

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**ATOMSAL BAĞLARIN SONLU ELEMANLAR
YÖNTEMİ KULLANILARAK MODELLENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
Makine Mühendisi Volkan AYDINOL**

Anabilim Dalı : İLERİ TEKNOLOJİLER

Programı : MALZEME BİLİMİ ve MÜHENDİSLİĞİ

HAZİRAN 2008

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**ATOMSAL BAĞLARIN SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ
KULLANILARAK MODELLENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Makine Mühendisi Volkan AYDINOL
(521051011)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 28 Nisan 2008
Tezin Savunulduğu Tarih : 5 Haziran 2008

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Gültekin GÖLLER

Eş Danışman : Prof. Dr. Ata MUĞAN

Diğer Jüri Üyeleri : Yrd. Doç. Dr. Levent TRABZON

Yrd. Doç. Dr. Kürşat KAZMANLI

Yrd. Doç. Dr. Özgül KELEŞ

HAZİRAN 2008

ÖNSÖZ

Esasen nano mekanikle ilgili olan bu çalışmada, kovalent bağlı bir kristal olan elmas, nanoskobik seviyede, atom atom, sonlu elemanlar yöntemi ile modellenerek analiz edilmiştir. Ardından, elde edilen model, model derecesi düşürme teknikleri kullanılarak küçültülmüş ve bu yeni modelin orijinal sistemi ne kadar iyi temsil edebildiği araştırılmıştır. Böylece, moleküler dinamik simülasyonları ile analiz edilen sistemlerden daha büyük sistemlerin analiz edilebilmesi sağlanmış olacaktır. Elde edilen sonuçlar deneylerle yüksek uyum içindedir ve çalışma başarı olmuştur.

Böyle bir çalışmayı kabul eden danışmanım Sayın Doç. Dr. Gültekin Göller'e ve tez çalışmam boyunca desteğini hiçbir zaman esirgemeyen Sayın Hocam Prof. Dr. Ata Muğan'a teşekkür eder, saygılarımı sunarım.

En önemlisi, hayatım boyunca hiçbir şeyi benden esirgemeyen aileme sevgi ve şükranlarımı sunarım.

Ülkemize yararlı olması dileğiyle...

Mayıs 2008

Volkan Aydınol

İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR	v
TABLO LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	vii
SEMBOL LİSTESİ	viii
ÖZET	x
SUMMARY	xi
1. GİRİŞ	1
1.1. Nano Teknoloji	1
1.2. Nano Mekanik	2
1.3. Çalışmanın Amacı	3
2. MALZEMELERİN YAPISI VE ELASTİK DAVRANIŞI	5
2.1. Malzemelerin Atomik Yapısı	5
2.1.1. Atomik bağlar	5
2.1.2. Atomik dizilme	7
2.1.2.1. Kristal sistemleri	7
2.1.2.2. Kristallerde yönler	9
2.2. Doğrusal Elastisitenin Temel Kavramları ve Elastik Sabitler	10
2.2.1. Bazı tanımlar	10
2.2.2. Birim şekil değişimi	11
2.2.3. Gerilme	13
2.2.4. Genelleştirilmiş Hooke yasası	14
2.3. Atomik Yapı ve Elastik Sabitler Arasındaki İlişki	16
3. MALZEMELERİN SİMÜLASYONU	18
3.1. Simülasyon Yöntemlerinin Mertebelere Göre Hiyerarşisi	18
3.2. Kuantum Mekaniği Simülasyonları	19
3.3. Moleküler Dinamik Simülasyonları	21
3.3.1. Moleküler dinamiğin temel kavramları	21
3.3.2. Atomik potansiyeller	22
3.3.2.1. İki parçacık potansiyelleri	22
3.3.2.2. Çok parçacık potansiyelleri	24
3.3.3. Moleküler dinamik simülasyonlarının kısıtları	26
3.3.3.1. Klasik mekanik yasalarının kullanımı	26
3.3.3.2. Atomik potansiyelin doğruluğu	26
3.3.3.3. Zaman ve uzunluk kısıtları	26
3.4. Monte Carlo Simülasyonları	27
4. MEKANİK SİSTEMLERİN ANALİZİ VE SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ	28
4.1. Mekanik Sistemlerin Modellenmesi	28
4.2. Hareket Denklemlerinin Çıkarılması	29

4.3. Zaman Cevabı	30
4.4. Sonlu Elemanlar Yöntemi	30
4.4.1. Giriş	30
4.4.2. Sonlu elemanlar yöntemi ile şekil değişimi analizi	31
4.4.3. Kiriş elemanın katılık ve kütle matrisi	36
4.4.4. Mekanik sistemlerde sönüm	38
5. MODEL DERECEŚİ DÜŞÜRME TEKNİKLERİ	40
5.1. Giriş	40
5.2. Statik İndirgeme Tekniğı	42
5.3. Dinamik İndirgeme Tekniğı	43
5.4. Komponent Mod Sentezi Tekniğı	44
6. ELMAS KRİSTALİNİN SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE MODELLENMESİ VE MODEL DERECEŚİNİN DÜŞÜRÜLMESİ	45
6.1. Elmas Kristalinin Yapısı	45
6.2. Elmasın Elastik Sabitleri	45
6.3. Elmas Kristalinin Kiriş Eleman ile Modellenmesi	46
6.3.1. Temel fikir	46
6.3.2. DREIDING atomik potansiyeli	47
6.3.3. Kiriş eleman parametrelerinin elde edilmesi	48
6.3.4. Modelin doğrulanması	49
6.4. Model Derecesinin Düşürülmesi	50
7. SONUÇLAR ve DEĞERLENDİRME	53
7.1. Modelin Doğrulanması: Statik Analiz Sonuçları ve Değerlendirme	53
7.2. Model Derecesinin Düşürülmesi: Dinamik Analiz Sonuçları ve Değerlendirme	54
KAYNAKLAR	56
ÖZGEÇMİŞ	60

KISALTMALAR

DC	: Dynamic Condensation
CMS	: Component Mode Synthesis
GR	: Guyan Reduction
CM	: Constraint modes

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Tablo 2.1 : Kristal Sistemleri	9
Tablo 3.1 : Tersoff Potansiyelinin Karbon Atomu için Parametreleri	24
Tablo 6.1 : Elmasın Elastik Sabitleri	46
Tablo 6.2 : DREIDING Potansiyelinin Karbon Atomu için Parametreleri	47
Tablo 7.1 : Elmasın Mekanik Özellikleri	53
Tablo 7.2 : Statik Analiz Sonuçları	53

ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa No
Şekil 1.1: Eski Mısır, MÖ 1450, Metal İşleme Adımlarını Gösteren Resim	1
Şekil 2.1: (a) Atomik Bağların Bir Yay gibi Hayal Edilmesi (b) Aynı Yükleme için Atomik Dizilmedeki Farklılıkların Malzemenin Elastik Davranışına Etkisi	5
Şekil 2.2: Bravais Kafesleri	8
Şekil 2.3: Kristallerde Yönlerin Gösterilmesi	10
Şekil 2.4: Düzlemde Şekil Değişimi	12
Şekil 2.5: Dış Kuvvetlerin Şekil Değişimine Uğrattığı Bir Elastik Cisim	14
Şekil 2.6: En Genel Halde Gerilme Bileşenleri	14
Şekil 2.7: Atomsal Bağların Malzemenin Elastik Davranışına Etkisi	17
Şekil 3.1: Uzunluk ve Zaman mertebesine göre Simülasyon Yöntemlerinin Sınıflandırılması	19
Şekil 3.2: Lennard-Jones Potansiyeli	23
Şekil 3.3: (a) Bağ Uzunluğu (b) Bağ Açısı (c) Dihedral Açısı (d) Ters Açısı	25
Şekil 4.1: 3 Serbestlik Dereceli Bir Kütle-Yay-Damper Sistemi	29
Şekil 4.2: Sonlu Elemanlar Yönteminin Yapısal Analiz için Akış Şeması	31
Şekil 4.3: (a) Kademeli Ankastre Kiriş (b) Kirişin Parçalara Bölünmesi (c) Genel Eleman Özellikleri	32
Şekil 4.4: Kiriş Elemanının Serbestlik Dereceleri	36
Şekil 6.1: Elmas Kristalinin Yapısı	45
Şekil 6.2: MATLAB Programı Akış Şeması	49
Şekil 6.3: Model Derecesi Düşürme Parametreleri	51
Şekil 6.4: Süper Eleman Analiz Parametreleri	51
Şekil 6.5: ANSYS Analiz Seçenekleri	52
Şekil 6.6: ANSYS Analiz Seçenekleri	52
Şekil 7.1: Derecesi Düşürülmüş Sistemin ve Orijinal Sistemin Basamak Girişi Cevabı	55

SEMBOL LİSTESİ

$\epsilon_{ij}, \gamma_{ij}$	: Birim şekil değişimi bileşenleri
u, v	: Şekil değişimi bileşenleri
α, β	: Açılar
e_{ij}	: Birim şekil değişimi tensörü bileşenleri
σ, τ	: Gerilme bileşenleri
F, N_i, N_{ij}	: Kuvvet bileşenleri
A	: Alan
C_{ijkl}, C_{ij}	: Elastisite tensörü
μ, λ	: Lamé sabitleri
E, G, ν	: Young modülü, kayma modülü, Poisson oranı
U	: Atomik potansiyel
Ψ, E	: Enerji özvektörü ve özdeğeri
r, R	: Elektronların ve çekirdeklerin konumu
H	: Hamiltonian
m_i, c_i, k_i	: Kütle, viskoz sönüm katsayısı ve yay katsayısı
L	: Lagrange
q_i	: Genelleştirilmiş koordinat
V_i	: Atomik potansiyel bileşeni
r_i	: Atom konumu
ϵ, σ	: Lennard-Jones potansiyeli parametreleri
$V_{ij}, f_X(r_{ij})$	: Tersoff potansiyeli parametreleri
a_{ij}, b_{ij}	: Tersoff potansiyeli parametreleri
r, R, D	: Tersoff potansiyeli parametreleri
$\beta^i, \zeta_{ij}, \lambda_i, \eta_{ij}$	: Tersoff potansiyeli parametreleri
a_{ij}, b_{ij}	: Tersoff potansiyeli parametreleri
c, d, h, n	: Tersoff potansiyeli parametreleri
θ, α	: Tersoff potansiyeli parametreleri
i, j, k, l	: Atomlar
M, S, K	: Kütle, sönüm ve katılık matrisi
$\ddot{d}, \dot{d}, d$	: İvme, hız ve konum vektörü
f, f_i	: Kuvvet vektörü, kuvvet bileşeni
n_{sd}	: Serbestlik derecesi
$l^{(i)}$	: Eleman boyu
Φ_i, P_i	: Yer değişimi ve kuvvet
a, b	: Sabitler
Λ	: Eleman şekil değişimi enerjisi
$u_i, v_i, w_i, \theta_{ij}$	: Eleman serbestlik dereceleri
a, c	: Aktif ve çıkarılan serbestlik derecesi indisleri
T	: Dönüşüm matrisi
I_{ij}	: Birim matris

Ψ_{xx}	: İndirgeme matrisi
X^{ind}	: İndirgenmiş matris
Ω	: Harmonik ikaz dairesel frekansı
z	: Genelleştirilmiş ve modal serbestlik dereceleri vektörü
Φ_n	: Normal mod matrisi
ΔR	: Atom yer değiştirme miktarı
K_i, K_{ij}, K_{ijk}	: DREIDING potansiyeli parametreleri
θ_{ijk}, ϕ_{ij}	: DREIDING potansiyeli parametreleri
C_{ijk}, V_{jk}, n_{jk}	: DREIDING potansiyeli parametreleri
U_x	: Şekil değişimi enerjisi
N, M, T	: Kuvvet, eğilme momenti ve burulma momenti
I, J	: Alan atalet momentleri
L, θ, ϕ	: Boy, eğilme açısı ve burulma açısı

