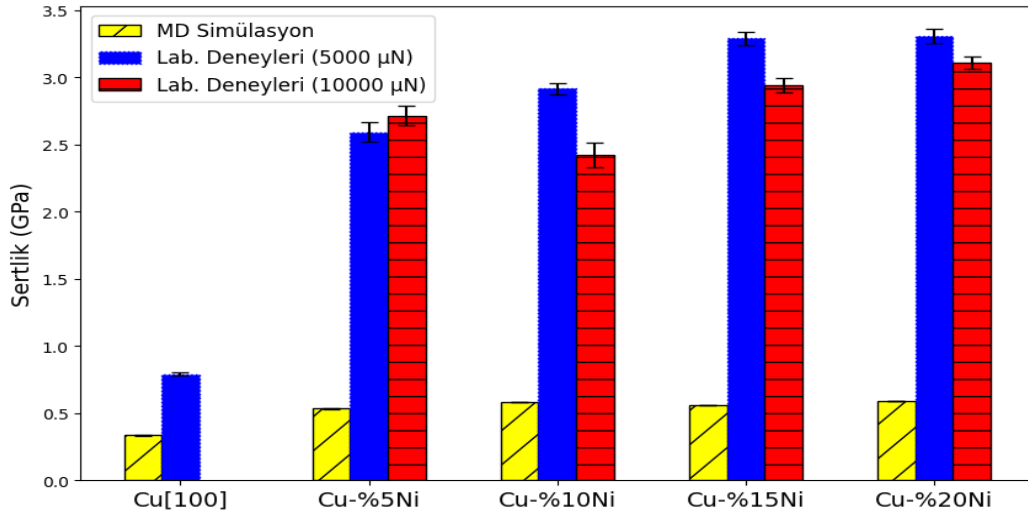


Şekil 4.106. Tek kristalli Cu [100] ve Cu-Ni alaşımların a) 5000 μN ve 10000 μN yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirmesi b) MD simülasyon sonucu 10000 μN altında yük-yer değiştirmesi

Nanoindentasyon tekniği kullanılarak (Doerner ve Nix, 1986) Cu-Ni alaşımları ve [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Cu[100] metalin elastisite modülünün ve sertlik

değerlerinin deneysel olarak belirlenmesi, malzemelerin tane boyutu (Delobelle ve Hadou, 2002; Skandar ve Patrick, 2000), tane çapı ile pürüzlülük arasındaki ilişki (Banovic ve ark., 1998; Skandar ve Patrick, 2000) ve malzemelerin yüzey kalitesine büyük ölçüde bağlıdır (Mencik ve Swain, 1995). Bu çalışmalar, nanoindentasyon ölçümleri ile malzeme sertliğini etkileyen faktörlerin derinlemesine analiz edilmesine olanak sağlamaktadır. Özellikle, malzeme mikro yapısının ve yüzey pürüzlülüğünün, sertlik ölçümlerinde önemli etkiler yaratması bu literatürdeki bulgularla uyumludur. Şekil 4.107'de Cu[100], Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni malzemelerinin laboratuvar ortamında nano test cihazı ile moleküler dinamik simülasyon yöntemiyle yapılan nanoindentasyon deneyleri sonucu sertlik değerleri karşılaştırılmıştır. Uygulanan yükün artmasıyla birlikte sertlik ve elastisite değerlerinde gözlemlenen azalma, malzemeye uygulanan yük artışının dislokasyon hareketini hızlandırması ve daha büyük plastik deformasyona neden olmasıyla açıklanabilir. Bu bulgu, Deng ve arkadaşlarının (2018) çalışmasıyla tutarlıdır; Deng ve ark., tek kristal bakır üzerinde nanoindentasyon yaparak yük artışıyla birlikte sertlikte gözlemlenen düşüşü, Shockley kısmi dislokasyonlarının ani büyümesi ile ilişkilendirmiştir. Ayrıca indentasyon derinliğinin artmasıyla dislokasyon yoğunluğunun arttığı ve plastik bölgenin genişlediği gözlemlenmiştir (Deng ve ark., 2018). Ayrıca, Şekil 4.107'de Cu-%5Ni alaşımına uygulanan 5000 μN yük ile yapılan nanoindentasyon deneyindeki sertlik değerinin, 10000 μN yük ile yapılan nanoindentasyon deneyindeki sertlik değerinden daha büyük olduğu gözlemlenmiştir. Nix ve Gao (1998) ve Pharr ve ark. (1992) tarafından yapılan önceki çalışmalar, yük bağımlı sertlik etkisini açıklamaktadır. Küçük yüklerde plastik deformasyon bölgesi daha sınırlıdır ve dislokasyon hareketleri engellenerek sertlik daha yüksek ölçülür. Ancak yük arttıkça deformasyon hacmi genişler ve malzemenin genel mekanik özellikleri devreye girer, bu da sertlik değerinin azalmasına neden olur. Pharr ve ark. (1992), düşük yüklerde yüzeydeki sert fazların veya oksit tabakalarının sertlik ölçümünü etkileyebileceğini, ancak yüksek yüklerde malzemenin gerçek sertlik değerinin daha belirgin hale geldiğini belirtmiştir. Bu gözlemler, Cu-%5Ni alaşımına 5000 μN yük ile yapılan nanoindentasyon deneyinde ölçülen sertliğin, 10000 μN yük ile yapılan deneydekenden daha yüksek olduğunu gösteren literatürdeki bulgularla uyumludur. Moleküller dinamik simülasyonlarıyla yapılan indentasyon deneyleri sonucunda, [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Cu[100], Cu-%5Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20 alaşımlarının sertlik değerlerinin eklenen nikel miktarına göre arttığı görülmüştür. Ancak, Cu-%10Ni alaşımının sertlik değerinin Cu-%15Ni alaşımının sertlik değerinden yüksek

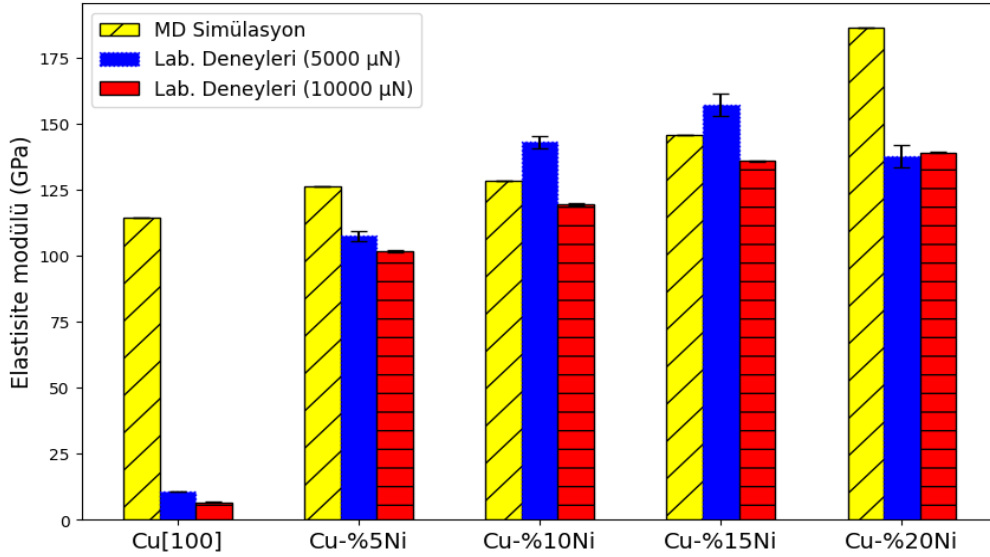
olmasının, eklenen nikel miktarına orantılı olarak artmadığı gözlemlenmiştir. Bu durum, eklenen nikel miktarının, girinti yükünün artışıyla birlikte dislokasyon hareketini hızlandırarak daha büyük deformasyon ve plastiklik oluşumuna yol açtığını ve dolayısıyla malzemelerin sertliğini azalttığını gösteren literatürle uyumludur. Ayrıca, Çizelge 4.27'de Cu-%15Ni alaşımının H_c değerinin Cu-%10Ni alaşımının H_c değerinden yüksek olduğu görülmektedir. MD simülasyonlarıyla yapılan nanoindentasyon deneylerinden elde edilen Cu-Ni alaşımlarının sertlik değerlerinin, laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile gerçekleştirilen deneylerde hesaplanan sertlik değerlerinden daha düşük olduğu görülmüştür. Bu durum, MD simülasyonlarında girinti hızı, döküm sürecinde alaşımın soğuma hızı, malzemelerin yüzeylerinin pürüzlülüğünü gidermek için kullanılan yöntemler, malzemenin iç yapısında oluşan stres ve alaşımlar içinde silisyum (Si) ve demir (Fe) elementlerinin varlığı gibi faktörlerle açıklanabilir. Jiang ve arkadaşlarının (2006) çalışmasında, soğuma hızının metalik camların yapısını ve özelliklerini etkileyen en önemli faktörlerden biri olduğunu göstermiştir. Soğutma hızının, metalin sertlik ve elastik modülünü önemli ölçüde etkileyebileceği, farklı soğuma hızlarının farklı sertlik sonuçlarına yol açabileceği bu literatürle de doğrulanmaktadır. Qiu ve arkadaşlarının (2014) çalışmasında daha yüksek hızların indentasyon bölgesinde daha büyük gerinim hızlarına yol açtığı belirtilmiş, atomların yeniden düzenlenmesi için yeterli zaman bulunamadığından, malzemenin deformasyona karşı direncinin arttığı ve dolayısıyla sertliğin yükseldiği sonucuna varılmıştır. Bu da simülasyon sonuçları ile uyumlu bir açıklamadır. Literatürdeki çalışmalar, bu farklılıkların kaynaklarına dair önemli bir perspektif sunmaktadır. Özellikle tek kristalli Cu[100] metalinin simülasyon modeli ile gerçekleştirilen gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucunda elde edilen elastisite modül değerinin, literatürle uyumlu sonuçlar elde edilirken, laboratuvar ortamında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyi sonucundan önemli ölçüde farklı olduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, simülasyon ortamının laboratuvar koşullarından farklı olmasının etkisini ortaya koymaktadır ve bu konuda yapılan çalışmalar (Jiang ve ark., 2006; Li ve ark., 2007) deneysel farklılıkları açıklamak için değerli bir temel sunmaktadır.



Şekil 4.107. 5000 μN ve 10000 μN yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu Cu [100] ve Cu-Ni alaşımların sertlik değerleri

Şekil 4.108’de görüldüğü üzere, Cu-%5Ni, Cu-%10Ni, Cu-%15Ni ve Cu-%20Ni alaşımlarının moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu elde edilen elastisite modül değerleri, laboratuvar ortamında gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonuçlarına oldukça yakın sonuçlar vermektedir. Bu, Cu-Ni alaşımlarının elastisite modül değerlerinin simülasyonlarla tutarlı olduğunu ve simülasyonların doğru bir şekilde laboratuvar ortamını modelleyebildiğini göstermektedir. Li ve arkadaşları (2007) simülasyon yöntemlerinin, özellikle malzeme özelliklerinin doğruluğunu ve güvenilirliğini artırabileceğini belirterek, simülasyonların bu tür deneylerle uyumlu sonuçlar verebileceğine dikkat çekmişlerdir. Ayrıca, Cu-Ni alaşımlarının simülasyon modellerine eklenen nikel miktarının elastisite modül değerlerini artırdığı gözlemlenmiştir. Bu bulgu, nikel içeriğinin artmasının alaşımın elastik modülünü artıran bir etkiye sahip olduğunu gösteren literatürle uyumludur. Ancak, döküm yoluyla üretilen Cu-Ni alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri sonucu, nikel miktarının artmasına rağmen, elastisite modül değerinin Cu-%20Ni alaşımında olduğu gibi daha düşük olduğu görülmüştür. Bu durum, döküm aşamasında Cu-Ni alaşımlarına dahil olabilecek farklı elementlerin, özellikle silisyum (Si) ve demir (Fe), malzeme yapısını etkileyebileceğini göstermektedir. Şekil 4.5’te gösterilen EDX analizi sonuçları da, indentasyon yapılan noktada Cu ve Ni dışındaki elementlerin daha fazla olduğunu ve bunun elastisite modül değerlerini etkileyebileceğini desteklemektedir. Bu bulgu, Jiang ve arkadaşlarının (2006) soğuma hızının ve döküm sırasında malzemenin iç yapısında meydana gelen streslerin, metalik camlar ve alaşımlar üzerinde önemli etkiler

yaratabileceğini gösterdiği çalışmalarıyla paralellik göstermektedir. Ayrıca, Steenberge ve arkadaşlarının (2007) çalışmasında da döküm sırasında malzemenin yapısındaki heterojenliklerin, elastik modül gibi mekanik özellikleri önemli ölçüde etkileyebileceği belirtilmiştir. Bu tür etkileşimler, elastisite modülündeki farklılıkların anlaşılmasında önemli bir rol oynamaktadır.