ATOMSAL BAĞLARIN SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ KULLANILARAK MODELLENMESİ

ÖZET

Literatürde, malzemelerin nanoskobik seviyede analizleri için yoğun olarak kuantum mekaniği simülasyonları ve moleküler dinamik simülasyonları kullanılmaktadır. Eğer konu malzemelerin mekanik davranışının incelenmesi ise, moleküler dinamik simülasyonları özellikle tercih edilmektedir. Ancak moleküler dinamik simülasyonlarının uzunluk ve zaman boyutlarında temsil edebildikleri fiziksel sistemlerin büyüklükleri göz önüne alındığında birçok mühendislik probleminin incelenmesinde yetersiz kaldığı görülmektedir. Söz konusu sınırların aşılması için, başta “çok mertebeli” (multiscale) simülasyonlar olmak üzere, çeşitli çalışmalara literatürde rastlanmaktadır. İşte bu çalışmanın temel hedefi de, sonlu elemanlar yöntemi ve model derecesi düşürme tekniklerini kullanarak mevcut sınırlar içinde analizi yapılan sistemlerden daha büyük sistemlerin, yine mevcut sınırlar içerisinde modellenip analiz edilebileceğini göstermektir. Bunun için, kovalent bağlı bir kristal olan elmas, basit yapısı, deney verilerinin çokluğu ve mühendislikteki önemli yeri sebebi ile tercih edilmiştir. Çalışma kapsamında çeşitli büyüklüklerdeki elmas kristalleri, atomik bağlar kiriş elemanlarla ve atomlar noktasal kütlelerle ifade edilmek üzere sonlu elemanlar yöntemi ile modellenmiştir. Kiriş parametrelerinin elde edilmesinde DREIDING potansiyelinden yararlanılmıştır. Elde edilen modelin doğruluğu statik çekme analizleri ile gösterilmiştir. Ardından, bu model, komponent mode sentezi (component mode synthesis) model derecesi düşürme tekniği kullanarak küçültülmüş ve bu yeni modelin orijinal sistemi ne kadar iyi temsil edebildiği bir dinamik analizle gösterilmiştir. Modelleme çalışmasının literatürde verilen deneysel sonuçlarla büyük uyum içinde olduğu ve model derecesi düşürme çalışmasının orijinal sistemin büyük başarı ile temsil ettiği gösterilmiştir.

MODELING of ATOMIC BONDS USING FINITE ELEMENT METHOD

SUMMARY

In literature, molecular dynamics simulations and quantum mechanical simulations are frequently used tools for investigating material structure at nano scale. Molecular dynamics simulations are especially used for investigation of mechanical properties of materials at nano scale. However molecular dynamics simulations have certain computational limits in terms of length and time scales. These limits prevents usage of molecular dynamics simulations for investigation of certain type of problems. There exist several multi-scale simulation studies to extend these limits. The goal of this study is to go beyond these limits by employing finite element method and model order reduction method. To this end, firstly, covalent bonded diamond crystal is modeled with frame (beam) elements and point masses where frame elements are used to represent atomic bonds and point masses are used to represent carbon atoms. The diamond is chosen for its simple structure, availability of experimental data, and high importance in engineering applications. Parameters of frame elements are computed from DREIDING atomic potential. Static tension test is conducted to find out if the model estimates the mechanical properties properly. Secondly, component mode synthesis method is employed to reduce the order of this model. A dynamic analysis is carried out to find out if the reduced model represents the original model accurately. It is found out that the finite element model estimates the mechanical properties of diamond excellently and the reduced model represents the original model astonishingly good.

1. GİRİŞ

1.1. Nano Teknoloji

Geçmişten günümüze bütün uygarlıkların teknolojik başarıları, yaşadıkları dönemde mevcut bulunan malzemelerin pratik amaçlarla kullanımına bağlı olmuştur (Şekil 1.1) [1]. “Bakır Devri” ve “Demir Devri” gibi tarih öncesi çağlara verilen isimler, o dönemlerde kullanılan belirli malzemelerin uygarlıklar açısından büyük önemini kanıtlar niteliktedir. Benzer şekilde 20. yüzyılın ikinci yarısının, bazılarınca “silikon çağı” olarak adlandırılması bu malzemenin bilgi teknolojilerinin gelişiminde oynadığı önemli role işaret etmektedir. İnsanlığın genişleyen ufku, talep ve ihtiyaçlarıyla beslenen; birer birer atomların işlenebilmesinden ilham alan malzeme teknolojisi, amansız gelişimini sürdürmektedir [2].



Şekil 1.1: Eski Mısır, MÖ 1450, Metal İşleme Adımlarını Gösteren Resim [1]

Malzeme yapısının ve özelliklerinin kontrol edilebilmesi için kullanılan proses ve karakterizasyon yöntemleri malzeme teknolojisinin özünü teşkil eder. Günümüzde bu proses ve karakterizasyon yöntemleri, malzemeleri atom mertebesinde işleyecek ve inceleyecek seviyeye ulaşmıştır. Srivastava ve Atluri [3] nano teknolojiyi, atom ve moleküllerin doğrudan veya dolaylı olarak işlenerek fonksiyonel yapılara dönüştürülmesi ile ilgilenen bilim ve teknoloji dalı olarak tanımlamıştır.

Etkileyici mekanik özellikleri ve potansiyellerinden dolayı nano malzemeler araştırmacıların giderek daha fazla ilgisini çekmektedir. Arzu edilen makro özellikleri elde edebilmek için, bu malzemelerin tasarımı ve sentezi nanometre mertebesinde yapılmaktadır. Nano teknoloji, nano malzemeler ve nano mekanik

alanında yaşanan bu gelişmeler, savunma sanayisi başta olmak üzere birçok alanda potansiyel uygulamaları mümkün kılmaktadır [4].

Nano teknolojinin genel prensipleri belli olmasına karşın, proseslerin atomik mertebede etkileri ve malzemenin yapısında gerçekleşen farklılaşmanın malzemenin özelliklerinde meydana getirdiği değişiklikler gerekli derinlikte incelenmemiştir. Çeşitli uygulamalar için nano malzeme kullanımına ilişkin tasarım, modelleme ve ömür hesapları gibi konularda standartlaşmış prosedürlerin; nano mertebede boyuta bağlı mekanik ve fonksiyonel özelliklerin testi ve analizi için yöntemlerin ve araçların olmayışı bu gerçeği perçinlemektedir [5].

1.2. Nano Mekanik

Yaklaşık bir yüzyıldır, malzemelerin mekanik davranışını, sürekli ortamlar kabulüne dayanarak açıklayan yöntemler araştırma alanında egemen olmuştur. Bu yöntemler, malzemenin mekanik davranışının kesin olarak bilinmesini gerektirmediğinden, büyük boyutlu yapıtların tasarımında başarılı olmuştur. Birçok başarılı mühendislik tasarımının temelinde, sürekli ortamlar kabulüne dayanan bünye denklemleri vardır. Bünye denklemlerinin dayandığı fiziksel prensiplerin kökü, atomik mertebedeki proseslerin istatistiksel mekaniğidir. Diğer bir deyişle, bünye denklemleri atomik mertebedeki proseslerin termodinamik ortalamasıdır. Yani bu yaklaşımda, atomik mertebedeki bütün olayların (atomların hareketleri, kusurların etkileri vs.) zaman ve uzay boyutunda ortalaması alınmıştır. Bu sayede bünye denklemleri, uzun zaman aralıkları ve büyük boyutlu problemlerde malzeme davranışını yeterli doğrulukta ifade edebilmektedir. Ancak, uzunluk ve zaman boyutlarının mertebesi, nokta kusurları, dislokasyonlar ve tane sınırları gibi tipik kusurların mertebesine yaklaştığında, sürekli ortamlar kabulüne dayanan bünye denklemleri malzeme davranışını ifade etmeye muvaffak olamaz [6].

Son dönemde, atomik kuvvet mikroskobunun icadı ve türevlerinin geliştirilmesi ile birlikte, malzemelerin nano mertebedeki mekanik davranışı giderek daha fazla araştırmacının ilgisini çekmektedir. İşte, mekaniğin bu yeni dalı nano mekanik olarak adlandırılmıştır. Nano mekanik, mekanikteki mevcut kavram ve yöntemleri, malzemenin nano mertebede mekanik davranışını açıklamak için kullanmaya çalışmaktadır [7].

1.3. Çalışmanın Amacı

Daha önce de değinildiği üzere modern malzeme biliminin temel dayanaklarından birisi, belirli bir malzemenin özelliklerinin sadece kimyasal bileşiminden değil büyük oranda yapısından da etkilendiğidir. Bu durum bilhassa da mekanik ve elektromanyetik özellikler için geçerlidir. Bu yüzden çoğu kez “malzeme bilimi” malzeme yapısının araştırılması anlamında kullanılır.

Malzemenin yapısı, mertebesi uzunluk boyutunda nanometreden (yabancı atomlar) metreye (makro düzeyde yüzeyler) kadar değişebilen ve termodinamik denge halinde olmayan kusurların toplamı olarak tanımlanabilir. Bu kusurların zaman boyutundaki dinamikleri ise pikosaniyeden (atomların hareketleri) yıllar mertebesine (korozyon, sürünme, yorulma) kadar uzanabilmektedir. Bu oluşumların makro özelliklere nasıl bağlı olduğunu araştıran malzeme bilimi, yukarıda belirtilen uzunluk mertebelerinde yapıyı modelleyerek nanoskobik, mikroskobik, mezoskobik ve makroskobik modeller oluşturur [8].

Malzeme yapısının niceliksel tariflerine olan talebin, endüstri ve araştırma çevrelerinde giderek artması, ayrıca işlem gücü ve bilgi depolama olanakları anlamında kapasitesi büyük oranda artan bilgisayar sistemleri, malzeme biliminde sayısal yöntemlerin kullanımını giderek artırmaktadır. Örneğin, yaygın olarak kullanılan sonlu elemanlar yönteminin amacı, bilinen başlangıç ve sınır koşullarına tabi adi ya da kısmi diferansiyel denklem sistemlerinin sayısal olarak çözümüdür. Sonlu elemanlar yönteminin malzeme biliminde kullanımı, makro seviyede elastik ve plastik deformasyon problemlerinin çözümü ile başlamıştır. Bu çalışmalar, daha önce de bahsedilen sürekli ortamlar kabulüne dayanan bünye denklemlerini kullanırlar. Ancak bünye denklemlerinin uyarlanması ile bugün sonlu elemanlar yöntemi mezoskobik seviyedeki problemlerin çözümünde kullanılabilir. Sonlu eleman simülasyonlarındaki bu yönelim, makroskobik mertebeden mezoskobik mertebeye doğru bir yönelimi işaret etmektedir [8].

Bu çalışmada, kovalent bağlı bir kristal olan elmas, nanoskobik seviyede, atom atom, sonlu elemanlar yöntemi ile modellenerek analiz edilmiştir. Ardından, elde edilen model, model derecesi düşürme teknikleri kullanılarak küçültülmüş ve bu yeni modelin orijinal sistemi ne kadar iyi temsil edebildiği araştırılmıştır.

Literatürde, nanoskobik seviyede analizler için yoğun olarak, kuantum mekaniği simülasyonları, moleküler dinamik simülasyonları ve “Monte Carlo” simülasyonları kullanılmaktadır. Ancak bu simülasyon yöntemlerinin uzunluk ve zaman boyutlarında temsil edebildikleri fiziksel sistemlerin büyüklükleri sınırlıdır ve bu sınırların aşılması için, başta “çok mertebeli” (multiscale) simülasyonlar olmak üzere, çeşitli çalışmalar yapılmaktadır [4, 6, 9]. Bu çalışmanın temel hedefi de, sonlu elemanlar yöntemi ve model derecesi düşürme tekniklerini kullanılarak daha büyük sistemlerin mevcut sınırlar içerisinde modellenip analiz edilebileceğini göstermektir.

Çalışmanın sonunda, hem orijinal modelin hem de derecesi düşürülmüş modelin fiziksel sistemi (malzemeyi) büyük başarı ile temsil ettiği ve böylece amaca ulaşıldığı gösterilmiştir.