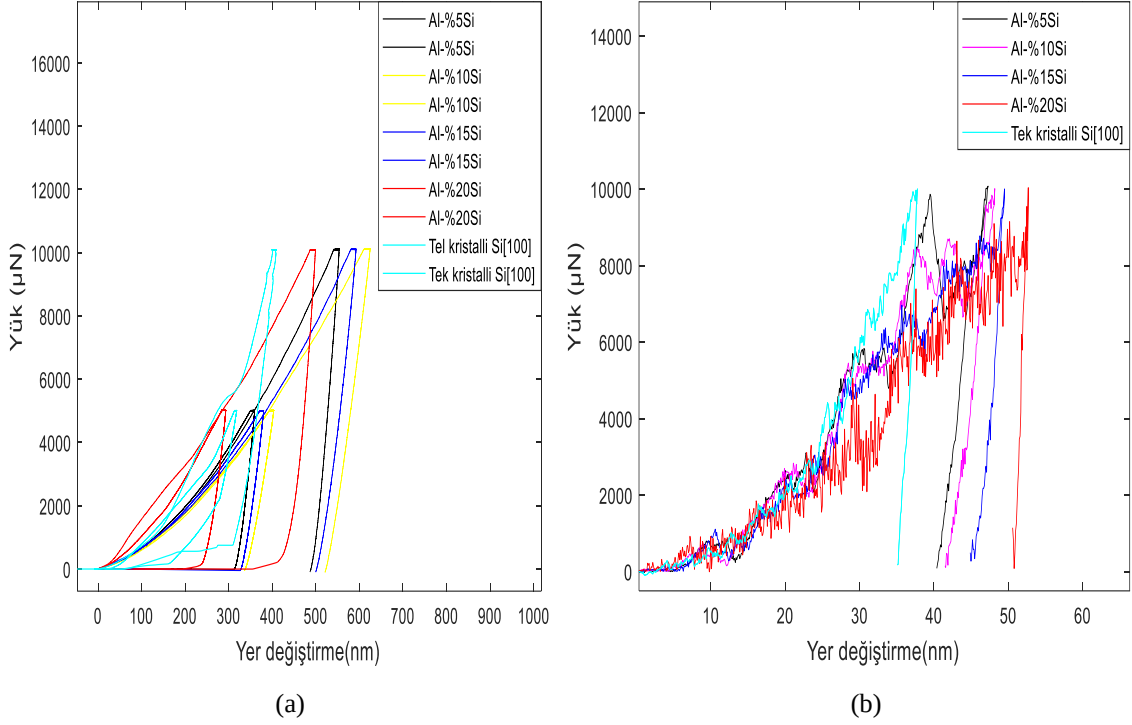
Şekil 4.108. 5000 µN ve 10000 µN yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu tek kristalli Cu [100] ve Cu-Ni alaşımların elastisite modül değerleri

4.6.2. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımlarının nanoindentasyon deneyleri ile MD simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması

Tek kristalli Si[100] elementi, %5Si, %10Si, %15Si ve %20Si silisyum içeren Al-Si alaşımlarının laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile yapılan nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu oluşan yük-yer değiştirme grafikleri Şekil 4.110'da gösterilmiştir. Ağırlıkça %20 Si içeren Al-Si alaşımında, Tek kristalli Si[100] elementi, %5 Si, %10 Si ve %15 Si içeren Al-Si alaşımlarına kıyasla pop-in olaylarının daha sık görülmüştür. Ayrıca, Tek kristalli Si[100] elementi ile ağırlıkça %5 Si, %10 Si, %15 Si, %20 Si içeren Al-Si alaşımlarının indentasyon deneyi sırasında yük boşaltılınca pop-out olayları meydana gelmiştir. %5 Si, %10 Si ve %15 Si içeren Al-Si alaşımlarında dislokasyonlar gözlemlenirken, Tek kristalli Si[100] elementi ve ağırlıkça %20 Si içeren Al-%20Si alaşımında 11700000 (fs) indentasyon adım sonucunda dislokasyonlar oluşmamıştır. Tek kristalli Si[100] elementi

üzerinde nano-test cihazı ile yapılan indentasyon deneylerinde, pop-in ve pop-out olaylarının 5000 μN yükte oluşmadığı, ancak 10000 μN yük ile yapılan indentasyon deneyinde pop-in ve pop-out oluştuğu görülmüştür. Juliano (2004) tarafından yapılan çalışmada, silikon malzemeye uygulanan yükün artmasıyla mekanik özelliklerde değişimler gözlemlenmiş ve bu değişimlerin faz dönüşümleriyle ilişkili olduğu belirtilmiştir. Farklı yük aralıklarında gerçekleştirilen deneyler, uygulanan maksimum yükün malzemenin dönüşüm basınçlarını ve mekanik davranışını etkilediğini ortaya koymuştur. Özellikle yüksek yük seviyelerinde "pop-in" ve "pop-out" olaylarının gözlenmesi, malzemenin iç yapısında önemli değişimlerin meydana geldiğini göstermiştir (Juliano ve ark., 2004). Bu durumun hem uygulanan yüke hem de yükün boşaltımı sırasında geçen süreye bağlı olduğunu göstermiştir (Schneider ve Fett, 2006). Fakat, 1170000(fs) simülasyon adımı sonucunda Berkovich girinti ucunun tek kristal silisyum yüzeyinde [100] kristalografik yönelimli deformasyonlar ve iz oluşturduğu görülmektedir. İndentasyon deneyi sırasında tek kristalli Si[100] elementin iç yapısında dislokasyonların oluşmadığı gözlemlenmiştir. Bu da tek kristalli Si[100] elementindeki pop-in ve pop-out olaylarının dislokasyon oluşumundan bağımsız olduğunu göstermektedir. Al-%5Si, Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımların laboratuvar ortamında 5000 μN ve 10000 μN yüklerde nano-test cihazı ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde Si[100] ve Al-%20Si alaşımının yük-yer değiştirme grafiklerinin farklı olduğu görülmüştür. Bu fark, alaşım malzemelerin elastik ve plastik tepkisinden kaynaklanmıştır (Tupaj ve ark., 2020). Laboratuvar ortamında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneylerinde 5000 μN yükte Al-%20Ni alaşımı $P_{\max}$ yükte Berkovich tip girinti ucun malzeme içinde ilerlemesi en az olmuştur. Fakat 10000 μN yükte [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Si [100] malzemesinin $P_{\max}$ yükte Berkovich tip indenter ucun malzeme içinde ilerlemesi en az olmuştur. Ayrıca Şekil 4.111'de sertlik değerlerinin uyumlu olmadığı görülmüştür. Fazel ve Sadrnezhaad, yapmış oldukları çalışmada, nanoindentasyon sırasında plastik deformasyon mekanizmaları kristalografik yönelimle doğrudan ilişkili olduğunu, NiTi/Ag çift katmanında farklı yüzey yönelimlerinde (1 0 0), (1 1 1), (2 1 1) gibi farklı dislokasyon olayları ve plastik deformasyon başlangıç mekanizmaları olduğunu gözlemlemişlerdir. Özellikle, belirli kristal yüzeylerinde dislokasyon yoğunluğu ve plastik enerji dağılımının değiştiği, dolayısıyla malzemenin sertlik ve deformasyon davranışlarının bu faktörlere bağlı olduğunu bildirmişlerdir (Fazeli ve Sadrnezhaad, 2019). Bu, tek kristalli Si[100] elementi ile Al-Si alaşımların karakterizasyonunun nanoindentasyon sırasında plastik

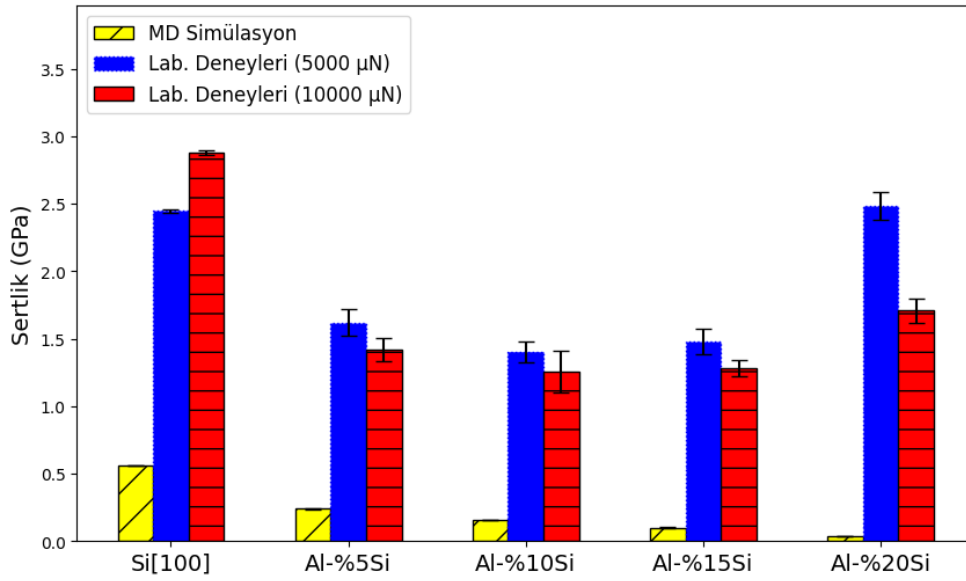
deformasyonla yakından ilişkili olduğunu doğrulamaktadır. Ayrıca en yüksek yük değerlerinde daha küçük maksimum girinti derinliği görülebilmektedir. (Chen ve ark., 2010).



Şekil 4.109. Tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların a) 5000 µN ve 10000 µN yükler altında nanoindentasyon deneyleri sonucu yük-yer değiştirmesi b) MD simülasyon sonucu 10000 µN altında yük-yer değiştirmesi

Şekil 4.110’de tek kristalli Si[100] elementi ve Al-Si alaşımlarının laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile yapılan nanoindentasyon deneyleri ve moleküller dinamik simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyleri sonucu Şekil 4.110’da sertlik değerleri karşılaştırılmıştır. Tek kristalli Si[100] elementi laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile gerçekleştirilen deneyde sertlik değerinin MD simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu hesaplanan sertlik değerinden yüksek olduğu görülmüştür. Bu fark, Tupaj ve arkadaşlarının (2020) çalışmalarında vurgulanan gibi, alaşım malzemelerinin elastik ve plastik tepkilerinin farklı kristal yapılar ve yüzey yönelimlerine bağlı olarak değiştiğini doğrulamaktadır. Ayrıca, Fazeli ve Sadrnezhaad (2019) tarafından yapılan çalışmalar da nanoindentasyon sırasında plastik deformasyonların kristalografik yönelimle ilişkili olduğunu ve belirli yüzeylerde dislokasyon yoğunluğunun değiştiğini göstermektedir. Bu bulgular, Al-Si alaşımlarının elastik davranışını ve sertlik değerlerini anlamada önemli bir temel sunmaktadır. Nikanorova ve

arkadaşlarının (2004) çalışmasında, silisyum içeriği %15'e kadar olan Al-Si alaşımlarının sertlik değerlerinin MD simülasyonları ile uyumlu olduğu belirtilmiştir. Bunun yanı sıra, Bhattacharya ve arkadaşlarının (2009) çalışması, silisyum çökeltilerinin hacimsel değişikliklerinin plastik deformasyon mekanizmalarına katkıda bulunduğunu göstermiştir. Bu da, yük artışıyla birlikte silisyum çökeltilerinin etkileşiminin, sertlik ve deformasyon davranışlarını nasıl etkilediğini açıklamaktadır. Her iki yöntemle gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde Al-%5Si ve Al-%10Si alaşımlarının sertlik değerlerin eşit olmadığı fakat benzer oranlarda sertlik değerlerinde düşüşler görülmüştür. Nikanorova ve ark., 2004, yapmış olduğu çalışmada Si içeriği ağırlıkça %15'e kadar Si içeren Al-Si alaşımların sertlik değerleri, moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deney sonuçları ile uyumlu olduğu görülmüştür (Nikanorova ve ark., 2004). Fakat Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarında nano-test cihazı ile gerçekleştirilen nanoindentasyon sonucu sertlik değerlerinin eklenen silisyum miktarlarına göre sertlik değerlerinin arttığı görülmesine karşın MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde sertlik değerlerinin eklenen silisyum'a rağmen sertlik değerlerinin azaldığı görülmüştür. Bu durum, alüminyum matrisinde bulunan Mg, Fe ve Ag elementlerinin varlığı ve girinti boyutunun etkisiyle açıklanabilmektedir (Nix ve Gao, 1998). Ayrıca, yük miktarının artışıyla sertlik değerindeki azalma, girinti etrafında aglomerasyon oluşumu ve sertleştirici ile etkileşim sonucu silisyum çökelti hacminin artmasıyla plastik deformasyonların oluşmasıyla açıklanabilmektedir. Bhattacharya ve arkadaşlarının yapmış oldukları çalışmada sertleştirici faz olan silisyum çökeltilerinin hacimsel değişikliklere uğrayarak plastik deformasyon mekanizmalarına katkıda bulunduğu göstermişlerdir (Bhattacharya ve ark., 2009). Steenberge ve arkadaşlarının yapmış oldukları çalışmada, zirkonyum bazlı bir yığın metalik cam alaşımında yük artışıyla birlikte sertlik değerinde azalma gözlemlendiği ve bunun indentasyon boyutu etkisi ile ilişkili olduğu belirtmişlerdir. Ayrıca, Çalışmada, daha büyük seviyelerinde indentasyon sonrası dinamik sertliğin daha düşük olduğu ve serbest hacim üretiminin deformasyon sürecini etkileyerek malzemenin zamanla yumuşamasına neden olduğu göstermişlerdir (Steenberge ve ark., 2007).

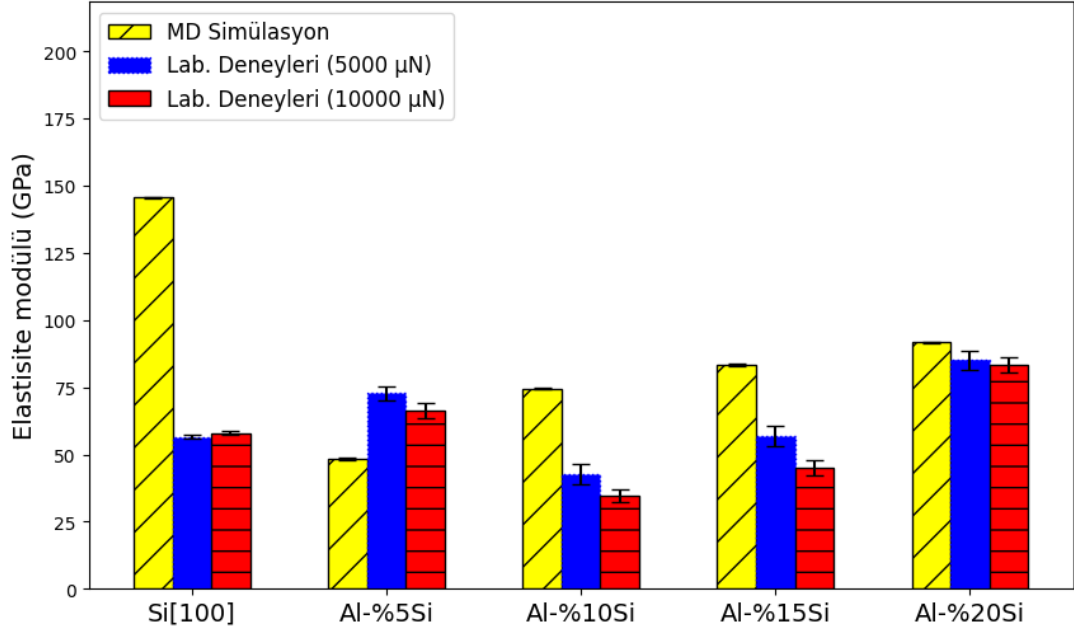


Şekil 4.110. 5000 μN ve 10000 μN yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon deneyleri sonucu tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların sertlik değerleri

Laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve Moleküller dinamik simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde tek kristalli Si[100] elementi ile Al-Si alaşımların elastisite modül değerleri Şekil 4.12’de verilmiştir (Fischer-Cripps, 2002). Tek kristalli Si[100] elementinin laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile 5000 μN ve 10000 μN ile gerçekleştirilen nanoindentasyon deney sonuçlarının MD simülasyon deney sonuçlarıyla uyumlu olmadığı görülmüştür. Bu fark, nano-test cihazının silisyum üzerinde uyguladığı yük miktarı, numune pürüzlülüğü ve malzemenin saflığı gibi çeşitli faktörlere bağlı olabilmektedir (Goel ve ark., 2014). Ayrıca, literatürde bildirilen silisyumun elastisite modülünün nano-test cihazı ile gerçekleştirilen deneyde hesaplanan elastisite modül değeri, girinti için kullanılan parametrelere ve ölçümlerin hassasiyetine bağlı olarak 120-170 GPa aralığındadır (Luo ve ark., 2012). Bu nedenle, MD simülasyon sonucu hesaplanan elastisite modül değerleri ile literatür değerleri mükemmel bir uyum içindedir ve tek kristalli Si[100] elementi için MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon sonuçlarına güven sağlamaktadır. Laboratuvar ortamında nano test-cihazı ile gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri Al-Si alaşımlarının elastisite modül değerlerinin eklenen silisyum miktarına göre orantılı bir artış göstermemiştir. %5Si ilaveli Al-Si alaşımlarının elastisite modül değeri moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu hesaplanan elastisite modül değerinden daha yüksek olduğu görülmüştür. Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımların laboratuvar ortamında nano-test cihazı ile

gerçekleştirilen deneylerin elastisite modül değerleri MD simülasyon deney sonuçlarına göre daha düşük olduğu görülmüştür. Şekil 4.112’de ağırlıkça %20Si ilaveli Al-%20Si alaşımının elastisite modül değeri %5Si,%10Si ve %15Si ilaveli Al-Si alaşımlarından daha yüksek olmasına karşın moleküller dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneyi sonucu hesaplanan elastisite modül değerinden düşük olduğu görülmüştür. Fakat MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon işlemleri sonucu hesaplanan elastisite modül değerleri eklenen silisyum miktarına göre orantılı bir artış göstermiştir. MD simülasyon ile gerçekleştirilen indentasyon deneyinde Al-%5Si alaşımının elastisite modül değerinin saf alüminyumun elastisite modül değerinden düşük olduğu görülmüştür(Youn ve ark., 2005). Bu olay, Al-%5Si alaşımının indentasyon sonucu içyapısında oluşan dislokasyonlar %10Si,%15Si ve %20Si ilaveli Al-Si alaşımlarına göre daha fazla oluşması ile birlikte malzeme içyapısında oluşan dislokasyonların malzemenin kristal yapısında hareket eden atomlar arasında gerilmelere neden olmuştur. Bu gerilmeler, malzemenin elastik davranışını ve elastisite modülünü etkilemektedir. Özellikle yüksek dislokasyon yoğunluğuna sahip malzemeler daha düşük elastisite modülüne sahip olabilmektedir. Çünkü dislokasyonlar arasındaki etkileşimler ve gerilmeler, malzemenin elastik davranışını sınırlayabilmektedir. Benzer bir ilişki, Fazeli ve Sadrnezhad (2011), NiTi/Ag çift katmanlı malzemelerin nanoindentasyon simülasyonları ile de desteklenmiştir. MD simülasyonları ile nanoindentasyon sırasında dislokasyonların nükleasyonunu, yayılmasını ve yok olmasını inceleyerek, dislokasyon mekanizmalarının malzemenin genel mekanik özelliklerini nasıl Şekillendirdiğini göstermiştir. Dislokasyon yoğunluğunun artması, malzemenin elastisite modülü üzerinde önemli bir düşüşe yol açabildiğini deneysel ve simülasyon tabanlı çalışmalarla doğrulanmıştır. Yapmış oldukları çalışmada, nanoindentasyon sırasında gözlemlenen dislokasyon yoğunluğunun artışının, mekanik özelliklerde önemli değişimlere yol açtığını doğrulamıştır(Fazeli ve Sadrnezhad., 2011). Qiu ve arkadaşlarının yapmış oldukları çalışmada farklı kristalografik yönelimlerde yapılan MD simülasyonlarında, dislokasyon hareketleri ve faz dönüşümlerinin mekanik davranışı doğrudan etkilediğini göstermiştir (Qiu ve ark., 2014). Ayrıca moleküller dinamik simülasyon yöntemi gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde Al-%10Si, Al-%15Si ve Al-%20Si alaşımlarının indentasyon deneyleri sonucu elastisite modül değerlerinin literatür ile uyumlu olduğu görülmüştür(Mathew ve ark.,2019). Laboratuvar ortamında gerçekleştirilen nano-indentasyon deneylerinde Al-%10Si ve Al-%15Si alaşımlarının elastisite modül değerlerinin literatüre göre düşük olmasının nedeni, silisyum oranının

dağılımı, kristal yapıdaki farklı fazların (örneğin, α -Al ve Si fazları) birbirleriyle etkileşimi, mikroyapıdaki kusurlar, çatlaklar, yüzey pürüzlülüklerin giderilmesi esnasında malzeme iç yapısında oluşan gerilmeler ve girinti bölgesinde oluşan plastisiteden dolayı olduğu açıklanabilmektedir.



Şekil 4.111. 5000 µN ve 5000 µN yükler altında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri ve MD simülasyon sonucu tek kristalli Si[100] ve Al-Si alaşımların elastisite modül değerleri

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının döküm süreçleri kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Alaşımların yüzey pürüzlülüğü giderilmiş, ardından parlatma işlemleri uygulanmıştır. Yüzey pürüzlülük testleri gerçekleştirilmiş ve numunelerin tane yapılarının incelenebilmesi amacıyla dağlama işlemlerinin ardından optik mikroskop ve geçirimli elektron mikroskobu kullanılarak mikro yapısal analizler yapılmıştır. Ayrıca, alaşımların kimyasal bileşimlerini belirlemek üzere EDX analizleri gerçekleştirilmiştir. Laboratuvar ortamında, nanoindentasyon test cihazı ile Al-Si ve Cu-Ni alaşımlarına yönelik nanoindentasyon deneyleri yapılmıştır. Bunun yanı sıra, [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli Cu[100] ve Si[100] numuneleri için gerekli takım ucu ve deney koşulları belirlenerek nanoindentasyon deneyleri gerçekleştirilmiştir. Deneysel çalışmalara ek olarak, moleküler dinamik (MD) simülasyon yöntemiyle hem Al-Si ve Cu-Ni alaşımlarının hem de tek kristalli Cu[100] ve Si[100] numunelerinin nanoindentasyon süreçleri için simülasyon modelleri oluşturulmuş ve bu modeller yüksek performanslı bilgisayar sistemlerinde analiz edilmiştir. Son olarak, deneysel ve simülasyon sonuçları karşılaştırılmış, elde edilen veriler üzerinden kapsamlı analizler gerçekleştirilmiştir.

5.1. Sonuçlar

- ❖ Nanoindentasyon deneyleri sonuçlarına göre, CuNi alaşımlarının Em değerleri 101,89 GPa ile 139,27 GPa arasında değişmiştir. MD simülasyonları Em değerlerini 126,30 GPa ile 186,34 GPa arasında olduğu görülmüştür. Bu sonuçlar, Em değerlerinin nikel içeriğindeki artışla önemli ölçüde arttığını göstermektedir. Nanoindentasyona kıyasla MD simülasyonlarında elde edilen daha yüksek Em değerleri, atomik düzeydeki etkileşimlerin önemini vurgulamaktadır. Genel olarak, bu bulgular literatürdeki mevcut verilerle uyumlu olduğu görülmüştür.
- ❖ Cu-%10Ni alaşımındaki büyük tane boyutu ($125297 \mu\text{m}^2$) sertliği 2,40 GPa'ya düşürürken, Cu-%20Ni alaşımındaki daha küçük tane boyutu ($37357 \mu\text{m}^2$) sertliği 3,09 GPa'ya çıkarmıştır. Bu bulgular, daha büyük tane boyutlarının plastisiteyi

artırarak sertlikte azalmaya yol açtığını, daha küçük tane boyutlarının ise dislokasyon hareketini kısıtlayarak sertliği artırdığını göstermektedir