Ana hedefe ek olarak, Muhammed ve Tsakalakos’un [5] bahsettiği ve daha önce de değinilen “nano boyutta analiz için gerekli standartlaşmış araç ve yöntemlerin olmayışı” probleminin çözümü yolunda bir adım atıldığı düşünülmektedir çünkü; model derecesi düşürme tekniklerini bünyesinde barındıran birçok ticari sonlu elemanlar yazılım paketi halihazırda mevcuttur ve geniş kitlelerce başarı ile kullanılmaktadır.

Modellemede sonlu elemanlar yönteminin moleküler dinamik yöntemler yerine başarılı bir şekilde kullanılabileceğinin gösterilmesinin bir olası avantajı da, çok mertebeli simülasyonlarda, konu sistemin büyük boyutlu kısımlarını modellemek için zaten kullanılan sonlu elemanlar ortamının terk edilmeden analizin tamamlanması sağlamak olabilir.

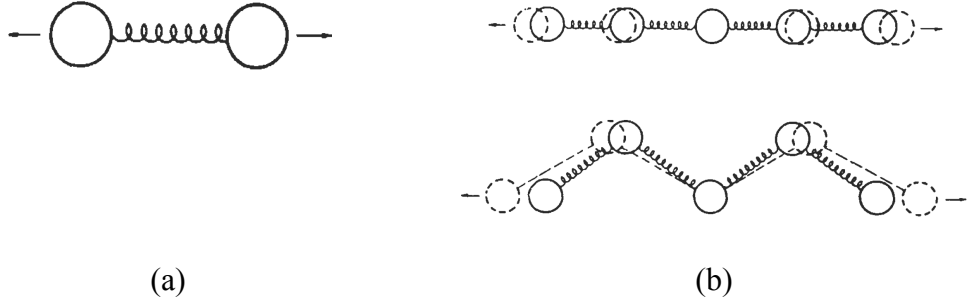
Son olarak, gerekli girdiler sağlanabilirse, kurulan model ve kullanılan analiz teknikleri bütün kovalent bağlı kristallere uygulanabilir. Ayrıca, modellemede yapılacak bazı değişikliklerle iyonik ve metalik kristallerin de analiz edilebileceği düşünülmektedir.

2. MALZEMELERİN YAPISI VE ELASTİK DAVRANIŞI

2.1. Malzemelerin Atomik Yapısı

Young modülü gibi malzemenin elastik sabitlerinin özünü anlayabilmek için malzemeyi atomik seviyede tanımak gereklidir. Malzemenin elastik sabitlerini etkileyen iki önemli faktör vardır [10].

- Atomik bağlar: Atomları bir arada tutan kuvvetlerdir. Atomik bağların yapısını ve malzemenin elastik sabitlerine etkilerini daha iyi anlayabilmek için bunlar küçük bir yay gibi hayal edilebilir (Şekil 2.1a).
- Atomik dizilme: Atomların malzemeyi oluştururken yan yana gelme düzenidir. Elastik sabitler açısından atomik dizilme, birim hacimde kaç adet “yay” olacağını ve atomların birbirlerine hangi doğrultularda kuvvet uygulayacaklarını belirler (Şekil 2.1b).



Şekil 2.1: (a) Atomik Bağların Bir Yay gibi Hayal Edilmesi [10] (b) Aynı Yükleme için Atomik Dizilmedeki Farklılıkların Malzemenin Elastik Davranışına Etkisi [10]

2.1.1. Atomik bağlar

Atomsal bağlar yapıları açısından iki grupta toplanabilir:

- Birincil bağlar: İyonik, kovalent ve metalik bağlar bu gruba girer.
- İkincil bağlar: Van der Walls, hidrojen ve dipol bağları bu gruba girer.

Atomsal bağların bu şekilde gruplanmasıyla ilgili hatırlanması gereken temel nokta, bu tanımların ideal tanımlar olduğu ve gerçekte malzemelerde bulunan bağların

bunların bir karışımı şeklinde ortaya çıktığıdır. Aşağıda bu bağlar kısaca tanıtılmıştır [10, 11].

İyonik bağlar, elektron isteği yüksek bir atomun, iyonlaşma enerjisi düşük bir atomdan bir ya da daha fazla elektronu alması ve her iki atomun da asal gaz elektron dizilimine geçmesi ile meydana gelir. Ortaya çıkan iyonların zıt yüklü olması atomları bir arada tutan kuvveti oluşturur. Bu etkileşim yöne bağlı olmadığından iyonik bağlar yönsüz bağlardır. İyonik bağın en bilinen örneği sofr tuzudur (NaCl).

Kovalent bağlarda, elektron isteği yüksek olan atomlar bir araya gelerek bir ya da daha fazla elektronu paylaşırlar böylece hepsinin elektron dizilimi asal gazlara benzer. Atomları bir arada tutan kuvvet ortak olan elektronlardır. Bu paylaşım elektron orbitallerinin yapısını değiştirerek bağın yönlü bir yapıya sahip olmasına sebep olur. Özellikle elmas ideal kovalent bağa çok yakın bir yapı sergilemektedir.

Metalik bağlarda, düşük iyonlaşma enerjisine sahip atomlar bir araya gelir ve bunların en dış yörüngelerindeki elektronlar yapıya dağılarak bütün atomların asal gaz elektron dizilimine geçmesini sağlar. Böylece pozitif iyonları saran bir “elektron denizi” meydana gelir. Bu elektronlar hiçbir atoma ait değildir ve serbestçe dolaşırlar. Metalik bağ da yönsüz bir bağdır. Lityum bu bağa tipik bir örnek oluşturur.

Van der Waals bağları, nötr atomlar ya da kutuplaşmamış (yük dağılımı düzgün) nötr moleküller arasında meydana gelen bağlardır. Elektronların sürekli olarak hareket halinde olması bu nötr atom ve moleküllerde geçici kutuplaşmaya sebep olur. Bu kutuplaşma zayıf da olsa söz konusu atom ve molekülleri birbirine doğru çeker. Bu tür bağların en tipik örneği asal gaz atomları arasındaki çekimdir.

Hidrojen bağlarında, hidrojen atomları en düşük enerji durumuna geçebilmek için komşu oksijen atomlarının kovalent bağ oluşturmamış orbitallerine yaklaşır. Böylece hidrojene ait elektronlar daha geniş bir bölgeye yayılmış olur ve hidrojen atomu daha düşük bir enerji seviyesine geçer. Bu bağ, düşük boyutundan ve bir elektrona sahip olmasından dolayı sadece hidrojen tarafından oluşturulabilir.

Dipol bağları, nötr olan ancak yüklerin düzgün olmayan dağılımından dolayı kutuplaşmış moleküller arasında oluşur. Özellikle polimerlerde gözlenen bir bağ türüdür.

2.1.2. Atomik dizilme

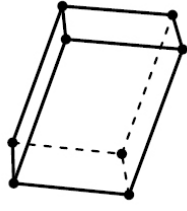
2.1.2.1. Kristal sistemleri

Katı malzemeler, atomlarının diziliş düzenine göre sınıflandırılabilir. Kristal yapı bir malzemede, atomlar uzayda büyük mesafeler (atom boyutlarına göre) boyunca tekrar eden bir düzende dizilirler. Metallerin hepsi, birçok seramik ve bazı polimerler kristal yapıya sahiptir. Bir malzeme kristal yapıya değilse amorf yapıya sahiptir. Amorf yapı malzemelerde büyük mesafelerde kendini tekrar eden bir diziliş mevcut değildir. Bir malzemede, kristal yapı malzemenin bütün hacmi boyunca kesintisiz olarak mevcut ise bu malzemeye tek kristalli denir. Eğer malzeme, yönleri ve büyüklükleri farklı birden fazla kristalden meydana geliyorsa çok kristallidir ve bu kristallerden her birine tane denir [12].

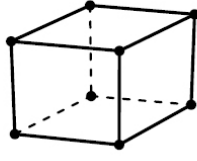
Bir kristal matematiksel olarak, üç boyutlu uzayda tekrar eden bir düzene sahip ve hangi noktasından (kafes ya da örgü noktaları) bakılırsa bakılsın tamamen aynı görünen yapı olarak tarif edilebilir. Gerçek kristallerde bu noktalar atom ya da atom grupları tarafından işgal edilirler.

Kristal yapının kendini tekrar eden en küçük parçasına birim hücre denir. Birim hücresi tarif edilen bir kristal yapı tamamen tarif edilmiş olur. Diğer bir deyişle birim hücreyi tanımlayan parametreler aynı zamanda kristal yapıyı tanımlayan parametrelerdir. Birim hücreler uzayda aralarında boşluk olmaksızın dizildiklerinden gelişigüzel şekillere sahip olamazlar. Bu geometrik kısıt göz önüne alındığında, atomların bir kristal kafes üzerinde 14 farklı şekilde dizilebileceği Auguste Bravais tarafından gösterilmiştir. Onun için bu 14 kafese Bravais kafesleri denir (Şekil 2.2).

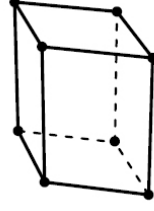
Bazı Bravais kafesleri birbirine çok benzer. Örneğin basit kübik ve hacim merkezli kübik arasında sadece cisim köşegeninin ortasına yerleşmiş bir atom farkı vardır. Bu tür benzerlikler kafeslerin simetrisi tanımlanarak ifade edilebilir. Aynı simetrisi gösteren Bravais kafesleri gruplanırsa 7 kristal sistemi elde edilmiş olur [11]. Bu 7 sistem Tablo 2.1’de verilmiştir.



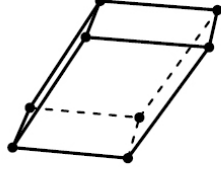
Triklinik



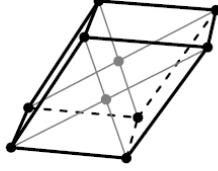
Rombohedral



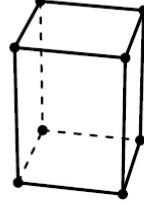
Hegzagonal



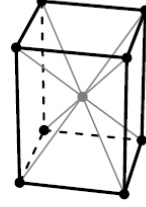
Basit
monoklinik



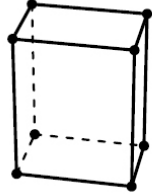
Hacım merkezli
monoklinik



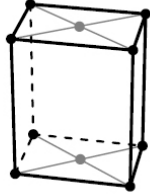
Basit
tetragonal



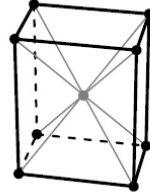
Hacım merkezli
tetragonal



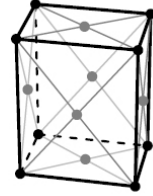
Basit
ortorombik



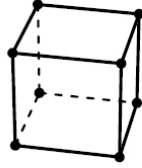
Taban merkezli
ortorombik



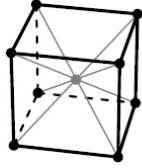
Hacım merkezli
ortorombik



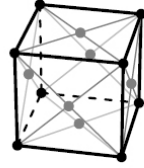
Yüzey merkezli
ortorombik



Basit
kübik



Hacım merkezli
kübik



Yüzey merkezli
kübik

Şekil 2.2: Bravais Kafesleri [11]

Tablo 2.1: Kristal Sistemleri [12]

Sistem	Kafes Parametreleri	Kafes Açıları	
Triklinik	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	
Monoklinik	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Ortorombik	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hegzagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Kübik	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	

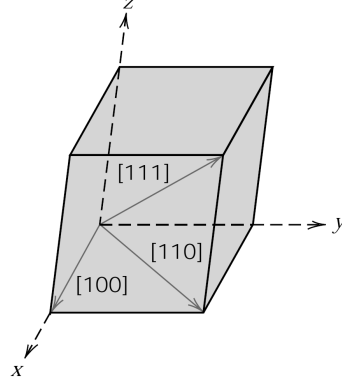
2.1.2.2. Kristallerde yönler

Kristallerle ilgili çalışmalar yapılırken çoğu kez yönlerin belirtilmesi gerekir. Kristallerde yönler iki nokta arasındaki bir vektörle ifade edilirler. Aşağıda bu vektörün nasıl hesaplandığı adım adım verilmiştir [12].