- ❖ MD simülasyon deneylerinde, Cu-Ni alaşımlarında kalıcı dislokasyonların oluşumu artan nikel içeriğiyle gözlemlenmiştir. Özellikle, Cu-%15Ni alaşımında Stair-rod dislokasyonlarının sayısı artarken, Shockley dislokasyonlarının yoğunluğu Cu-%20Ni alaşımında önemli ölçüde artmıştır.
- ❖ Yüzey parlatma işlemlerinin neden olduğu iç yapısal gerilimler, Fe ve Si elementlerinin varlığıyla birlikte, sertlik değerlerinin MD simülasyon deneylerinden elde edilenlerden daha yüksek olmasına neden olmuştur.
- ❖ MD simülasyon yöntemi, malzemelerdeki atom ölçeğindeki deformasyonların ve dislokasyonların gerçek zamanlı, adım adım gözlemlenmesine olanak sağlayarak laboratuvar girinti deneylerine göre belirgin bir avantaj sunmaktadır. Bu çalışma, sertlik ve elastik modül gibi mekanik özellikleri analiz etmede Cu-Ni alaşımları için nanoindentasyon testlerini MD sonuçlarıyla karşılaştırarak MD simülasyonlarının güvenilirliğini ve geçerliliğini vurgulamaktadır.
- ❖ Cu[100] kristal yönelimine sahip tek kristalli bakır ve farklı oranlarda (%5, %10, %15, %20) nikel içeren Cu-Ni alaşımlarında pop-in ve pop-out olaylarının gözlemlendiğini göstermiştir. Nikel oranındaki artışın mikroyapısal ve mekanik özellikler üzerinde belirgin etkileri olduğu; özellikle tane boyutunun küçülmesiyle sertlik ve elastisite modülünde artış gözlemlendiği tespit edilmiştir. Bununla birlikte, yüksek yüklerde elastisite modülünde genel bir azalma görülürken, nikel oranının artması rijitliği artırmıştır. %5Ni alaşımında ise artan yüke rağmen sertlikteki artış, Hall-Petch ilişkisiyle açıklanabilecek istisnai bir durum olarak öne çıkmaktadır.
- ❖ İndentasyon deneyleri, Cu-Ni alaşımları için sertlik ve elastisite modülü değerlerinin her iki yöntemle de hesaplanabildiğini ve moleküler dinamik simülasyon yönteminin farklı metal alaşımlarının mekanik özelliklerinin analizi için doğru ve hızlı bir çözüm olduğunu göstermiştir. Ayrıca, moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde, indentasyon bölgesinde oluşan deformasyonlar, dislokasyonlar ve aglomerasyonlar atomik boyutta adım adım gözlemlenebilirken, laboratuvar ortamında gerçekleştirilen indentasyon deneylerinde bunların gelişimini deney sırasında adım adım gözlemlmek neredeyse imkansızdır. Bu durum moleküler dinamik simülasyon yöntemi ile gerçekleştirilen indentasyon deneylerinin büyük bir avantajıdır.

- ❖ Nanoindentasyon ve moleküler dinamik simülasyonları ile yapılan çalışmalar, Cu-Ni alaşımlarının mekanik özelliklerinin nikel içeriği, uygulanan yük, mikro yapı, yüzey pürüzlülüğü ve üretim koşullarına bağlı olarak önemli farklılıklar gösterdiğini ve bu parametrelerin elastisite modülü ile sertlik değerleri üzerinde belirleyici etkiler yarattığını ortaya koymuştur.
- ❖ Laboratuvar ortamında gerçekleştirilen nanoindentasyon deneylerinde, Al-Si alaşımlarının yüzeylerinde silisyumun heterojen dağılımı, alaşımların yüzey parlatılması, iç yapıdaki stresler ve EDX analizleri sonucunda tespit edilen Mg, Fe ve Ag elementlerinin varlığı, pop-in ve pop-out olaylarını, sertlik ve elastisite modülünü etkilemiştir. MD simülasyonlarında, girinti sonucu eklenen silisyumun plastisiteyi hızlandırarak sertlik değerlerinin azalmasına yol açtığı gözlemlenmiştir. Ayrıca, simülasyon sonuçları, Al-Si alaşımlarının Ångström boyutundaki modellerinin, yük-yer değiştirme eğrilerinde pop-in ve pop-out olaylarının varlığını ve sayısını etkilediğini göstermektedir. Simülasyonlarda, indentasyon ucunun malzeme yüzeyine penetrasyonu sırasında tüm Al-Si alaşımlarında dislokasyonlar gözlemlenirken, özellikle Al-%20Si alaşımında kalıcı dislokasyonlar gözlenmemiştir. Al-%10Si alaşımında ise, girinti deneyleri sırasında genleşme başlamış ve buna bağlı olarak dislokasyon sayısının azaldığı tespit edilmiştir.
- ❖ Moleküler dinamik (MD) simülasyonlarıyla gerçekleştirilen nanoindentasyon analizleri, Al-Si alaşımlarında dislokasyon oluşumu ve mekanik özelliklerin, alaşım içerisindeki silisyum oranına duyarlı olduğunu ortaya koymuştur. Tüm alaşımlarda yükleme sürecinde dislokasyon gözlenmesine rağmen, yalnızca Al-%20Si alaşımında kalıcı dislokasyon oluşumu saptanmamıştır. Artan silisyum içeriği dislokasyon yoğunluğunu azaltırken elastisite modülünde artışa neden olmuş, ancak sertlik değerleri, temas alanındaki yerel yığılmalar, kristal yapıdan amorf yapıya geçiş eğilimi ve atomik düzeyde düzensizliklerin artması, mekanik deformasyonu kolaylaştırarak sertlikte azalmaya yol açmıştır.
- ❖ MD simülasyonlarıyla yapılan indentasyon deneylerinde, Al matrisine artan Si oranına rağmen sertlik değerlerinde gözlemlenen azalma, klasik malzeme bilgisiyle çelişmektedir. Literatürde, Si ilavesinin Al alaşımlarında sert ve gevrek fazlar oluşturarak sertliği artırdığına dair bulgular bulunmasına karşın, simülasyon sonuçlarında bu eğilim tersine bir davranış sergilemiştir. Bu çelişki, artan Si oranıyla birlikte atomik yapıda meydana gelen bozulmaların kristal yapıyı

zayıflatarak amorf yapıya geçişe yol açmasıyla açıklanabilir. Ayrıca, MD simülasyonları gerçek üretim sürecindeki mikroyapısal özellikleri—Si partikül çökelmeleri, faz sınırları ve katılaşma davranışları gibi—tam anlamıyla yansıtamadığından, bu durum sertlik değerlerinin beklenenden düşük çıkmasına neden olmuştur. Sonuç olarak, MD simülasyonlarında gözlemlenen sertlik azalması, deneysel bulgularla uyumsuz olmakla birlikte, simülasyonun atomistik sınırlamaları çerçevesinde anlaşılabilir ve açıklanabilir bir sonuçtur.

- ❖ [100] kristalografik yönelime sahip tek kristalli silisyum (Si) elementi üzerinde gerçekleştirilen nanoindentasyon deneyleri, 5000 μN yük altında pop-in ve pop-out olaylarının gözlenmediğini, ancak girinti yükünün 10000 μN 'a yükseldiğinde bu olayların ortaya çıktığı ve bu olayların boşaltma sırasında geçen süreye bağlı olduğu görülmüştür.

5.2. Öneriler

- ❖ Döküm yöntemi ile üretilen Cu-Ni ve Al-Si alaşımlarının mekanik özelliklerinin doğru sonuçlar vermesi için, elektrolitik saflaştırma yöntemi önerilmektedir. Bu yöntem, alaşımları oluşturan temel elementlerin dışında bulunan farklı elementlerin varlığını minimize ederek mekanik özelliklerin daha doğru sonuçlar vermesine yardımcı olabilir. Ayrıca, elektrolitik saflaştırma yöntemi, MD simülasyon sonuçlarıyla çok yakın sonuçlar elde edilmesini sağlayabilir. Dolayısıyla, bu yöntem kullanılarak daha homojen ve istenilen özelliklere sahip alaşımlar üretilebilir.
- ❖ MD simülasyonlarda kullanılan potansiyel enerjilerin tekrar YFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi) ile hesaplanarak Al-%15Si ve Al-%20Si hacim genişlemesinin analizi yapılmalıdır. Bu, simülasyon sonuçlarının daha tutarlı hale gelmesini sağlayabilir.
- ❖ Metal alaşımların yüzey pürüzlülükleri giderilirken kullanılan yöntemlerin alaşımların iç yapısında stres oluşturmaması için yenilikçi yüzey işleme teknikleri ve işlem parametrelerinin optimizasyonu üzerine odaklanılmalıdır.

6. KAYNAKLAR

- Abboud , J., & Mazumder , J. (2020). Developing of nano sized fibrous eutectic silicon in hypereutectic Al–Si alloy by laser remelting. *Scientific Reports*, 28(12090).
- Abu Al-Rub, , R. K., & Voyiadjis, G. Z. (2004). Analytical and experimental determination of the material intrinsic length scale of strain gradient plasticity theory from micro- and nano-indentation experiments. *International Journal of Plasticity*, 20(6), 1139-1182.
- Abu Al-Rub, R. K., & Voyiadjis, G. Z. (2006). A physically based gradient plasticity theory. *International Journal of Plasticity*, 22(4), 654-684.
- Ahmed , N., Ahmed , R., Rafiqe , M., & Baig, M. A. (2016). A comparative study of Cu–Ni Alloy using LIBS, LA-TOF, EDX, and XRF. *Laser and Particle Beams*, 35(1).
- Akyüz , B., & Şenaysoy , S. (2016). Alüminyum Alaşımlarında Yaşlandırma İşleminin Mekanik Özellikler ve İşlenebilirlik Üzerindeki Etkisi. *Bilecik Seyh Edebali University Journal of Science*, 1(1), 1-9.
- Alcalá, J., Dalmau, R., Franke, O., Biener, M., Biener, J., & Hodge , A. (2012). Planar Defect Nucleation and Annihilation Mechanisms in Nanocontact Plasticity of Metal Surfaces. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 109(075502).
- Alhafez, I. A., Ruestes, C. J., Gao, Y., & Urbassek, H. M. (2016). Nanoindentation of hcp metals: a comparative simulation study of the evolution of dislocation networks. *Nanotechnology*, 27(045706).
- Amirkhizi, A. V., & Nemat-Nasser, S. (2007). A framework for numerical integration of crystal elasto-plastic constitutive equations compatible with explicit finite element codes. *International Journal of Plasticity*, 23(10-11), 918-1937.
- Asaro, R. J., & Needleman, A. (1985). Overview no. 42 Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metallurgica*, 33(6), 923-953.
- Asenjo, A., Jaafar, M., Carrasco, E., & Rojo, J. M. (2006). Dislocation mechanisms in the first stage of plasticity of nanoindented Au(111) surfaces. *PHYSICAL REVIEW B*, 73(7).
- Baheti, V. A., Islam, S., Kumar, P., Ravi, R., Narayanan, R., Hongqun, D., . . . Paul, A. (2016). Effect of Ni content on the diffusion-controlled growth of the product phases in the Cu(Ni)–Sn system. *Philosophical Magazine*, 96(1), 15-30.
- Bahr , D. F., Kramer, D. E., & Gerberich, W. W. (1998). Non-linear deformation mechanisms during nanoindentation. *Acta Materialia*, 46(10), 3605-3617.
- Banovic, S. W., Barmak, K., & Marder, A. R. (1998). Microstructural characterization and hardness of electrodeposited nickel coatings from a sulphamate bath. *Journal of Materials Science*, 33, 639–645.

- Bassani , J. L., & Wu, T.-Y. (1991). Latent hardening in single crystals. II. Analytical characterization and predictions. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, 435(1893).
- Bhattacharya, S., Riahi, A. R., & Alpas, A. T. (2009). Indentation-induced subsurface damage in silicon particles of Al–Si alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 527(1-2), 387-396.
- Bochicchio , D., & Ferrando, R. (2013). Morphological instability of core-shell metallic nanoparticles. *PHYSICAL REVIEW B*, 87(16).
- Bolshakov , A., & Pharr, G. M. (1998). Influences of pileup on the measurement of mechanical properties by load and depth sensing indentation techniques. *Journal of Materials Research*, 13(4), 1049 - 1058.
- Bouzakis , K.-D., Michailidis , N., & Erkens, G. (2001). Thin hard coatings stress–strain curve determination through a FEM supported evaluation of nanoindentation test results. *Surface and Coatings Technology*, 142–144, 102-109.
- Brückmann, G., Sick , G., & Schwerdtfeger, K. (1983). Slag movement in ESR of steel. *Metallurgical Transactions B*, 14, 761–764.
- Buffière, J.-Y., Savelli , S., Jouneau , P. H., Maire, E., & Fougères , R. (2001). Experimental study of porosity and its relation to fatigue mechanisms of model Al–Si7–Mg0.3 cast Al alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 316(1-2), 115-126.
- Busso , E. P., & McClintock , F. A. (12, Issue 1, 1996, Pages 1-28). A dislocation mechanics-based crystallographic model of a B2-type intermetallic alloy. *International Journal of Plasticity*, 12(1), 1-28.
- Busso, E. P., & Cailletaud, G. (2003). On the numerical implementation of non-smooth domains. Part I: Rate-dependent formulations. *Journal de Physique Archives*, 105, 255-262.
- Busso, E. P., & Cailletaud, G. (2005). On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, 21(11), 2212-2231.
- Cambridge, U. o. (2022, 02 11). *Dissemination of IT for the Promotion of Materials Science*. Dissemination of IT for the Promotion of Materials Science (DoITPoMS): https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/printall.php
adresinden alındı
- Cao , Z. H., Sun , W., Yang , X. B., Zhao , J. W., Ma , Y. J., & Meng , X. K. (2018). Intersectant coherent twin boundaries governed strong strain hardening behavior in nanocrystalline Cu. *International Journal of Plasticity*, 103, 81-94.
- Casals, O., & Alcalá, J. (2005). The duality in mechanical property extractions from Vickers and Berkovich instrumented indentation experiments. *Acta Materialia*, 53(13), 3545-3561.

- Chang, L., & Zhang, L. C. (2009). Deformation mechanisms at pop-out in monocrystalline silicon under nanoindentation. *Acta Materialia*, 57(7), 2148-2153 .
- Chen , C. -L., Richter , A., & Thomson, R. C. (2010). Investigation of mechanical properties of intermetallic phases in multi-component Al–Si alloys using hot-stage nanoindentation. *Intermetallics*, 18(4), 499-508.
- Chen, J., Shi, J., Wang, Y., Sun, J., Han, J., Sun, K., & Fang, L. (2018). Nanoindentation and deformation behaviors of silicon covered with amorphous SiO₂: a molecular dynamic study. *Royal Society of Chemistry*, 8, 12597-12607.
- Cheong , K. S., Busso , E. P., & Arsenlis , A. (2005). A study of microstructural length scale effects on the behaviour of FCC polycrystals using strain gradient concepts. *International Journal of Plasticity*, 21(9), 1797-1814.
- Cheong, W. D., & Zhang, L. C. (2000). Molecular dynamics simulation of phase transformations in silicon monocrystals due to nano-indentation. *Nanotechnology*, 11(3).
- Cho , M. H., Kim , S. J., Lim, D. -S., & Jang , H. (2005). Atomic scale stick-slip caused by dislocation nucleation and propagation during scratching of a Cu substrate with a nanoindenter: a molecular dynamics simulation. *Wear*, 259(7-12), 1392-1399.
- Chrobak, D., Tymiak, N., Beaber, A., Ugurlu, O., Gerberich , W. W., & Nowak , R. (2011). Deconfinement leads to changes in the nanoscale plasticity of silicon. *Nature Nanotechnology*, 6, 480-484.
- Chudoba, T., Schwaller, P., Rabe, R., Breguet, J. -M., & Michler, J. (2006). Comparison of nanoindentation results obtained with Berkovich and cube-corner indenters. *Philosophical Magazine*, 86(33-35).
- Clayton , J. D., & McDowell, D. L. (2003). A multiscale multiplicative decomposition for elastoplasticity of polycrystals. *International Journal of Plasticity*, 19(9), 1401-1444.
- Corcoran, S. G., Colton, R. J., Lilleodden, E. T., & Gerberich , W. W. (1997). Anomalous plastic deformation at surfaces: Nanoindentation of gold single crystals. *PHYSICAL REVIEW B*, 55(24).
- Dabayeh, A. A., Xu, R. X., Du, B. P., & Topper, T. H. (1996). Fatigue of cast aluminium alloys under constant and variable-amplitude loading. *International Journal of Fatigue*, 18(2), 95-104.
- Dai, H., Zhang, F., Zhou , Y., & Chen , J. (2019). Numerical study of three-body diamond abrasive nanoindentation of single-crystal Si by molecular dynamics simulation. *Applied Physics A*, 125(348).
- Dao, M., Lu , L., Asaro , R. J., De Hosson , J. M., & Ma, E. (2007). Toward a quantitative understanding of mechanical behavior of nanocrystalline metals. *Acta Materialia*, 55(12), 4041-4065.

- Daw , M. S., & Baskes, M. I. (1984). Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *PHYSICAL REVIEW B*, 29(12).
- Delobelle , P., Fribourg-Blanc , E., & R miens , D. (2006). Mechanical properties determined by nanoindentation tests of [Pb(Zr,Ti)O₃] and [Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})_{1-x}Ti_xO₃] sputtered thin films. *Thin Solid Films*, 515(4), 1385-1393.
- Deng, L., Liu, Q., Wang , X., & Li , J. (2018). Load drop and hardness drop during nanoindentation on single-crystal copper investigated by molecular dynamics. *Applied Physics A*, 124(743).
- Doerner, M. F., & Nix., W. D. (1986). A method for interpreting the data from Depth-sensing Indentation. *Journal of Materials Research*, 1(4).
- Dorgan, R. J., & Voyiadjis, G. Z. (2003). Nonlocal dislocation based plasticity incorporating gradients of hardening. *Mechanics of Materials*, 35(8), 721-732.
- Douglas, R. P., Morrissey, L., & Nakhla, S. (2020). Molecular dynamics simulations of nanoindentation – the importance of force field choice on the predicted elastic modulus of FCC aluminum. *Molecular Simulation*, 46(12), 923-931.
- Duxson , P., Mallicoat , S. W., Lukey, G. C., Kriven , W., & van Deventer, J. J. (2007). The effect of alkali and Si/Al ratio on the development of mechanical properties of metakaolin-based geopolymers. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 292(1,5), 8-10.
- Ehtemam-Haghighi, S., Cao , G., & Zhang, L.-C. (2017). Nanoindentation study of mechanical properties of Ti based alloys with Fe and Ta additions. *Journal of Alloys and Compounds*, 692, 892-897.
- Endoh, K., Ii, S., Kimura, Y., Sasaki, T., Goto, S., Yokota, T., & Ohmura, T. (2021). Effects of Grain Boundary Geometry and Boron Addition on the Local Mechanical Behavior of Interstitial-Free (IF) Steels. *MATERIALS TRANSACTIONS*, 62(10), 1479-1488.
- Engelbreton, J. S., Morgan, J. S., Honke, K., & Vog, M. (2021). TI 950 TriboIndenter User Manual. Nebraska, Lincoln.
- Fazeli, S., & Sadrnezhaad , S. K. (2019). Molecular dynamics simulation of plastic deformation and interfacial delamination of NiTi/Ag bilayer by cyclic-nanoindentation: Effects of crystallographic orientation of substrate. *Computational Materials Science*, 168, 229-245.
- Fischer-Cripps, A. C. (tarih yok). Examples of Nanoindentation Testing. A. Fischer-Cripps i inde, *Mechanical Engineering Series* (s. 159–173). New York: Springer.

- Fivel , M. C., Robertson , C. F., Canova , G. R., & Boulanger, L. (1998). Three-dimensional modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale. *Acta Materialia*, 46(17), 6183-6194.
- Flom , D. G., & Komanduri, R. (2002). Some indentation and sliding experiments on single crystal and polycrystalline materials. *Wear*, 252(5–6), 401-429.
- Fu, T., Peng, X., Chen, X., Weng, S., Hu, N., Li , Q., & Wang , Z. (2016). Molecular dynamics simulation of nanoindentation on Cu/Ni nanotwinned multilayer films using a spherical indenter. *Scientific Reports*, 6(35665).
- Gao , Y., Ruestes , C. J., Tramontina, D. R., & Urbassek, H. M. (2015). Comparative simulation study of the structure of the plastic zone produced by nanoindentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 75, 58-75.
- GAO, Y. X., YI, J. Z., LEE, P. D., & LINDLEY, T. C. (2004). The effect of porosity on the fatigue life of cast aluminium-silicon alloys. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 27(7), 559-570 .
- Glaser , J., Nguyen , T. D., Ander, J. A., Lui , P., Spiga , F., Millan , J. A., . . . Glotzer , S. C. (2015). Strong scaling of general-purpose molecular dynamics simulations on GPUs. *Computer Physics Communications*, 192, 97-107.
- Goel , S., Beake , B., Chan, C. -W., Faisal , N. H., & Dunne, N. (2015). Twinning anisotropy of tantalum during nanoindentation. *Materials Science and Engineering: A*, 627, 249-261.
- Goel , S., Joshi , S. S., Abdelal, G., & Agrawal, A. (2014). Molecular dynamics simulation of nanoindentation of Fe₃C and Fe₄C. *Materials Science and Engineering: A*, 597, 331-341.
- Goel, S., Faisal, N. H., Luo, X., Yan, J., & Agrawal, A. (2014). Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(27).
- Goel, S., Faisal, N. H., Luo, X., Yan, J., & Agrawal, A. (2014). Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(27).
- Goel, S., Stukowski, A., Luo, X., Agrawal, A., & Reuben, R. L. (2013). Anisotropy of single-crystal 3C–SiC during nanometric cutting. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(6).
- Goldstain, A. (1997). *Handbook of Nanophase Materials*. New York: Marcel Dekker Inc.
- Gong , Y. L., Wen , C. E., Wu , X. X., Ren , S. Y., Cheng , L. P., & Zhu, X. K. (2013). The influence of strain rate, deformation temperature and stacking fault energy on the mechanical properties of Cu alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 583, 199-204.

- Gouldstone , A., Chollacoop , N., Dao, M., Li , J., Minor , A. M., & Shen , Y. -L. (2007). Indentation across size scales and disciplines: Recent developments in experimentation and modeling. *Acta Materialia*, 55(12), 4015-4039.
- Gouldstone, A., Koh , H. -J., Zeng , K. -Y., Giannakopoulos, A. E., & Suresh, S. (2000). Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films. *Acta Materialia*, 48(9), 2277-2295.
- Groot, R. D., & Warren, P. B. (1997). Dissipative particle dynamics: Bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation. *The Journal of Chemical Physics*, 107(11), 4423–4435.
- Gurtin , M. E., & Anand, L. (2005). A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part I: Small deformations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(7), 624-1649.
- Gurtin , M. E., & Anand, L. (2005). A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. Part II: Finite deformations. *International Journal of Plasticity*, 21(12), 2297-2318.
- Gurtin , M. E., Anand , L., & Lele, S. P. (2007). Gradient single-crystal plasticity with free energy dependent on dislocation densities. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 55(9), 1853-1878.
- Gwalani , B., Fu, W., Olszta, M., Silverstein, J., Yadav, D. R., Manimunda, P., . . . Devaraj, A. (2021). Lattice misorientation evolution and grain refinement in Al-Si alloys under high-strain shear deformation. *Materialia*, 18.
- Hagelaar, J. A., Bitzek, E., Flipse, C. J., & Gumbsch, P. (2006). Atomistic simulations of the formation and destruction of nanoindentation contacts in tungsten. *PHYSICAL REVIEW B*, 73(4).
- Han , B., Zhang, C., & Shi, M. (2022). Molecular Dynamics Simulations of Nanoindentation of CuNi Alloy. *International Journal of Applied Mechanics*, 14(2).
- Hardesty, F. (1979). properties and selection: Nonferrous alloys and pure metals. *Metals handbook* (s. 133-135.). içinde Ohio: American Society for Metals.
- Hertz, H. (1882). On the Contact of Elastic Solids. *Crelle's Journal*, 92, 156–171.
- Hertz, H. (2009). Ueber die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 1882 (92).
- Hertz, W. (1882). Ueber die Behandlung der Empyeme bei phthisischen Individuen mittelst Punction und permanenter Aspiration. *Dtsch Med Wochenschr* , 8(11), 150-151.
- Hill, R., & Rice, J. R. (1972). Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 20(6), 401-413.

- Hills, D. A., & Barber, J. R. (2016). KL Johnson and contact mechanics. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 231(13).
- Holian, B. L., & Evans, D. J. (1985). Classical response theory in the Heisenberg picture. *The Journal of Chemical Physics*, 83, 3560–3566.
- Hoover, W. G. (1985). Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *PHYSICAL REVIEW A*, 31(3).
- Hsiu-Pin Chen, H. -P., Kalia, R. V., Nakano, A., Vashishta, P., & Szlufarska, I. (tarih yok). Multimillion-atom nanoindentation simulation of crystalline silicon carbide: Orientation dependence and anisotropic pileup. *Journal of Applied Physics*, 102(6).
- Huang , J., Liu , Y., Yu , X., Huang , Y., Liu , G., Huang, Z., & Fan, D. (2021). Nano mechanical property analysis of single crystal copper using Berkovich nano indenter and molecular dynamic simulation. *Computational Materials Science*, 188.
- Huang , Y., Zhang, F., Hwang , K. C., Nix, W. D., Pharr , G. M., & Feng , G. (2006). A model of size effects in nano-indentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(8), 1668-1686.
- Huang, S., & Zhou , C. (2017). Modeling and Simulation of Nanoindentation. *JOM*, 69, 256–2263.
- Huang, X., Nohava, J., Zhang, B., & Ramirez, A. G. (2011). Nanoindentation of NiTi shape memory thin films at elevated temperatures. *International Journal of Smart and Nano Materials*, 2(1), 39-49.
- Hutchinson, J. W. (1976). Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 348, 01–127.
- Izvekov , S., & Voth, G. A. (2005). A Multiscale Coarse-Graining Method for Biomolecular Systems. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(7), 2469–2473.
- Jiang , W. H., Liu , F. X., Wang , Y. D., Zhang, H. F., Choo , H., & Liaw , P. K. (2006). Comparison of mechanical behavior between bulk and ribbon Cu-based metallic glasses. *Materials Science and Engineering: A*, 430(1-2), 350-354.
- Jin , K., Lu , C., Wang , L. M., Qu , J., Weber, W. J., Zhang , Y., & Bei , H. (2016). Effects of compositional complexity on the ion-irradiation induced swelling and hardening in Ni-containing equiatomic alloys. *Scripta Materialia*, 119, 65-70.
- Jin , K., Xia , Y., Crespillo , M., Xue, H., Zhang , Y., Gao , Y. F., & Bei, H. (2018). Quantifying early stage irradiation damage from nanoindentation pop-in tests. *Scripta Materialia*, 157, 49-53.