- Hesaplanmak istenen yönün vektörü koordinat sisteminin merkezinden geçecek ve kendine paralel olacak şekilde kaydırılır.
- Bu vektörün birim hücreyi kestiği noktanın koordinatları belirlenir.

- Elde edilen koordinatlar, mümkün en küçük tam sayılar olacak şekilde uygun bir sayıyla çarpılır ya da uygun bir sayıya bölünür.
- Bu sayılar köşeli parantez içine yan yana yazılır. Negatif sayıların üstüne çizgi çizilir.

Şekil 2.3'te $[100]$, $[110]$ ve $[111]$ yönleri örnek olarak gösterilmiştir.



Şekil 2.3: Kristallerde Yönlerin Gösterilmesi [12]

2.2. Doğrusal Elastisitenin Temel Kavramları ve Elastik Sabitler

2.2.1. Bazı tanımlar

Elastiklik, özelliklerin düzgün dağılı olması (homojenlik), ve izotropi, malzemelerin elastik davranışı tarif edilirken sık kullanılan kavramlardır. Bu bölümde bu kavramların tarifleri verilmiştir [13].

Bütün malzemeler belli bir ölçüye kadar elastiktir. Yani malzemeye uygulanan bir dış kuvvet, onun şekil değiştirmesine sebep olur ve bu şekil değişimi belli bir değeri aşmaz ise kuvvet kaldırıldığında malzeme eski haline geri döner.

Eğer bir malzemenin özellikleri malzemenin hacmi boyunca sabit ise malzemenin özellikleri düzgün dağılıdır ya da homojendir denir. Özellikleri düzgün dağılı olmayan ya da homojen olmayan malzemelerin özellikleri konuma bağlı olarak değişir.

Son olarak, eğer bir malzemenin mekanik özellikleri ölçüldüğü yönden bağımsız ise böyle malzemelere izotropik malzeme denir. Mekanik özellikleri yönler göre değişen malzemelere ise anizotropik malzeme denir. Çok kristalli malzemeler izotropik, tek kristalli malzemeler anizotropiktir.

2.2.2. Birim şekil değişimi

Mühendislikte şekil değişimi, birim şekil değişimi tensörü ile ifade edilir. İki tür birim şekil değişimi vardır: Birim uzama ve kayma açıları. Aşağıda bu bileşenlerin hesaplanması kısaca verilmiştir [14].

Birim uzama, belirlenen bir yön için hesaplanır. Şekil 2.4 göz önüne alınsın. Bu durum için x doğrultusundaki birim uzama ϵ_x , aşağıdaki gibi ifade edilir. Burada u , x yönündeki v ise y yönündeki şekil değişimi fonksiyonudur.

$$\epsilon_x = \frac{A'B' - AB}{AB} \quad (2.1a)$$

$$A'B' = \sqrt{\left(dx + \frac{\partial u}{\partial x} dx\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} dx\right)^2} = \sqrt{1 + 2\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial x}} dx \quad (2.1b)$$

$$A'B' \approx 1 + \frac{\partial u}{\partial x} dx$$

$$\epsilon_x \approx \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.1c)$$

Dikkat edilirse (2.1b)'de sadece küçük şekil değişimleri göz önüne alındığından yüksek dereceli terimler ihmal edilmiştir.

Kayma açıları kayma şekil değişimlerini ifade etmek için tanımlanmıştır. Şekil 2.4'e göre kayma açısı aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\gamma_{xy} = \frac{\pi}{2} - \angle C'A'B' = \alpha + \beta \quad (2.2)$$

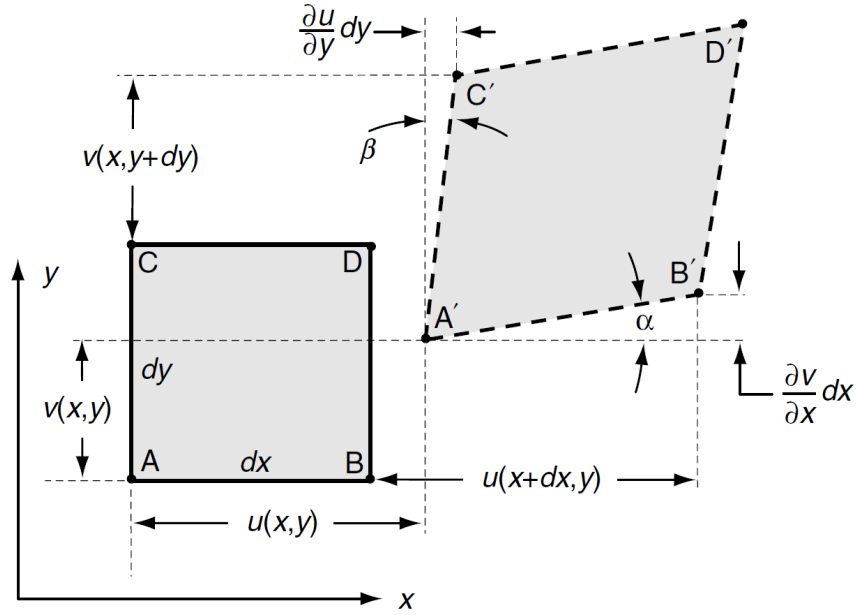
Yine küçük şekil değişimleri göz önüne alınırsa $\alpha \approx \tan \alpha$ ve $\beta \approx \tan \beta$ kabul edilebilir. Böylece (2.2) aşağıdaki şekli alır.

$$\gamma_{xy} = \frac{\frac{\partial v}{\partial x} dx}{dx + \frac{\partial u}{\partial x} dx} + \frac{\frac{\partial u}{\partial y} dy}{dy + \frac{\partial v}{\partial y} dy} = \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.3)$$

Burada yine yüksek dereceli terimler ihmal edilmiştir.

Elde edilen sonuçlar üç boyutlu durum için genişletilirse aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$\begin{aligned} \epsilon_x &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \epsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \epsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \\ \gamma_{xy} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}, \quad \gamma_{zx} = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.4)$$



Şekil 2.4: Düzlemde Şekil Değişimi [14]

Elde edilen bu terimler mühendislik birim şekil değişimi bileşenleri olarak anılırlar. Daha önce sözü edilen birim şekil değişimi tensörü ise aşağıdaki bileşenlerle ifade edilir.

$$e_x = \varepsilon_x, \quad e_y = \varepsilon_y, \quad e_z = \varepsilon_z$$

$$e_{yz} = 1/2 \varepsilon_{yz}, \quad e_{zz} = 1/2 \varepsilon_{zz}, \quad e_{xy} = 1/2 \varepsilon_{xy}$$
(2.5)

Aynı denklemler tensör notasyonu kullanılarak daha kısa bir şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$e_{ij} = 1/2 (u_{i,j} + u_{j,i})$$
(2.6)

Bu denklem, sadece kartezyen koordinatlarda değil bütün koordinat sistemlerinde geçerlidir. (2.6) ile ifade edilen birim şekil değişimi tensörü 2. derece simetrik bir tensördür ve 9 elemanından sadece 6 elemanı bağımsızdır.

2.2.3. Gerilme

Elastik bir cisme uygulanan dış kuvvet cismin şekil değiştirmesine sebep olurken aynı zamanda cisimde iç kuvvetler de oluşturur. Şekil 2.5'te görülen cismin dengede olduğu, yani cisme uygulanan bütün dış kuvvetlerin bileşkesinin sıfır olduğu ve cismin hareket etmediği, kabul edilsin. Ayrıca mm kesitinin cismi iki parçaya böldüğü hayal edilsin. Bu parçaların her ikisi de ayrı ayrı dengede olmalıdır. Öyleyse mm kesitinde parçalara etkiyen dış kuvvetleri dengeleyecek iç kuvvetler vardır. İşte, mm kesitinin birim alanına düşen iç kuvvete gerilme adı verilir. Gerilme değerleri genellikle yüzeyler boyunca düzenli dağılı değildir.

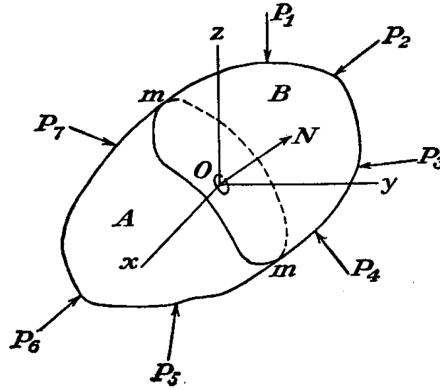
İki tür gerilme tanımlanır: Normal gerilme ve kayma gerilmesi. Normal gerilmeler hesaplandığı kesite dik, kayma gerilmeleri ise hesaplandığı kesite paraleldir. Aşağıda bu bileşenlerin tanımları kısaca verilmiştir [13].

Şekil 2.5'te gösterilen mm kesiti içinde bir δA alanı göz önüne alınsın. Bu alana etkiyen kuvvet δN ve δN 'in dik bileşeni δN_n , yatay bileşeni δN_t olsun. Ayrıca kendi içinde y ve z doğrultularında bileşenlerine ayrılsın: δN_{ty} ve δN_{tz} . Şu halde sırasıyla normal gerilme (σ) ve kayma gerilmeleri (τ) aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\sigma_{xx} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta N_n}{\delta A} = \frac{dN_n}{dA}$$
(2.7a)

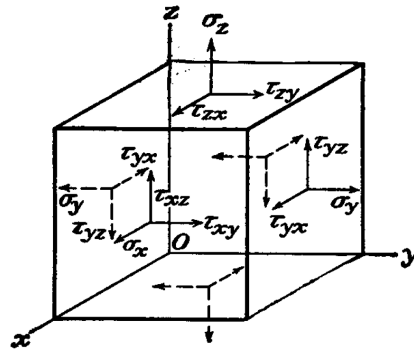
$$\tau_{xy} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta N_{ty}}{\delta A} = \frac{dN_{ty}}{dA} \quad (2.7b)$$

$$\tau_{xz} = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{\delta N_{tz}}{\delta A} = \frac{dN_{tz}}{dA} \quad (2.7c)$$



Şekil 2.5: Dış Kuvvetlerin Şekil Değişimine Uğrattığı Bir Elastik Cisim [13]

En genel halde, bütün gerilme bileşenlerini göstermek için, Şekil 2.5'teki gibi dış kuvvetlerin etkisi altında dengede olan bir cismin içinden çıkarılan küpün kullanımı, literatürde çok yaygındır (Şekil 2.6). Bu gerilme bileşenleri 9 elemanlı gerilme tensörünü oluşturur. Bu gösterimde 1. indis gerilmenin hesaplandığı yüzeyin normalini, 2. indis ise gerilmenin yönünü göstermektedir.



Şekil 2.6: En Genel Halde Gerilme Bileşenleri [13]

Birim şekil değişimi tensörüne benzer şekilde, gerilme tensörü de simetriktir, dolayısıyla da sadece 6 elemanı bağımsızdır.

2.2.4. Genelleştirilmiş Hooke yasası

Malzemelerin fiziksel özelliklerini karakterize eden bağıntılara bünye denklemleri denir. En genel halde, bir malzemenin elastik davranışını ifade eden bünye

denklemleri, gerilme ve birim şekil değişimi tensörleri arasında bağıntı kurar. Genellikle bu bağıntı, birim şekil değişiminin zamana bağlı ifadesi, sıcaklığın zamana bağlı ifadesi ve malzeme özellikleri gibi etkenleri dikkate alır [14].

Doğrusal elastisitenin bünye denklemine genelleştirilmiş Hooke yasası denir. Genelleştirilmiş Hooke yasası deneysel verilerden çıkarılmıştır ve sadece küçük deformasyonlar için geçerlidir. Genelleştirilmiş Hooke yasasının tensörel ifadesi aşağıdaki gibidir [15].

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.8)$$

Burada σ_{ij} gerilme tensörü, ε_{kl} birim şekil değişimi tensörü, C_{ijkl} ise malzemeyi karakterize eden bütün parametreleri barındıran elastisite tensörüdür. C_{ijkl} 4. derece bir tensördür ve toplam 81 elemanı vardır. Birim şekil değişimi ve gerilme tensörlerinin simetrik olduğu hatırlanırsa aşağıdaki eşitlikler yazılabilir.

$$C_{ijkl} = C_{jikl}, \quad C_{ijkl} = C_{ijlk} \quad (2.9)$$

Böylece C_{ijkl} tensörünün bağımsız eleman sayısı 36'ya düşmüş olur. En genel hali temsil eden 36 bileşenin de aslında sadece 21 tanesinin bağımsız olduğu, gerilme ve birim şekil değişimi tensörleri tek indisli, elastisite tensörü iki indisli şekilde yazıldığı zaman ortaya çıkar.

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j \quad (2.10a)$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \vdots \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{16} \\ C_{21} & \ddots & & \\ \vdots & & & \\ C_{61} & C_{62} & \cdots & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (2.10b)$$

Burada indislerin tekrar yazılması aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned} xx \rightarrow 1, \quad yy \rightarrow 2, \quad zz \rightarrow 3 \\ yz \rightarrow 4, \quad xz \rightarrow 5, \quad xy \rightarrow 6 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Bu işlemler sonunda ortaya çıkan C_{ij} de simetriktir. Böylece en genel halde, anizotropik malzemeyi ifade eden toplam 21 bağımsız eleman olduğu görülür.

Malzemenin yapısındaki simetriklik arttıkça C_{ij} 'nin bağımsız eleman sayısı azalır. Bir malzeme için en simetrik hal isotropik olmasıdır. İzotropik malzemeler için C_{ij} aşağıdaki gibidir ve sadece iki bağımsız değişken mevcuttur.

$$C = \begin{bmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

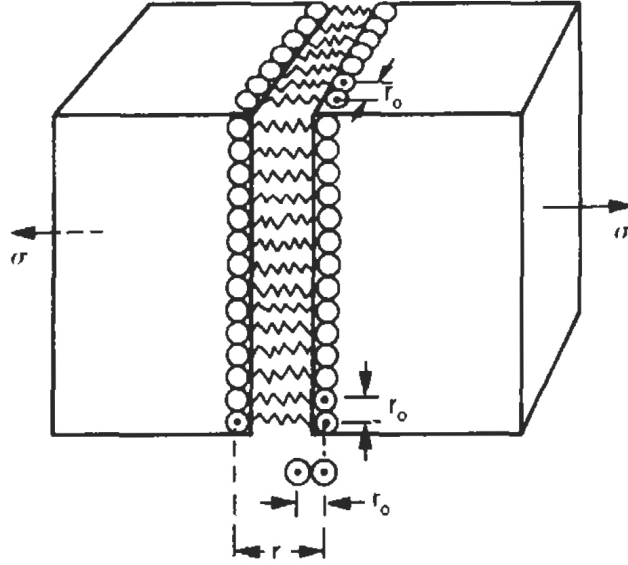
Burada λ ve μ Lamé sabitleridir. Lamé sabitleri, Young modülü E , kayma modülü G ve Poisson oranı ν 'ye aşağıdaki denklemlerle bağlıdır.

$$\mu \equiv G = \frac{E}{1+\nu}, \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (2.13)$$

Young modülü, kayma modülü ve Poisson oranı isotropik malzemeler için tanımlanmış olsa da, tekil yükleme durumlarında (sadece çekme, sadece kayma vb.) anizotropik malzemeler için de kullanılırlar ([100] doğrultusunda Young modülü vb.).

2.3. Atomik Yapı ve Elastik Sabitler Arasındaki İlişki

İki atom arasındaki kimyasal bağ göz önüne alınsın (Şekil 2.1a). Bağın türü ne olursa olsun, şekil değişiminin plastik bölgesine varıncaya kadar olan kısımda, yani kalıcı şekil değişiminin olmadığı elastik şekil değişimi bölgesinde malzemenin davranışını (elastik davranış), kimyasal bağların uzama-kısalma karakteri belirler (Şekil 2.1b ve Şekil 2.7).



Şekil 2.7: Atomsal Bağların Malzemenin Elastik Davranışına Etkisi [10]

Kristallerin nicel özellikleriyle ilgili çalışmalarda kimyasal bağlar genellikle matematiksel olarak potansiyel enerji alanları (atomik potansiyel) ile ifade edilirler (Atomik potansiyellerle ilgili daha ayrıntılı bilgi bir sonraki bölümde verilmiştir). Böyle bir potansiyel verildiğinde atomlar arası kuvvet (F) aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$F = -\frac{dU}{dr} \quad (2.14)$$

Burada U atomik potansiyeli, r ise atomlar arası mesafeyi ifade etmektedir. Benzer şekilde Young modülü E atomik potansiyelin mesafeye göre ikinci türevi ile orantılıdır.

$$E \propto \frac{d^2U}{dr^2} \quad (2.15)$$

Bu hesap elmas kristal için yapıldığı taktirde $E \simeq 1000 [GPa]$ bulunur [10] ki bu sonuç deneysel verilerle uyum içindedir. Burada unutulmaması gereken nokta, hesaplanan değerin doğruluğunun, atomik potansiyelin gerçek malzemeyi temsil etmekteki başarısıyla orantılı olduğudur.

Bu ilişkiden çıkarılacak en önemli sonuç tek kristalli malzemelerde örneğin büyüklüğü ne olursa olsun elastik özelliklerin aynı olacağıdır. Çok kristalli malzemelerde tanelerin dağılımı bozulmadıkça aynı ilke geçerlidir.

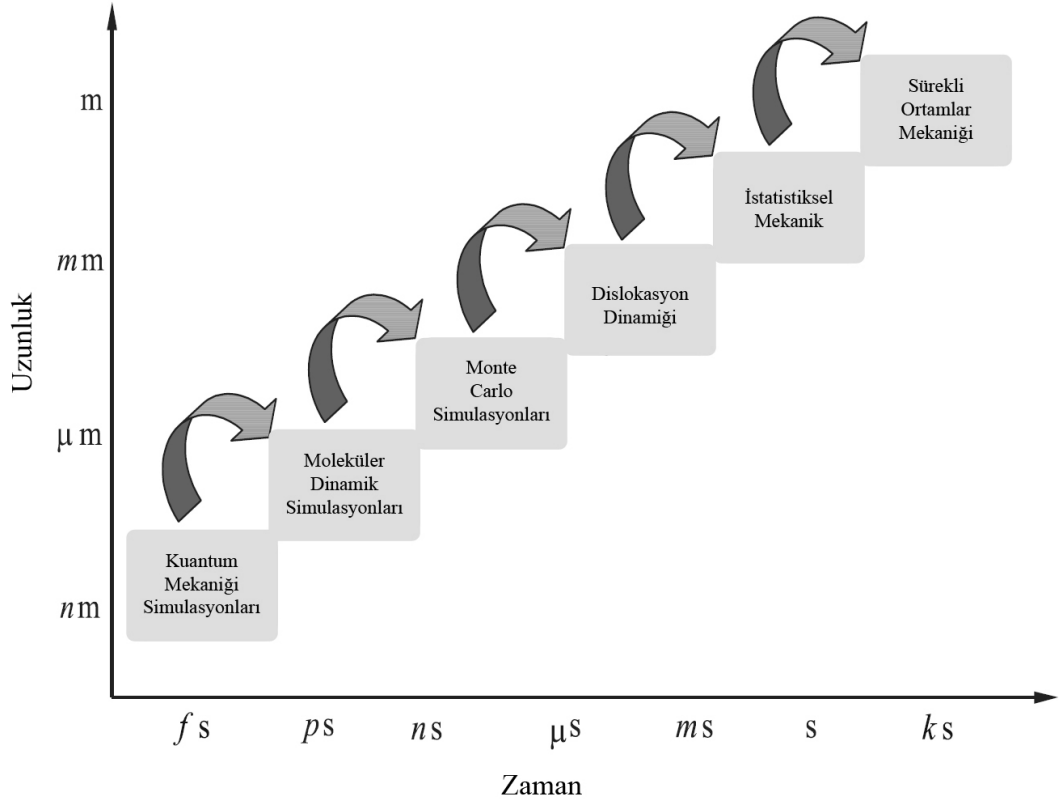
3. MALZEMELERİN SİMÜLASYONU

3.1. Simülasyon Yöntemlerinin Mertebelere Göre Hiyerarşisi

Bir malzemenin özellikleri kimyasal bileşimi dışında yapısından da büyük oranda etkilenir. Bu gerçekten hareketle, istenilen özellikleri elde etmek için malzemelerin yapısı çeşitli işlemlere tabi tutularak değiştirilmektedir. Ancak, pratik anlamda istenilen özelliklerin elde edilebilmesi için malzemenin yapı-özellik ilişkisini çok iyi bilmek gerekmektedir. Bu yüzden yapı-özellik ilişkisini anlamaya yönelik birçok çalışma yapılmıştır ve yapılacaktır.

Söz konusu çalışmalar genel olarak deneysel ve teorik olarak yürütülmekle birlikte, son dönemlerde bilgisayarların hesaplama gücündeki artış “sayısal deneylerin” yani simülasyonların da kullanımını artırmıştır. Bu sahada yapılan çalışmalarda, malzemenin yapısı (basitleştirme amaçlı) bazı kabul ve gerçeklere dayanılarak modellenir. Elde edilen model genellikle incelenen işlem ya da özellikle ilgili temel parametrelerin değiştirilebilmesine olanak verecek şekildedir. Daha sonra, kurulan model sayısal olarak analiz edilir. Bilgisayarların işlem gücündeki artış analiz sürelerini kısaltmış, daha karmaşık modellerin kurulabilmesini ve daha büyük sistemlerin incelenebilmesini sağlamıştır.

Yukarıda sözü edilen yapı-özellik ilişkisi, uzunluk ve zaman mertebelerinde geniş bir ölçeğe saçılmış olaylara dayanmaktadır. Bu sebeple farklı mertebedeki problemler için farklı simülasyon yöntemleri doğmuştur. Bu yöntemlerin uzunluk ve zaman mertebelerine göre sınıflandırılması Şekil 3.1’de gösterilmiştir [6]. Malzemelerin nano seviyedeki yapı-özellik ilişkilerini inceleyen yöntemler, kuantum mekaniği simülasyonları, moleküler dinamik simülasyonları ve Monte Carlo simülasyonlarıdır. Bir de kabaca bu yöntemlerin bir arada kullanılması olarak tarif edilebilecek çok mertebeli (multiscale) yöntemler vardır ki bu çalışmada bunlara yer verilmeyecektir [16]. Aşağıda konu yöntemler kısaca anlatılmıştır. Bunlardan moleküler dinamik simülasyonları, kullanıldığı mertebeler bakımından bu çalışmada aktarılan yöntemin rakibidir.



Şekil 3.1: Uzunluk ve Zaman Mertebesine göre Simulasyon Yöntemlerinin Sınıflandırılması [6]

3.2. Kuantum Mekanik Simulasyonları

Günümüzde, malzemenin davranışını en doğru biçimde açıklayan kuram kuantum mekaniğidir. Kuantum mekaniğinde malzemenin davranışı, elektronların ve çekirdeğin hareketini ifade eden Schrödinger denklemi ile modellenir.

$$H\Psi(r, R) = E\Psi(r, R) \quad (3.1)$$

Burada Ψ ve E sırasıyla konu sistemin enerji özvektörü ve özdeğeridir. r ve R sırasıyla elektronların ve çekirdeklerin konumlarını ifade etmektedir. H ise hamiltoniandır [17].

Ancak bu denklemin karmaşıklığı çözüm için birçok basitleştirmeyi zorunlu kılmaktadır. Neredeyse bütün kuantum mekaniği simulasyonlarında yapılan en temel basitleştirme Born-Oppenheimer yaklaşımıdır [18].