- Ju, S. -P., Wang, C. -T., Chien, C. -H., Huang, J. C., & Jian, S. -R. (2007). The nanoindentation responses of nickel surfaces with different crystal orientations. *Molecular Simulation*, 33(11).
- Juliano , T., Gogotsi , Y., & Domnich, V. (2011). Effect of indentation unloading conditions on phase transformation induced events in silicon. *Journal of Materials Research*, 18(5), 1192 - 1201.
- Juliano, T., Domnich , V., & Gogotsi , Y. (2004). Examining pressure-induced phase transformations in silicon by spherical indentation and Raman spectroscopy: A statistical study. *Journal of Materials Research*, 19, 3099–3108.
- Kahrıman, F. (2018). Zirkonyum ile modifiye edilmiş EN AW 6082 alüminyum alaşıımının çökelme ve yeniden kristallenme kinetiklerinin incelenmesi.
- Kalidindi, S. R., Bronkhorst, C. A., & Anand, L. (1992). Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 40(3), 537-569.
- Kear, G., Barker, B. D., Stokes , K., & Walsh , F. C. (2004). Electrochemical Corrosion Behaviour of 90—10 Cu—Ni Alloy in Chloride-Based Electrolytes. *Journal of Applied Electrochemistry*, 34, 659–669.
- Kelchner, C. L., Plimpton, S. J., & Ham, J. C. (1998). Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *PHYSICAL REVIEW B*, 58(17-1).
- Khan, M. Y., Brown, L. M., & Chaudhri, M. M. (1992). Purpose-led Publishing, find out more. The effect of crystal orientation on the indentation cracking and hardness of MgO single crystals. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 25(1A).
- Kim, D. E., & Oh, S. I. (2006). Atomistic simulation of structural phase transformations in monocrystalline silicon induced by nanoindentation. *Nanotechnology*, 17(9).
- King, R. B. (1987). Elastic analysis of some punch problems for a layered medium. *International Journal of Solids and Structures*, 23(12), 1657-1664.
- Kizler , P., & Schmauder , S. (2007). Simulation of the nanoindentation of hard metal carbide layer systems – the case of nanostructured ultra-hard carbide layer systems. *Computational Materials Science*, 39(1), 205-213.
- Komanduri, R., Chandrasekaran, N., & Raff, L. M. (2000). MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum. *Wear*, 240(1-2), 113-143.
- Kondo, K., Kurihara, H., & Mura, H. (2005). Etching Morphology of Single-Crystal Copper. *Electrochemical and Solid-State Letters*, 9(2).
- Kong, S., Li, J., & Zhang, Z. (2023). Molecular Dynamics Simulation of Solution Strengthening of Si and Cu Atoms in Aluminum Alloy. *Basic Solid State Physics*, 260(9).

- Kulej, E., Kucharska, B., Pyka, G., & Gwoździk, M. (2011). Characterization of the surface topography and nano-hardness of Cu/Ni multilayer structures. *Central European Journal of Physics*, 1421–1425.
- Kum, O. (2005). Orientation effects of elastic–plastic deformation at surfaces: nanoindentation of nickel single crystals. *Molecular Simulation*, 31(2-3), 115-121.
- Kumar, N. N., Tewari, R., Durgaprasad, P. V., Dutta, B. K., & Dey, G. K. (2013). Active slip systems in bcc iron during nanoindentation: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 77, 260-263.
- La Parola, V., Deganello, G., Scirè, S., & Venezia, A. M. (2003). Effect of the Al/Si atomic ratio on surface and structural properties of sol–gel prepared aluminosilicates. *Journal of Solid State Chemistry*, 2(172), 482-488.
- Lados, D. A., & Apelian, D. (2004). Fatigue crack growth characteristics in cast Al–Si–Mg alloys: Part II. Life predictions using fatigue crack growth data. *Materials Science and Engineering: A*, 385(1-2), 187-199.
- Lai, M., Zhang, X. D., & Fang, F. Z. (2012). Study on critical rake angle in nanometric cutting. *Applied Physics A*, 108, 809–818.
- Lan, H., & Liu, C. (2013). The hardness of amorphous Si-DLC films by molecular dynamics simulations. *Journal of Wuhan University of Technology-Mater. Sci. Ed.*, 28, 444–448.
- Laursen, C. M., Peter, N. J., Gerstein, G., Maier, H. J., Dehm, G., & Frick, C. P. (2020). Influence of Ti₃Ni₄ precipitates on the indentation-induced two-way shape-memory effect in Nickel-Titanium. *Materials Science and Engineering: A*, 792.
- Leach, A. R. (2001). Molecular modelling: principles and applications. . *Pearson education*.
- Lee, W. B., To, S., & Cheung, C. F. (2000). Effect of crystallographic orientation in diamond turning of copper single crystals. *Scripta Materialia*, 42(10), 937-945.
- LEE, C., WEI, X., KYSAR, J. W., & HONE, J. (tarih yok). Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science*, 321(5887), 385-388 .
- Li, J., Lu, B., Zhang, Y., Zhou, H., Hu, G., & Xia, R. (2020). Nanoindentation response of nanocrystalline copper via molecular dynamics: Grain-size effect. *Materials Chemistry and Physics*, 241(122391).
- Li, C., Sha, G., Gun, B., Xia, J. H., Liu, X. F., Wu, Y. Y., . . . Ringer, S. P. (2013). Enhanced age-hardening response of Al–4Mg–1Cu (wt.%) microalloyed with Ag and Si. *Scripta Materialia*, 68(11), 857-860.

- Li, N., Liu, L., Chen, Q., Pan, J., & Chan, K. C. (2007). The effect of free volume on the deformation behaviour of a Zr-based metallic glass under nanoindentation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40(19).
- Li, Y., Siegel, D. J., Adams, J. B., & Liu, X.-Y. (2003). Embedded-atom-method tantalum potential developed by the force-matching method. *PHYSICAL REVIEW B*, 67(12).
- Liang, H., Woo, C. H., Huang, H., Ngan, A. W., & Yu, T. X. (2004). Crystalline plasticity on copper (001),(110), and (111) surfaces during nanoindentation. *COMPUTER MODELING IN ENGINEERING AND SCIENCES*, 6, 105-114.
- Lilleodden, E. T., Zimmerman, J. A., Foiles, S. M., & Nix, W. D. (2003). Atomistic simulations of elastic deformation and dislocation nucleation during nanoindentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(5), 901-920.
- Lim, Y. Y., Bushby, A. J., & Chau, M. M. (1998). Nano and Macro Indentation Studies of Polycrystalline Copper Using Spherical Indenters. *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, 522(145).
- Lim, Y. Y., & Chaudhri, M. M. (1999). The effect of the indenter load on the nanohardness of ductile metals: An experimental study on polycrystalline work-hardened and annealed oxygen-free copper. *Philosophical Magazine A*, 79(12), 2979-3000.
- Lim, Y. Y., & Chaudhri, M. M. (2002). The influence of grain size on the indentation hardness of high-purity copper and aluminium. *Philosophical Magazine A*, 82(10).
- LINDER, J., ARVIDSSON, A., & KRON, J. (2006). The influence of porosity on the fatigue strength of high-pressure die cast aluminium. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 29(5), 357-363.
- Liu, Y., Wang, B., Yoshino, M., Roy, S., Lu, H., & Komanduri, R. (2005). Combined numerical simulation and nanoindentation for determining mechanical properties of single crystal copper at mesoscale. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(12), 2718-2741.
- Liu, Z., Zhang, J., He, B., & Zou, Y. (2021). High-speed nanoindentation mapping of a near-alpha titanium alloy made by additive manufacturing. *Journal of Materials Research*, 36, 2223–2234.
- Liveri, V. T. (2006). Controlled Synthesis of Nanoparticles in Microheterogeneous Systems. D. J. Lockwood, & U. o. Palermo (Dü.) içinde, *Nanostructure Science and Technology*. Palermo, Viale delle Scienze Parco d'Orleans II - Pad.17, Italy: Department of Physical Chemistry.
- Lodes, M. A., Hartmaier, A., Göken, M., & Durst, K. (2011). Influence of dislocation density on the pop-in behavior and indentation size effect in CaF₂ single crystals: Experiments and molecular dynamics simulations. *Acta Materialia*, 59(11), 4264-4273.

- Lu, L., Dahle, A. K., & StJohn, D. H. (2005). Grain refinement efficiency and mechanism of aluminium carbide in Mg–Al alloys. *Scripta Materialia*, 53(5), 517-522.
- Luo , X., Goel , S., & Reuben, R. L. (2012). A quantitative assessment of nanometric machinability of major polytypes of single crystal silicon carbide. *Journal of the European Ceramic Society*, 32(12), 3423-3434.
- Luu , H.-T., Dang , S.-L., & Hoang, T.-V. (2021). Molecular dynamics simulation of nanoindentation in Al and Fe: On the influence of system characteristics. *Applied Surface Science*, 551.
- Ma, D. J., Wang, J. L., Sun, L., & Huang, Y. (2016). Method for Identifying Vickers Hardness by Instrumented Indentation Curves with Berkovich/Vickers Indenter. *Experimental Mechanics*, 56, 891-901.
- Ma, X.-L., & Yang, W. (2003). Purpose-led Publishing, find out more. Molecular dynamics simulation on burst and arrest of stacking faults in nanocrystalline Cu under nanoindentation. *Nanotechnology*, 14(11).
- Man , T., Ohmura , T., & Tomota, Y. (2020). The effect of boundary or interface on stress-induced martensitic transformation in a Fe-Ni alloy. *Materials Today Communications*, 23.
- Martys , N. S., & Mountain, R. D. (1999). Velocity Verlet algorithm for dissipative-particle-dynamics-based models of suspensions. *PHYSICAL REVIEW E*, 59(3).
- Mathew , J., Mandal , A., Kumar, S. D., Bajpai, S., Chakraborty , M., West, G. D., & Srirangam, P. (2017). Effect of semi-solid forging on microstructure and mechanical properties of in-situ cast Al-Cu-TiB₂ composites. *Journal of Alloys and Compounds*, 712, 460-467.
- Mathew, J., Remy, G., Williams, M. A., Tang , F., & Srirangam , P. (2019). Effect of Fe Intermetallics on Microstructure and Properties of Al-7Si Alloys. *JOM*, 71, 4362–4369.
- Mathew, J., Remy,, G., Williams, M. A., Tang , F., & Srirangam , P. (2019). Effect of Fe Intermetallics on Microstructure and Properties of Al-7Si Alloys. *JOM*, 71, 4362–4369.
- McElhaney , K. W., Vlassak , J. J., & Nix, W. D. (1998). Determination of indenter tip geometry and indentation contact area for depth-sensing indentation experiments. *Journal of Materials Research*, 13(5), 1300-1306.
- Meguid, S. A., Alian , A. R., & Dewapr, M. N. (2017). Atomistic Modelling of Nanoindentation of Multilayered Graphene-Reinforced Nanocomposites. *Micromechanics and Nanomechanics of Composite Solids*, 39-70.
- Menčík , J., & Swain , M. V. (1995). Errors associated with depth-sensing microindentation tests. *Journal of Materials Research*, 10, 1491–1501.

- Mendelev, M. I., Han, S., Srolovitz, D. J., Ackland, G. J., Sun, D. Y., & Asta, M. (2003). Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 83(35).
- Meneve, J. L., Smith, J. F., Jennett, N. M., & Saunders, S. J. (1996). Surface mechanical property testing by depth sensing indentation. *Applied Surface Science*, 100-101, 64-68.
- Meng, F., Miyamoto, G., & Furuhashi, T. (2021). Effects of Alloying Elements on Microstructure, Hardness and Growth Rate of Compound Layer in Gaseous-Nitrided Ferritic Alloys. *MATERIALS TRANSACTIONS*, 62(5).
- Meyers, M. A., Mishra, A., & Benson, D. J. (2006). Mechanical properties of nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*, 51(4), 427-556.
- Miller, W. S., Zhuang, L., Bottema, J., Wittebrood, A. J., De Smet, P., Haszler, A., & Vieregge, A. (2000). Recent development in aluminium alloys for the automotive industry. *Materials Science and Engineering: A*, 280(1), 37-49.
- Mishin, Y., Farkas, D., Mehl, M. J., & Papaconstantopoulos, D. A. (1999). Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations. *PHYSICAL REVIEW B*, 59(5).
- Mishra, M., & Szlufarska, I. (2009). Possibility of high-pressure transformation during nanoindentation of SiC. *Acta Materialia*, 57(20), 6156-6165.
- Mishra, P., Bhattacharyya, S. R., & Ghose, D. (2008). Nanoindentation on single-crystal Si modified by 100 keV Cr⁺ implantation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(8), 1629-1634.
- Misra, D. K., Sohn, S. W., Kim, W. T., & Kim, D. H. (2009). Plastic deformation in nanostructured bulk glass composites during nanoindentation. *Intermetallics*, 17(1-2), 11-16.
- Mizushima, I., Chikazawa, M., & Watanabe, T. (1996). Microstructure of Electrodeposited Cu-Ni Binary Alloy Films. *Journal of The Electrochemical Society*, 143(6).
- Mocellin, A., Fougères, R., & Gobin, P. F. (1993). A study of damage under tensile loading in a new Al-Si-Fe alloy processed by the Osprey route. *Journal of Materials Science*, 28, 4855-4861.
- Moharrami, N., & Bull, S. J. (2014). A comparison of nanoindentation pile-up in bulk materials and thin films. *Thin Solid Films*, 572, 189-199.
- Morris, J. R., Bei, H., Pharr, G. M., & George, E. P. (2011). Size Effects and Stochastic Behavior of Nanoindentation Pop In. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 106, 166101.
- Mulliah, D., Kenny, S. D., & Smith, R. (2004). Modeling of stick-slip phenomena using molecular dynamics. *PHYSICAL REVIEW B*, 69(20).

- Mylvaganam, K., Zhang, L. C., Eyben, P., Mody, J., & Vandervorst, W. (2009). Purpose-led Publishing, find out more. Evolution of metastable phases in silicon during nanoindentation: mechanism analysis and experimental verification. *Nanotechnology*, 20(30).
- Nakamachi , E., Xie , C. L., Morimoto , H., Morita , K., & Yokoyama, N. (2002). Formability assessment of FCC aluminum alloy sheet by using elastic/crystalline viscoplastic finite element analysis. *International Journal of Plasticity*, 18(5-6), 617-632.
- Nemat-Nasser, S., & Isaacs , J. B. (1997). Direct measurement of isothermal flow stress of metals at elevated temperatures and high strain rates with application to Ta and Tasingle bondW alloys. *Acta Materialia*, 45(3), 907-919.
- Nemat-Nasser, S., & Kapoor, R. (2001). Deformation behavior of tantalum and a tantalum tungsten alloy. *International Journal of Plasticity*, 17(10), 1351-1366.
- Nickel Alloys.Net*. (2020, September 20). (T. A. Network, Prodüktör, & JLC Electromet Pvt. Ltd.) October 15, 2021 tarihinde alındı
- Nicoletto, G., Konečná, R., Baicchi, P., & Majerová, V. (2007). Casting Porosity and Long-Life Fatigue Strength of a Cast Al-Alloy. *Materials Science Forum*, 567-568), 393-396.
- Niihara, K., Morena , R., & Hasselman , D. H. (1982). Evaluation of K_{Ic} of brittle solids by the indentation method with low crack-to-indent ratios. *Journal of Materials Science Letters*, 1, 13-16.
- Nikanorov , S. P., Volkov , M. P., Gurin , V. N., Burenkov, Y. A., Derkachenko , L. I., Kardashev , B. K., . . . Wilcox , W. R. (2005). Structural and mechanical properties of Al–Si alloys obtained by fast cooling of a levitated melt Author links open overlay panel. *Materials Science and Engineering: A*, 390(1-2), 63-69.
- Nishimura, K., Kalia; , R. K., Nakano; , A., & Vashishta, P. (2008). Nanoindentation hardness anisotropy of alumina crystal: A molecular dynamics study. *Applied Physics Letters*, 92(16).
- Nix , W. D., & Gao, H. (1998). Indentation size effects in crystalline materials: A law for strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(3), 411-425.
- Njeim, E. K., & Bahr, D. F. (2010). Atomistic simulations of nanoindentation in the presence of vacancies. *Scripta Materialia*, 62(8), 598-601.
- Nowak, R., Chrobak, D., Nagao, S., Vodnick, D., Berg, M., Tukiainen , A., & Pessa , M. (2009). An electric current spike linked to nanoscale plasticity. *Nature Nanotechnology*, 287-291.
- Ohmura , T., & Wakeda, M. (2021). Pop-In Phenomenon as a Fundamental Plasticity Probed by Nanoindentation Technique. *Materials* , 14(8).

- Oliver , w. C., & Pharr, G. M. (1992). An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. *Journal of Materials Research*, 7(6), 1564 - 1583.
- Oliver , w. C., & Pharr, G. M. (2004). Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of Materials Research*, 19(1), 3 - 20.
- Pöhl , F., Hardes , C., Scholz , F., & Frenzel , J. (2020). Orientation-Dependent Deformation Behavior of 316L Steel Manufactured by Laser Metal Deposition and Casting under Local Scratch and Indentation Load. *Materials*, 13(7).
- Panda , A. K., Divakar, R., Singh , A., Thirumurugesan, R., & Parameswaran, P. (2021). Molecular dynamics studies on formation of stacking fault tetrahedra in FCC metals. *Computational Materials Science*, 186.
- Park, H. S., Karpov , E. G., Klein , P. A., & Liu, W. K. (2005). Three-dimensional bridging scale analysis of dynamic fracture. *Journal of Computational Physics*, 207(2), 588-609.
- Parks , M. L., Lehoucq , R. B., Plimpton , S. J., & Silling, S. A. (2008). Implementing peridynamics within a molecular dynamics code. *Computer Physics Communications*, 179(11), 777-783.
- Peralta, P., Ledoux, R., Hakik, M., Dickerson, R., & Dickerson , P. (2004). Characterization of surface deformation around vickers indents in monocrystalline materials. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 35, 2247–2255.
- Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1-19.
- Plimpton, S. J., Thompson, A., Moore, S., & Kohlmeyer, A. (2019, 08 07). *LAMMPS Molecular Dynamics Simulator*. (Sandia National Laboratories Temple University) 02 10, 2021 tarihinde LAMMPS: <http://lammps.sandia.gov/bench.html> adresinden alındı
- Poul, V., Wakeda, M., Ameyama, K., Ota-Kawabata, M., & Ohmura, T. (2021). Local Deformation Behavior of the Copper Harmonic Structure near Grain Boundaries Investigated through Nanoindentation. *Materials*, 14(19).
- Pratt, D. R., Morrissey, L. S., & Nakhla, S. (2020). Molecular dynamics simulations of nanoindentation – the importance of force field choice on the predicted elastic modulus of FCC aluminum. *Molecular Simulation* , 923-931.
- Qiu , X., Huang , Y., Nix , W. D., Hwang , K. C., & Gao, H. (2021). Effect of intrinsic lattice resistance in strain gradient plasticity. *Acta Materialia*, 49(19), 3949-3958.

- Qiu, C., Zhu, P., Fang, F., Yuan, D., & Shen, X. (2014). Study of nanoindentation behavior of amorphous alloy using molecular dynamics. *Applied Surface Science*, 305, 101-110.
- Qu, S., Huang, Y., Nix, W. D., Jiang, H., Zhang, F., & Hwang, K. C. (tarih yok). Indenter tip radius effect on the Nix–Gao relation in micro- and nanoindentation hardness experiments. *Journal of Materials Research*, 19(11), 3423 - 3434.
- Qu, S., An, X. H., Yang, H. J., Huang, C. X., Yang, G., Zang, Q. S., . . . Zhang, Z. F. (2009). Microstructural evolution and mechanical properties of Cu–Al alloys subjected to equal channel angular pressing. *Acta Materialia*, 57(5), 1586-1601.
- Qu, S., Huang, Y., Pharr, G. M., & Hwang, K. C. (2006). The indentation size effect in the spherical indentation of iridium: A study via the conventional theory of mechanism-based strain gradient plasticity. *International Journal of Plasticity*, 22(7), 1265-1286.
- Ravelo, R., Germann, T. C., Guerrero, O., An, Q., & Holian, B. L. (2013). Shock-induced plasticity in tantalum single crystals: Interatomic potentials and large-scale molecular-dynamics simulations. *PHYSICAL REVIEW B*, 88(13).
- Remington, T. P., Ruestes, C. J., Bringa, E. M., Remington, B. A., Lu, C. H., Kad, B., & Meyers, M. A. (2014). Plastic deformation in nanoindentation of tantalum: A new mechanism for prismatic loop formation. *Acta Materialia*, 78, 378-393.
- Rohatgi, A., Vecchio, K. S., & Gray, G. T. (2001). A metallographic and quantitative analysis of the influence of stacking fault energy on shock-hardening in Cu and Cu–Al alloys. *Acta Materialia*, 49(3), 27-438.
- Ruestes, C. J., Alhafez, I. A., & Urbassek, H. M. (2017). Atomistic Studies of Nanoindentation—A Review of Recent Advances. *Crystals*, 7(10).
- Ruestes, C. J., Stukowski, A., Tang, Y., Tramontina, D. R., Erhart, P., Remington, B. A., . . . Bringa, E. M. (2014). Atomistic simulation of tantalum nanoindentation: Effects of indenter diameter, penetration velocity, and interatomic potentials on defect mechanisms and evolution. *Materials Science and Engineering: A*, 613, 390-403.
- Ruffell, S., Bradby, J. E., Williams, J. S., & Munro, P. (2007). Formation and growth of nanoindentation-induced high pressure phases in crystalline and amorphous silicon. *Journal of Applied Physics*, 102(6).
- Saraev, D., & Miller, R. E. (2005). Atomistic simulation of nanoindentation into copper multilayers. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13(7).
- Saraev, D., & Miller, R. E. (2005). Atomistic simulation of nanoindentation into copper multilayers. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13(7).

- Saraev, D., & Miller, R. E. (2006). Atomic-scale simulations of nanoindentation-induced plasticity in copper crystals with nanometer-sized nickel coatings. *Acta Materialia*, 54(1), 33-45.
- SCHNEIDER, G. A., & FETT, T. (2006). Computation of the Stress Intensity Factor and COD for Submicron Sized Indentation Cracks. *Journal of the Ceramic Society*, 114, 1044-1048.
- Schuh, C. A. (2006). Nanoindentation studies of materials. *Materials Today*, 9(5), 32-40.
- Schuh, C. A., Mason, J. K., & Lund, A. C. (2005). Quantitative insight into dislocation nucleation from high-temperature nanoindentation experiments. *Nature Materials*, 4, 617-621.
- Sekido, K., Ohmura, T., Zhang, L., Hara, T., & Tsuzaki, K. (2011). The effect of interstitial carbon on the initiation of plastic deformation of steels. *Materials Science and Engineering: A*, 530, 396-401.
- Senftle, T. P., Hong, S., Islam, M. M., Kylasa, S. B., Zheng, Y., Shin, Y. K., . . . Van Duin, A. T. (2016). The ReaxFF reactive force-field: development, applications and future directions. *npj Computational Materials*, 2.
- Sidiropoulos, A. D., Herea, E., Konstantinidis, A. A., & Aifantis, E. (2017). Pop-in” and “pop-out” effect in monocrystalline silicon. A statistical investigation. *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*.
- Sinnott, S. B., Heo, S.-J., Brenner, D. W., Harrison, J. A., & Irving, D. L. (2017). Computer Simulations of Nanometer-Scale Indentation and Friction. *Nanotribology and Nanomechanics*, 301–370.
- Skandar, B., & Patrick, D. (2011). Elastic and Inelastic Properties of Electroplated Nickel Used in LIGA Techniques. *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, 657.
- Slattery, B. E., Perry, T., & Edrissy, A. (2009). Microstructural evolution of a eutectic Al–Si engine subjected to severe running conditions. *Materials Science and Engineering: A*, 512(1-2), 76-81.
- Smith, J. F., & Zheng, S. (2000). High temperature nanoscale mechanical property measurements. *Surface Engineering*, 16(2).
- Smith, G. S., Tadmor, E. B., Bernstein, N., & Kaxiras, E. (2001). Multiscale simulations of silicon nanoindentation. *Acta Materialia*, 49(19), 4089-4101.
- Smith, W. F., & Hashemi, J. (2006). Solidification and Crystalline Imperfection. W. F. Smith, & J. Hashemi içinde, *Foundations of materials science and engineering*.
- Sonsino, C. M., & Ziese, J. (1993). Fatigue strength and applications of cast aluminium alloys with different degrees of porosity. *International Journal of Fatigue*, 15(2), 75-84.