Born-Oppenheimer yaklaşımının özü elektronlar ve çekirdekler için Schrödinger denkleminin ayrılmasıdır. Bilindiği üzere elektronların kütleleri çekirdeğe göre çok daha küçüktür ancak elektronlara etkiyen kuvvetler çekirdeklere etkiyen kuvvetlerle aynı mertebededir. Bu da elektronların çekirdeklere göre çok daha hızlı hareket etmesine sebep olur. Bu durum göz önüne alınarak, elektronların hareket ettiği sırada çekirdeklerin sabit olduğu varsayılır. Böylece Schrödinger denklemi elektronlar ve çekirdekler için adyabatik olarak ayrılır ve ayrı ayrı çözülür [7].

Born-Oppenheimer yaklaşımı Schrödinger denklemini büyük ölçüde basitleştirmiş olsa da tek başına yeterli değildir. Problemi daha da basitleştirerek çözülebilir hale getirmek için başka teoriler geliştirilmiştir. Bunlardan en önemlisi, bilhassa da malzemenin mekanik özellikleri bakımından, Hohenberg, Khon ve Sham'ın geliştirdiği yoğunluk fonksiyonel teorisidir [19, 20]. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (Density Functional Theory) iki temel teoreme dayanır.

- Bir dış potansiyelin etkisi altında olan elektron sisteminin toplam enerjisi, toplam elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli.
- Enerjiyi en küçük yapan yoğunluk, temel seviye yoğunluğudur ve bu enerjiye sistemin temel seviye enerjisi denir.

Özünde, bu teoriye göre gerçek elektronlar, diğer elektron ve çekirdekler tarafından meydana getirilen potansiyel alanda serbest parçacıklar olarak hareket eden ve gerçek elektronlarla aynı toplam yoğunluğa sahip, aktif elektronlar ile temsil edilir. Ancak yoğunluk fonksiyonel teorisi sözü edilen fonksiyonelin varlığını ve tek olduğunu ortaya koymakta bu fonksiyonelin nasıl hesaplanacağından bahsetmemektedir. Yerel yoğunluk yaklaşımı (Local Density Approximation) bu problemi çözmek için kullanılan en yaygın yöntemdir. Bu yöntem özünde, genel olarak düzgün dağılı olmayan elektron sisteminin yerel olarak düzgün dağılı olduğunu kabul eder [2].

Bu yaklaşımlar sayesinde Schrödinger denklemi çözülebilir hale gelir fakat bu simülasyonlar henüz 1000 atom ve birkaç pikosaniye mertebesine ancak ulaştığından geniş anlamda kristal yapının özelliklerini açıklamak için yetersiz kalmaktadır.

3.3. Moleküler Dinamik Simülasyonları

3.3.1. Moleküler dinamiğin temel kavramları

Malzemelerin simülasyonu için kullanılan çeşitli yöntemler arasında en çok tercih edilen yöntem moleküler dinamik simülasyonudur. Bu yöntem çeşitli gaz, sıvı ve katı sistemlerin ortalama termodinamik özelliklerini hesaplamak için ilk kez termodinamik ve fiziksel kimya alanlarında kullanılmıştır. Ancak son dönemlerde malzemenin atomik davranışını incelemek için kullanımı yaygınlaşmıştır [7].

Moleküler dinamik simülasyonlarda iki temel kabul yapılır [21-23]:

- Molekül ya da atomlar, konumları vektörel olarak ifade edilebilen noktasal parçacıklardır. Parçacıklar arası etkileşim, parçacıkların uzaydaki yönelimine ve aralarındaki mesafeye bağlıdır.
- Kütle korunur. Diğer bir deyişle parçacık sayısı sabittir. Konu sistem genellikle (enerji korunumu açısından) yalıtılmış olarak kabul edilir. Ancak enerji değişimini göz önüne alan teknikler de mevcuttur.

Moleküler dinamik simülasyonlarında klasik mekanikteki yasalar kullanılır. Yani bu simülasyonlarda parçacıklar Newton yasalarına göre hareket ederler. Böylece kuantum mekaniği simülasyonlarının özünü temsil eden Schrödinger denklemi Newton'un ikinci yasası ile değiştirilmiş olur. Newton'un ikinci yasası aşağıda hatırlatılmıştır [2].

$$F_i = m_i \frac{d^2 R_i}{dt^2} \quad (3.2)$$

Burada i nolu parçacık için, F_i kuvveti, m_i kütleyi ve R_i konumu ifade eder. Parçacıklara etkiyen kuvvetler atomik potansiyelden (U) aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$F_i = -\nabla_i U \quad (3.3)$$

Klasik mekanikte çok parçacıklı sistemlerin hareket denklemlerinin yazılmasında genellikle Lagrange denkleminde faydalanılır.

Lagrange L ve q_i i parçacığına ait genelleştirilmiş koordinatı göstermek üzere Lagrange denklemi aşağıdaki gibi yazılır. İstenirse genelleştirilmiş koordinatlar

yerine, kartezyen ya da diğerk koordinat sistemlerinde tanımlanmış konum vektörü de yazılabilir.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (3.4)$$

Moleküler dinamikte L aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$L = \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i^2}{2} - U(r_i) \quad (3.5)$$

(3.2)-(3.5) moleküler dinamiğin temel denklemleridir.

3.3.2. Atomik potansiyeller

Atomları bir arada tutan kuvvetler malzemenin yapısını ve özelliklerini büyük ölçüde etkiler. Moleküler dinamikte kuvvetler, (3.3)'te de görüldüğü üzere, atomik potansiyel alanlarından türetilir. Öyleyse yapılacak simülasyonun doğruluğu atomik potansiyelin doğruluğu ile orantılıdır. Bu bağlamda, simülasyonda kullanılacak atomik potansiyel, kuantum etkilerini en azından yaklaşık olarak içermelidir.

Literatürde birbirinden çok farklı atomik potansiyeller tanımlanmıştır. Bunların matematiksel formu aşağıdaki gibi genelleştirilebilir.

$$U(r_i, r_j, \dots, r_m) = \sum_i V_1(r_i) + \sum_{i,j>i} V_2(r_i, r_j) + \sum_{i,j>i, \dots, m>m-1} V_m(r_i, r_j, \dots, r_m) \quad (3.6)$$

Burada V_1 sisteme dışardan etkiyen bir potansiyel alanını, V_m m adet parçacığın oluşturduğu sistemin potansiyelini, r_i ise i nolu parçacığın konum vektörünü ifade eder.

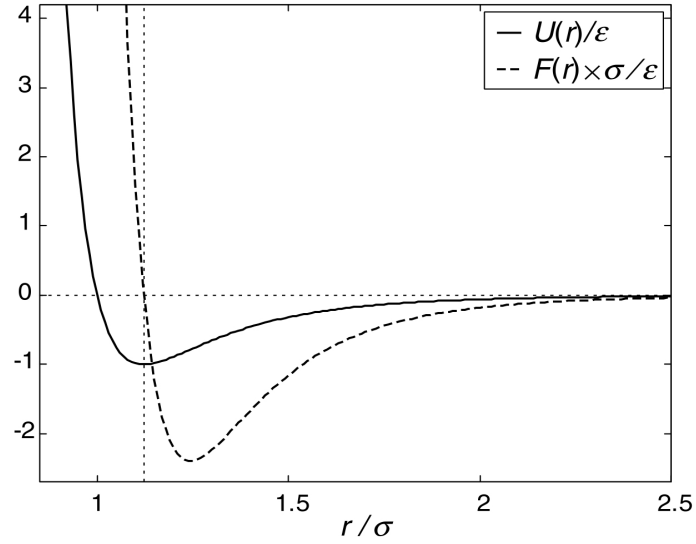
3.3.2.1. İki parçacık potansiyelleri

En basit halde atomik potansiyeller sadece V_2 teriminden oluşur; yüksek dereceli terimler tamamen göz ardı edilir. Böyle potansiyellere iki parçacık (two-body, pairwise) potansiyelleri denir. Moleküler dinamik simülasyonlarında, nispeten daha az işlemci gücüne ihtiyaç duyulduğundan, iki parçacık potansiyelleri yaygın olarak kullanılmaktadır.

Bu tür potansiyellere verilebilecek en güzel örnek, iyi bilinen Lennard-Jones potansiyelidir [24, 25]. Lennard-Jones potansiyeli asal gazları ifade etmekte kullanılır. Bu potansiyelin matematiksel formu aşağıda verilmiştir.

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad r = |r_i - r_j| \quad (3.7)$$

Burada ϵ ve σ tarif edilen sistemin parametrelerini, r ise atomlar arası uzaklığı gösterir. (3.7)'de görüldüğü üzere bu potansiyel sadece atomlar arası mesafeye bağlıdır; iki parçacık potansiyelidir. Lennard-Jones potansiyelinin normalize edilmiş grafiği Şekil 3.2'de verilmiştir [4].



Şekil 3.2: Lennard-Jones Potansiyeli [4]

Tersoff potansiyeli [26], özellikle elmasın ve grafitin simülasyonunda kullanılan, kovalent sistemlerin simülasyonu için geliştirilmiş bir potansiyeldir. Matematiksel formu itibarıyla iki parçacık potansiyelidir ancak çok parçacık potansiyeli etkilerini de bünyesinde barındırır. Burada amaç, simülasyon için gerekli işlemci gücünü artırmadan gerçek malzeme davranışının daha iyi temsil etmektir. Tersoff potansiyeli basitliği ve doğruluğu sayesinde bugün hala kullanılmaktadır. Tersoff potansiyelinin matematiksel ifadesi aşağıda verilmiştir. Ayrıca, Tersoff potansiyelinin karbon atomları için hesaplanmış parametreleri Tablo 3.1'de verilmiştir [27].

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (3.8a)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[a_{ij}f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (3.8b)$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi}{2}(r - D)/D\right), & R - D > r > R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases} \quad (3.8c)$$

$$b_{ij} = \left(1 + \beta^n \zeta_{ij}^n\right)^{1/2n} \quad (3.8d)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3] \quad (3.8e)$$

$$g(\theta) = 1 + c^2/d^2 - c^2/d^2 [d^2 + (h - \cos \theta)^2] \quad (3.8f)$$

$$a_{ij} = \left(1 + \alpha^n \eta_{ij}^n\right)^{-1/2n} \quad (3.8g)$$

$$\eta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3] \quad (3.8h)$$

Tablo 3.1: Tersoff Potansiyelinin Karbon Atomu için Parametreleri [27]

Parametre	Değer	Parametre	Değer	Parametre	Değer
A	13963.6[eV]	β	$1.5724 \cdot 10^{-7}$	h	-0.57058
B	346.674[eV]	n	0.72751	R	1.95[Å]
λ_1	3.4879[Å]	a	0	D	0.15[Å]
λ_2	2.2119[Å]	c	38049		
λ_3	0	d	4.3484		

3.3.2.2. Çok parçacık potansiyelleri

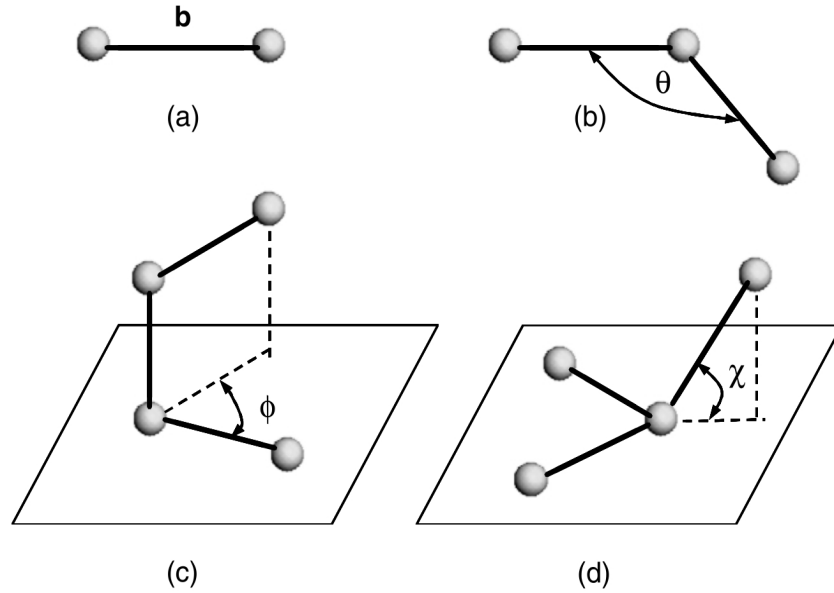
Birçok malzeme iki parçacık potansiyelleri ile yeterli hassasiyette temsil edilemez. Bu durumda üç ya da daha yüksek dereceli potansiyel terimlerinin kullanımı zorunlu

hale gelir. Bu tür potansiyellere çok parçacık (many-body) potansiyelleri denir ve genellikle aşağıdaki gibi ifade edilir [28-30].

$$U = V_B + V_A + V_T + V_I + V_{vdw} + V_Q + V_{hb} \quad (3.9)$$

Bu terimler sırasıyla, bağ uzunluğunu (iki parçacık), bağ açısını (üç parçacık), dihedral açığı (dört parçacık), ters açığı (dört parçacık), van der Walls çekimini, elektrostatik çekimi ve hidrojen bağlarından kaynaklanan çekimi ifade etmektedir.

Bu terimlerden ilk dört terim birincil bağlarla diğer terimler ise ikincil bağlarla ilişkilidir. Birincil bağlarla ilişkili olan ilk dört terimin tanımı aşağıda kısaca verilmiştir (Şekil 3.3).



Şekil 3.3: (a) Bağ Uzunluğu, (b) Bağ Açısı, (c) Dihedral Açısı, (d) Ters Açısı, [30]

Bağ uzunluğu, i ve j atomları arasındaki mesafenin değişimi ile atomik sistemin enerjisinde nasıl bir değişim olduğunu ifade eder (Şekil 3.3a).

Bağ açısı, ortak bir j atomuna bağlı i ve k atomları arasındaki açının değişimi ile atomik sistemin enerjisinde nasıl bir değişim olduğunu ifade eder (Şekil 3.3b).

Dihedral açısı, mekanikteki burulmaya çok benzer. i, j, k, l sıralaması ile dizilmiş atomlar göz önüne alınsın. Burada ijk ve jkl düzlemleri arasındaki açığı dihedral açısı denir. Bu terim dihedral açısı değişimi ile atomik sistemin enerjisinde nasıl bir değişim olduğunu ifade eder (Şekil 3.3c).

Ters açıyı ifade etmek için birbirinin aynı olan ijk atomları ile bunlara bağlı diğer bir l atomu göz önüne alınsın. Ters açı, l atomunun diğer atomlarla oluşturduğu bağların hepsini aynı düzleme doğru zorladıkça meydana gelen açı değişimlerinin bir ifadesidir ve bu geometriden meydana gelen değişim ile atomik sistemin enerjisinde nasıl bir değişim olduğunu ifade eder (Şekil 3.3d).

3.3.3. Moleküler dinamik simülasyonlarının kısıtları

Moleküler dinamik simülasyonları malzemenin davranışını araştırmak için çok güçlü araçlar olmalarına karşın çeşitli kısıtları da bünyelerinde barındırırlar [31]. Aşağıda bu kısıtlar kısaca ele alınmıştır.

3.3.3.1. Klasik mekanik yasalarının kullanımı

Moleküler dinamik simülasyonlarında Schrödinger denklemi değil Newton yasaları kullanılır. Kuantum mekaniğinin kullanıldığı bir mertebede Newton yasalarının kullanımı hesaplamalarda bir takım sapmalara sebep olmaktadır. Özellikle He, Ne gibi düşük kütleli parçacıklarda ve Debye sıcaklığına yakın sıcaklıklarda bu sapmalar kabul edilemez mertebelere ulaşmaktadır [32].

3.3.3.2. Atomik potansiyelin doğruluğu

Moleküler dinamik simülasyonlarında kuvvetler atomik potansiyellerden türetilmektedir. Bu sebeple atomik potansiyelin doğruluğu hesaplamaları doğrudan etkilemektedir. Atomik potansiyeller gerçek malzemeyi daha iyi ifade edecek şekilde karmaşıklıkla simülasyonu gerçekleştirmek için gerekli işlemci gücü artmaktadır. Bu da atomik potansiyellerin belli kabullerle ya da basitleştirilerek kullanılmasına sebep olmaktadır [32].

3.3.3.3. Zaman ve uzunluk kısıtları

Moleküler dinamik simülasyonlarında bir milyon civarında parçacık içeren sistemler kurulabilmekte ve bu sistemlerin yüz nanosaniye kadar süreler boyunca simülasyonu yapılabilmektedir. Ancak bu değerler nano kaplamalar gibi birkaç mikron boyunda modellerin kurulmasını gerektiren uygulamalar için yeterli değildir [4].

3.4. Monte Carlo Simulasyonları

Bu simülasyonlara “Monte Carlo” ismi John von Neumann tarafından [33], içerdği rastgele sayı örnekleme algoritmalarının Monaco, Monte Carlo şehrindeki kumarhanelerde oynanan oyunlarla analojisinden dolayı verilmiştir. Özünde, Monte Carlo simülasyonları moleküler dinamiğin temel denklemlerini stokastik yöntemlerle çözmekten ibarettir [2].

Günümüzde biyoloji, nükleer fizik, sosyoloji gibi farklı alanlarda yaygın olarak kullanılan Monte Carlo simülasyonları, deterministik ya da stokastik problemleri istatistiksel yöntemlerden faydalanarak çözmektedir [6]. Bu simülasyonlar genel olarak üç ana basamaktan oluşmaktadır [8].

- Mevcut fiziksel model istatistiksel modele çevrilir.
- Elde edilen istatistiksel model sayısal stokastik örnekleme içeren algoritmalarla çözülür.
- Elde edilen çözüm istatistiksel yöntemlerle incelenir.

Monte Carlo simülasyonları genel olarak 2. adımda kullanılan stokastik örnekleme yöntemlerine göre sınıflandırılır. Bu yöntemlerin doğruluğu kullanılan algoritmaya ve genel olarak istatistiksel yöntemlerin doğruluğuna bağlıdır.

4. MEKANİK SİSTEMLERİN ANALİZİ VE SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ

4.1. Mekanik Sistemlerin Modellenmesi

Mevcut bir mühendislik sisteminin analizi ya da yeni bir mühendislik sisteminin tasarımı ve optimizasyonu için konu sistemin matematiksel modelinin çıkarılması gerekir. Fiziksel problemlerin bazı kabuller çerçevesinde basitleştirilip temel yasalar uygulanarak matematiksel denklemlerin elde edilmesi sürecine modelleme, elde edilen denklemlere ise matematiksel model adı verilir. Bu modeller fiziksel yasalardan elde edilebileceği gibi sonlu elemanlar yöntemi gibi teknikler kullanılarak da elde edilebilir [34].

Mekanikte, matematiksel model genellikle hareket denklemi ya da denklemleri olarak anılır. Modelleme sürecinde Newton'un hareket yasaları, Lagrange'ın hareket denklemleri ya da D'Alembert prensibi kullanıldığı gibi, özellikle gerilme ve şekil değişimi problemlerinde, sonlu elemanlar yöntemi de kullanılmaktadır.

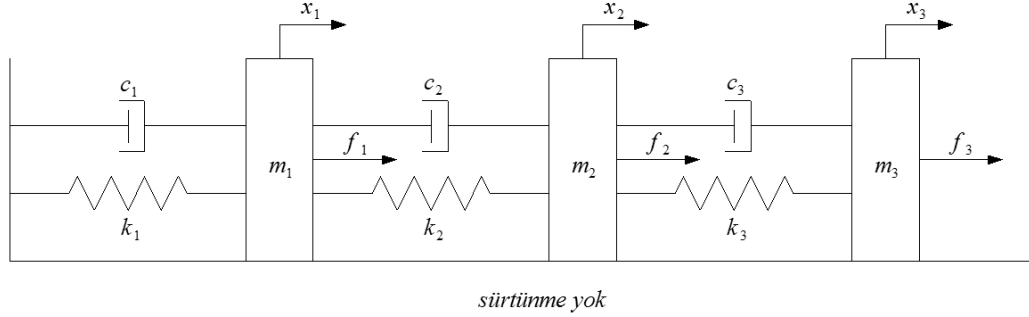
Mekanikte hareket denklemleri genellikle, ikinci mertebeden doğrusal diferansiyel denklemlerden ya da birinci mertebeden diferansiyel denklemlerden meydana gelir. Burada çalışmanın amaçları bakımından, temsili ikinci mertebeden doğrusal diferansiyel denklemlerle yapılan mekanik bir sistem modellenmiştir. Aşağıda böyle bir sistemin hareket denklemi en genel halde verilmiştir [35].

$$M \ddot{d} + S \dot{d} + K d = f \quad (4.1)$$

Burada M kütle matrisi, S sönüm matrisi, K katılık matrisi, d yer değiştirme vektörü, $\dot{d}$ hız vektörü, $\ddot{d}$ ivme vektörü, f ise kuvvet vektörüdür. Ele alınan sistemin serbestlik derecesi n_{sd} ise M , S ve K matrisleri $n_{sd} \times n_{sd}$ boyutunda; d , $\dot{d}$ ve $\ddot{d}$ matrisleri ise $n_{sd} \times 1$ boyutunda olacaktır. Sistemin sadece 1 serbestlik derecesi olması durumunda bu büyüklükler skaler olacaktır. Ayrıca problem sadece statik olarak çözülecekse hız ve ivme terimleri yok olacaktır.

4.2. Hareket Denklemlerinin Çıkarılması

Şekil 4.1'de 3 serbestlik dereceli bir kütle-yay-damper sistemi görülmektedir. Aşağıda bu basit sistemin hareket denklemleri çıkarılmıştır [36].



Şekil 4.1: 3 Serbestlik Dereceli Bir Kütle-Yay-Damper Sistemi

Şekil 4.1'de görülen her kütle için Newton'un ikinci yasası yazılırsa aşağıdaki denklemler elde edilir.

$$m_1 \ddot{x}_1 = -k_1 x_1 - k_2 (x_1 - x_2) - c_1 \dot{x}_1 - c_2 (\dot{x}_1 - \dot{x}_2) + f_1(t) \quad (4.2a)$$

$$m_2 \ddot{x}_2 = k_2 (x_1 - x_2) - k_3 (x_2 - x_3) + c_2 (\dot{x}_1 - \dot{x}_2) - c_3 (\dot{x}_2 - \dot{x}_3) + f_2(t) \quad (4.2b)$$

$$m_3 \ddot{x}_3 = k_3 (x_2 - x_3) + c_3 (\dot{x}_2 - \dot{x}_3) + f_3(t) \quad (4.2c)$$

Burada c_i i nolu elemanın viskoz sönüm katsayısını, k_i i nolu elemanın yay katsayısını, m_i i nolu elemanın kütlelerini, f_i i nolu elemana etkiyen kuvveti, x_i ise i nolu elemanın konumunu göstermektedir. Bu denklemler kendi içlerinde düzenlenirse aşağıdaki sistem elde edilir.

$$m_1 \ddot{x}_1 + (c_1 + c_2) \dot{x}_1 + (k_1 + k_2) x_1 - c_2 \dot{x}_2 - k_2 x_2 = f_1(t) \quad (4.3a)$$

$$m_2 \ddot{x}_2 - c_2 \dot{x}_1 - k_2 x_1 + (c_2 + c_3) \dot{x}_2 + (k_2 + k_3) x_2 - c_3 \dot{x}_3 - k_3 x_3 = f_2(t) \quad (4.3b)$$

$$m_3 \ddot{x}_3 - c_3 \dot{x}_2 - k_3 x_2 + c_3 \dot{x}_3 + k_3 x_3 = f_3(t) \quad (4.3c)$$

(4.3) denklemleri Şekil 4.1'de görülen 3 serbestlik dereceli sistemin hareket denklemleridir. Bu denklemler matris şeklinde yazılarak (4.1) formuna sokulabilirler.