- Steenberge , N. V., Sort , J., Concustell , A., Das , J., Scudino, S., Suriñach , S., . . . Baró , M. D. (2007). Dynamic softening and indentation size effect in a Zr-based bulk glass-forming alloy. *Scripta Materialia*, 56(7), 605-608.
- Stelmashenko, N. A., Walls , M. G., Brown, L. M., & Milman, Y. V. (1993). Microindentations on W and Mo oriented single crystals: An STM study. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41(10), 2855-2865.
- Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1).
- Stukowski, A., Bulatov, V. V., & Arsenlis, A. (2012). Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 20(8).
- Sun , W., Jiang , Y., Sun , G., Hu , J., Zhou, T., Jiang , Z., & Lian, J. (2019). Nanoindentation creep behavior and its relation to activation volume and strain rate sensitivity of nanocrystalline Cu. *Materials Science and Engineering: A*, 751, 35-41.
- Sun, D. Y., Mendelev, M. I., Becker, C. A., Kudin, K., Haxhimali, T., Asta, M., . . . Srolovitz, D. J. (2006). Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg. *PHYSICAL REVIEW B*, 73(2).
- Sun, J., Xu, B., Zhuo, X., Han, J., Yang, Z., Jiang, J., . . . Chu, P. K. (2020). Investigation of Indenter-Size-Dependent Nanoplasticity of Silicon by Molecular Dynamics Simulation. *ACS Applied Electronic Materials*, 2(9), 3039-3047.
- Szczerba , M. J., & Szczerba, M. S. (2017). Slip versus twinning in low and very low stacking-fault energy Cu-Al alloy single crystals. *Acta Materialia*, 133, 109-119.
- Szlufarska, I., Kalia, R. K., Nakano, A., & Vashishta, P. (2005). Atomistic mechanisms of amorphization during nanoindentation of SiC: A molecular dynamics study. *PHYSICAL REVIEW B*, 71(17).
- Szlufarska, I., Kalia, R. K., Nakano; , A., & Vashishta, P. (2007). A molecular dynamics study of nanoindentation of amorphous silicon carbide. *Journal of Applied Physics*, 102(2).
- Tanaka , M., Morikawa, T., Yoshiok, S., Takashima, K., & Kaneko, S. (2022). Inhomogeneity of Plastic Deformation after Yielding in Low-carbon Martensitic Steels. *ISIJ International*, 62(2).
- Thurn , J., & Cook, R. F. (2002). Simplified Area Function for Sharp Indenter Tips in Depth-sensing Indentation. *Journal of Materials Research*, 17(5), 1143 - 1146.
- Tian , Y. Z., Zhao, L. J., Park, N., Liu, R., Zhang, P., Zhang, Z. J., . . . Tsuji, N. (2016). Revealing the deformation mechanisms of Cu–Al alloys with high strength and good ductility. *Acta Materialia*, 110, 61-72.

- Tsuru, T., & Shibutani, Y. (2007). Anisotropic effects in elastic and incipient plastic deformation under (001), (110), and (111) nanoindentation of Al and Cu. *PHYSICAL REVIEW B*, 75(3).
- Tupaj, M., Orłowicz, A. W., Mróz, M., Trytek, A., Dolata, A. J., & Dziejczak, A. (tarih yok). A Study on Material Properties of Intermetallic Phases in a Multicomponent Hypereutectic Al-Si Alloy with the Use of Nanoindentation Testing. *Materials*, 13(24).
- Ukwatta, A., & Achuthan, A. (2014). A molecular dynamics (MD) simulation study to investigate the role of existing dislocations on the incipient plasticity under nanoindentation. *Computational Materials Science*, 91, 329-338.
- Van Groenou, A. B., & Kadijk, S. E. (1989). Slip patterns made by sphere indentations on single crystal MnZn ferrite. *Acta Metallurgica*, 37(10), 2613-2624.
- Van Vliet, K. J., Li, J., Zhu, T., Yip, S., & Suresh, S. (2003). Quantifying the early stages of plasticity through nanoscale experiments and simulations. *PHYSICAL REVIEW B*, 67(10).
- VanFleteren, R. (1996). Magnesium for automotive applications. *Advanced Materials & Processes*, 49(5).
- VanLandingham, M. R. (tarih yok). Review of Instrumented Indentation. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 108(4), 249-265.
- Varillas, J., Očenášek, J., Torner, J., & Alcalá, J. (2017). Unraveling deformation mechanisms around FCC and BCC nanocontacts through slip trace and pileup topography analyses. *Acta Materialia*, 431-441.
- Verkhovtsev, A. V., Yakubovich, A. V., Sushko, G. B., Hanauske, M., & Solov'yov, A. V. (2013). Molecular dynamics simulations of the nanoindentation process of titanium crystal. *Computational Materials Science*, 76, 20-26.
- Verlet, L. (1967). Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *PHYSICAL REVIEW JOURNALS ARCHIVE*, 159(1), 98-103.
- Vogl, U. S., Lux, S. F., Das, P., Weber, A., Placke, T., Kostecki, R., & Winter, M. (tarih yok). The Mechanism of SEI Formation on Single Crystal Si(100), Si(110) and Si(111) Electrodes. *Journal of The Electrochemical Society*, 162(12).
- Voyiadjis, G. Z., & Abu Al-Rub, R. K. (2005). Gradient plasticity theory with a variable length scale parameter. *International Journal of Solids and Structures*, 42(14), 3998-4029.
- Wang, J. G., Choi, B. W., Nieh, T. G., & Liu, C. T. (2000). Crystallization and nanoindentation behavior of a bulk Zr-Al-Ti-Cu-Ni amorphous alloy. *Journal of Materials Research*, 15(3), 798-807.

- Wang , L., Bei , H., Li , T. L., Gao , Y. F., George , E. P., & Nieh, T. G. (2011). Determining the activation energies and slip systems for dislocation nucleation in body-centered cubic Mo and face-centered cubic Ni single crystals. *Scripta Materialia*, 65(3), 179-182.
- Wang, C. X., Yu, F. X., Zhao, D. Z., Zhao, X., & Zuo , L. (2013). Effect of Si Content on Deformation Behavior of DC Cast Al-Si Alloys. *Advanced Materials Research*, 652-654, 1080-1083.
- Wang, Q., Fang, Q., Li, J., Tian, Y., & Liu, Y. (2019). Subsurface damage and material removal of Al–Si bilayers under high-speed grinding using molecular dynamics (MD) simulation. *Applied Physics A*, 125(514).
- Wang, S., & Zhao, H. (2020). Low Temperature Nanoindentation: Development and Applications. *Micromachines*, 11(4).
- Wang, Y., Raabe, D., Klüber, C., & Roters, F. (2004). Orientation dependence of nanoindentation pile-up patterns and of nanoindentation microtextures in copper single crystals. *Acta Materialia*, 52(8), 2229-2238.
- Wei, Y., Shu, S., Du, Y., & Zhu, C. (2005). Size, geometry and nonuniformity effects of surface-nanocrystalline aluminum in nanoindentation test. *International Journal of Plasticity*, 21(11), 2089-2106.
- Williams , O. A., Daenen , M., D'Haen, J., Haenen , K., Maes, J., Moshchalkov , V. V., . . . Gruen , D. M. (2006). Comparison of the growth and properties of ultrananocrystalline diamond and nanocrystalline diamond. *Diamond and Related Materials*, 15(4-8), 654-658.
- Wolf, B., & Richter, A. (2003). The concept of differential hardness in depth sensing indentation. *New Journal of Physics*, 5.
- Wu , D., Morris , J. R., & Nieh, T. G. (2015). Effect of tip radius on the incipient plasticity of chromium studied by nanoindentation. *Scripta Materialia*, 94, 52-55.
- Wu, D., & Nieh, T. G. (2014). Incipient plasticity and dislocation nucleation in body-centered cubic chromium. *Materials Science and Engineering: A*, 609, 110-115.
- Xiang , S., Yang, X., Liang, Y., & Wang, L. (tarih yok). Texture Evolution and Nanohardness in Cu-Nb Composite Wires. *Materials*, 14(8).
- Xiao , X., Terentyev , D., Ruiz , A., Zinove, A., Bakaev, A., & Zhurkin, E. E. (2019). High temperature nano-indentation of tungsten: Modelling and experimental validation. *Materials Science and Engineering: A*, 743, 106-113.
- Xiong, K., & Gu, J. (2015). Understanding pop-in phenomena in FeNi₃ nanoindentation. *Intermetallics*, 67, 111-120.
- Xu , S., Wan , Q., Sha , Z., & Li, Z. (2015). Molecular dynamics simulations of nano-indentation and wear of the γ Ti-Al alloy. *Computational Materials Science*, 110, 247-253.

- Yang, M., Huang, J., Zhan, S., Huang, J., Liu, Y., Yuan, W., . . . Zhang, S. (2023). Anisotropy of nanoindentation in copper single crystals under different orientations. *Materials Science and Technology*, 39(16).
- Youn , S. W., Seo, P. K., & Kang, C. G. (2005). A study on nano-deformation behavior of rheo-formed Al–Si alloy based on depth-sensing indentation with three-dimensional surface analysis. *Journal of Materials Processing Technology*, 162-163, 260-266.
- Zamanzade , M., Vehoff , H., & Barno, A. (2013). Effect of chromium on elastic and plastic deformation of Fe₃Al intermetallics. *Intermetallics*, 41(2013), 28-34.
- Zamiri , A., Pourboghrat , F., & Barlat, F. (2007). An effective computational algorithm for rate-independent crystal plasticity based on a single crystal yield surface with an application to tube hydroforming. *International Journal of Plasticity*, 23(7), 1126-1147.
- Zhang , H.-S., & Komvopoulos , K. (2006). Nanoscale Pseudoelasticity of Single-crystal Cu–Al–Ni shape-memory Alloy Induced by Cyclic Nanoindentation. *Journal of Materials Science*, 41, 5021–5024.
- Zhang , J., Begau , C., Geng , L., & Hartmaier, A. (2015). Atomistic investigation of wear mechanisms of a copper bi-crystal. *Wear*, 332–333, 941-948.
- Zhang , L., Liang, M., Feng, Z., Zhang, L., Cao, W., & Wu, G. (2019). Nanoindentation characterization of strengthening mechanism in a high strength ferrite/martensite steel. *Materials Science and Engineering: A*, 745, 144-148.
- Zhang, H. (2019). Experimentally validated multi-scale fracture modelling scheme of cementitious materials. *Materials and Environment*.
- Zhang, J., Sun, T., Yan, Y., & Liang, Y. (2009). Molecular dynamics study of scratching velocity dependency in AFM-based nanometric scratching process. *Materials Science and Engineering: A*, 505(1-2), 65-69.
- Zhao , D. M., Dong , Q. M., Liu , P., Kang , B. X., Huang , J. L., & Jin , Z. H. (2003). Structure and strength of the age hardened Cu–Ni–Si alloy. *Materials Chemistry and Physics*, 79(1), 81-86.
- Zhao, H., Zhang, P., Shi, C., Liu, C., Han, L., Cheng, H., & Ren, L. (2014). Molecular Dynamics Simulation of the Crystal Orientation and Temperature Influences in the Hardness on Monocrystalline Silicon. *Journal of Nanomaterials*.
- Zheng, L., Schmid, A. W., & Lambropoulos, J. C. (2006). Surface effects on Young's modulus and hardness of fused silica by nanoindentation study. *Journal of Materials Science*, 42, 191-198.

- Zhou , A., Liu , X.-B., Wang , Q., & Zhang, S.-Y. (2023). Investigation of nano-tribological behaviors and deformation mechanisms of Cu-Ni alloy by molecular dynamics simulation. *Tribology International*, 180.
- Zhu , T., Li , J., Van Vliet , K. J., Ogata, S., Yip, S., & Suresh, S. (2004). Predictive modeling of nanoindentation-induced homogeneous dislocation nucleation in copper. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(3), 691-724.
- Zhu, Z., Huang , H., Liu, J., Ye, L., & Zhu, Z. (2020). Nanoindentation Study on the Creep Characteristics and Hardness of Ion-Irradiated Alloys. *Materials*, 13(14).
- Ziegenhain, G., & Urbassek, H. M. (2009). Effect of material stiffness on hardness: A computational study based on model potentials. *Philosophical Magazine*, 89(26), 2225-2238.
- Ziegenhain, G., Urbassek, H. M., & Hartmaier, A. (2020). Influence of crystal anisotropy on elastic deformation and onset of plasticity in nanoindentation: A simulational study. *Journal of Applied Physics*, 107(6).
- Zimmerman, J. A., Kelchner, C. L., Klein, P. A., Hamilton, J. C., & Foiles, S. M. (2001). Surface Step Effects on Nanoindentation. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 87(16).