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \\ \ddot{x}_3 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1+c_2 & -c_2 & 0 \\ -c_2 & c_2+c_3 & -c_3 \\ 0 & -c_3 & c_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{Bmatrix} \\
& + \begin{bmatrix} k_1+k_2 & -k_2 & 0 \\ -k_2 & k_2+k_3 & -k_3 \\ 0 & -k_3 & k_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{Bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

4.3. Zaman Cevabı

(4.4) denklemleri Şekil 4.1'de gösterilen 3 serbestlik dereceli sistemin hareket denklemleridir. İşte bu denklemlerin başlangıç koşulları göz önüne alınarak çözülmesiyle sistemin analizi yapılır. Elde edilen çözüme mekanikte genellikle sistemin zaman cevabı adı verilir [34].

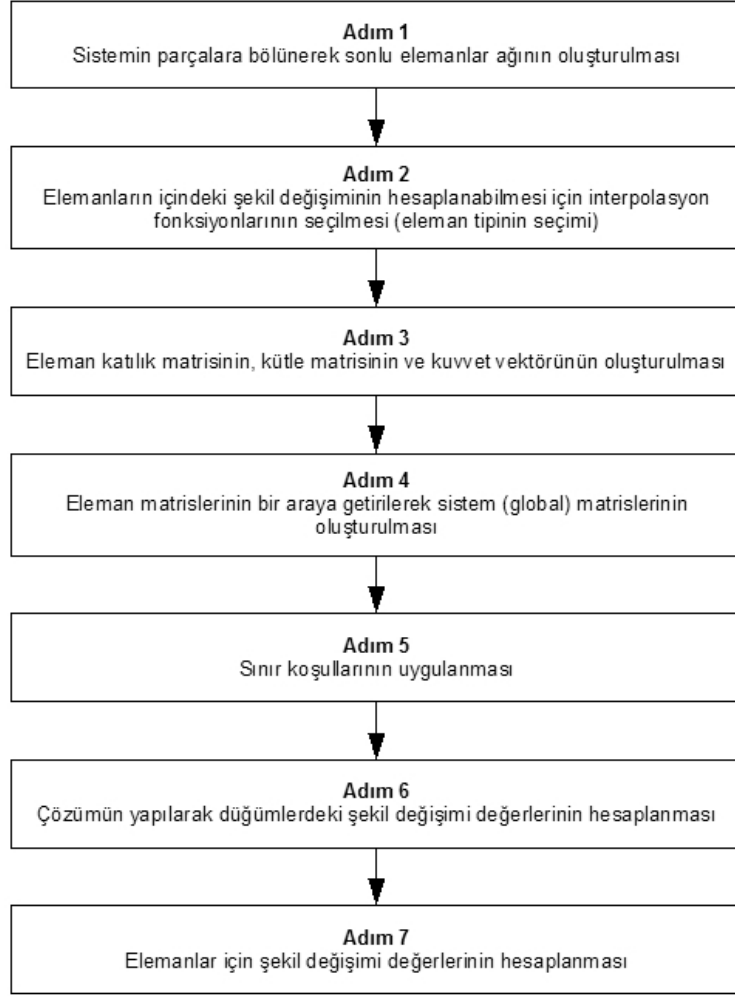
4.4. Sonlu Elemanlar Yöntemi

4.4.1. Giriş

Sonlu elemanlar yöntemi özü itibarı ile diferansiyel denklemlerin çözümünde kullanılan sayısal bir yöntemdir. Günümüzde sonlu elemanlar yöntemi mühendisliğin birçok alanında yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu alanların başında katı cisimler mekaniği, ısı transfer ve akışkanlar mekaniği gelir [37].

Mühendislikte sonlu elemanlar yöntemi, konu sistemin modellenmesiyle elde edilen matematiksel modelin çözülmesi için kullanılabileceği gibi, matematiksel modelin doğrudan ayırık formda elde edilmesi ve çözülmesi için de kullanılabilir. Sonlu elemanlar analiz yazılım paketlerinin kullanımı ikinci yönteme dayalıdır.

Sonlu elemanlar yönteminin, yapısal analizde kullanımını gösteren akış şeması Şekil 4.2'de verilmiştir [38]. Burada gösterildiği üzere, konu sistemin parçalara bölünmesiyle elde edilen her bir parçaya eleman, elemanların birbirine bağlandığı noktalara düğüm, eleman ve düğümlerin hepsine birden ise sonlu elemanlar ağı ya da kısaca ağ adı verilir.



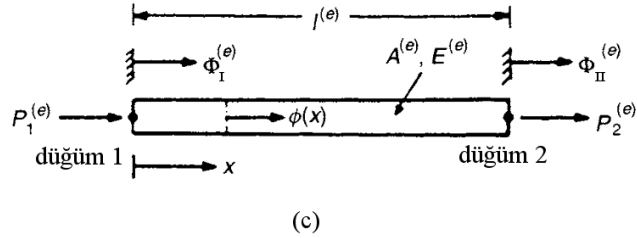
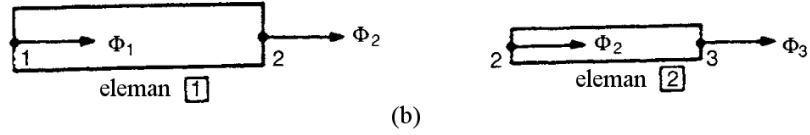
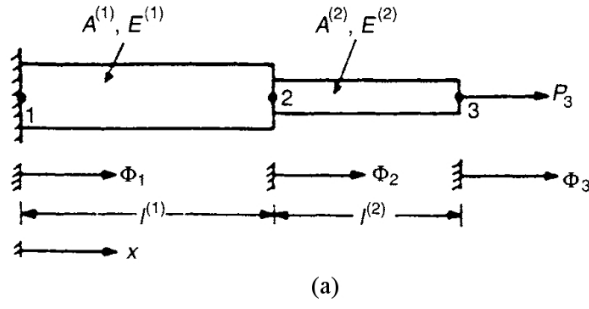
Şekil 4.2: Sonlu Elemanlar Yönteminin Yapısal Analiz için Akış Şeması [38]

4.4.2. Sonlu elemanlar yöntemi ile şekil değişimi analizi

Aşağıda, Şekil 4.3a'da gösterilen basit sistemin statik analizi sonlu elemanlar yöntemi ile yapılarak Şekil 4.2'de gösterilen adımlar kısaca açıklanmıştır [39].

Şekil 4.3a'da gösterilen ve eksenel olarak yüklenmiş kademeli ankastre kirişin yapısal bir sistemin parçası olduğu ve güvenlik açısından bu kirişin analiz edilmesi gerektiği düşünülün ve problemin çözümü için Şekil 4.2'de gösterilen yedi adım sırasıyla uygulansın.

Şekil 4.3'te $A^{(i)}$, $E^{(i)}$ ve $l^{(i)}$ sırasıyla i nolu elemana ait kesit alanını, Young modülünü ve eleman boyunu, Φ_i ve P_i sırasıyla i nolu düğüme ait yer değişimini ve kuvveti ifade etmektedir.



Şekil 4.3: (a) Kademeli Ankastre Kiriş (b) Kirişin Parçalara Bölünmesi (c) Genel Eleman Özellikleri, [39]

Adım 1: Sonlu eleman ağının oluşturulması

Bu kiriş şekil 4.3a'da gösterildiği üzere ikiye bölünsün. Böylece 2 eleman ve 3 düğüm noktası ortaya çıkar. Bu elemanlar ve düğümler Şekil 4.3b'de gösterilmiştir.

Adım 2: İnterpolasyon fonksiyonlarının seçilmesi

Şekil 4.2'de de gösterildiği üzere çözüm aşamasının sonunda, düğümlerin yer değiştirme değerleri elde edilir. Elemanlar boyunca meydana gelen yer değiştirmelerin hesaplanabilmesi için elemanların davranışını ifade eden sürekli fonksiyonların seçilmesi gerekir. Bu kirişin elemanları için aşağıdaki fonksiyon seçilmiştir.

$$u(x) = a + bx \quad (4.5)$$

Burada a ve b sabittir. İlk elemanın iki ucu göz önüne alınırsa aşağıdaki eşitlikler yazılabilir.

$$a = \Phi_1^{(e)}, \quad b = (\Phi_2^{(e)} - \Phi_1^{(e)})/l^{(e)} \quad (4.6)$$

Böylece interpolasyon fonksiyonu aşağıdaki hali alır.

$$u(x) = \Phi_1^{(e)} + [(\Phi_2^{(e)} - \Phi_1^{(e)})/l^{(e)}]x \quad (4.7)$$

Adım 3: Eleman matrislerinin oluşturulması

Burada statik analiz yapıldığından sadece katılık matrisi çıkarılacaktır. Sonlu elemanlar yönteminde bir elemanın şekil değiştirme enerjisi (Λ) aşağıdaki gibi verilir.

$$\Lambda^{(e)} = \frac{1}{2} \Phi^T K^{(e)} \Phi \quad (4.8a)$$

$$\Phi = \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{Bmatrix} \quad (4.8b)$$

Öte yandan burada kullanılan elemanların birer kiriş oldukları göz önüne alınırsa şekil değiştirme enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\Lambda^{(e)} = A^{(e)} \int_0^{l^{(e)}} \frac{1}{2} \sigma^{(e)} \epsilon^{(e)} dx = \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2} \int_0^{l^{(e)}} (\epsilon^{(e)})^2 dx \quad (4.9)$$

Burada $\sigma^{(e)}$ ve $\epsilon^{(e)}$ ırasıyla gerilme birim şekil değişimini ifade etmektedir. İnterpolasyon fonksiyonu göz önüne alınırsa birim şekil değişimi aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\epsilon^{(e)} = \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{(\Phi_{II}^{(e)} - \Phi_I^{(e)})}{l^{(e)}} \quad (4.10)$$

Bu ifade (4.9)'da yerine koyularak integral alınırsa şekil değişimi enerjisi aşağıdaki hesaplanır.

$$\Lambda^{(e)} = \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} \left((\Phi_I^{(e)})^2 + (\Phi_{II}^{(e)})^2 - 2\Phi_I^{(e)}\Phi_{II}^{(e)} \right) \quad (4.11)$$

(4.11) ifadesi matris formunda tekrar yazılırsa aşağıdaki denklem elde edilir

$$\Lambda^{(e)} = \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} \Phi_I^{(e)} & \Phi_{II}^{(e)} \end{Bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} & -\frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} \\ -\frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} & \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_I^{(e)} \\ \Phi_{II}^{(e)} \end{Bmatrix} \quad (4.12)$$

Böylece eleman katılık matrisi elde edilmiş olur.

$$K^{(e)} = \begin{bmatrix} \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} & -\frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} \\ -\frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} & \frac{A^{(e)} E^{(e)}}{2l^{(e)}} \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Adım 4: Sistem matrislerinin oluşturulması

Bu adımda sistemde bulunan elemanların katılık matrisleri bir araya getirilerek tüm sistemin katılık matrisi oluşturulur. Bu süreci göstermek için öncelikle sistemin katılık matrisi $n_{sd} \times n_{sd}$ boyutunda boş bir matris olarak düşünölsün ve elemanlar eklendikçe bunların katılık değeri de, $K_{ii} = \sum_e K_{ii}^{(e)}$ olacak şekilde, global katılık matrisinde yerine yazılsın. Burada sistemin (global) eksen takımı ile eleman eşitliklerinin çıkarıldığı eksen takımı aynı olduğundan eleman katılık matrisi doğrudan sistem matrisine eklenmiştir. Birçok problemde eleman eşitliklerinin çıkarıldığı eksen takımı sistemin eksen takımından farklıdır. Böyle problemlerde eleman katılık matrisi dönüşüm matrisi ile çarpılarak sistem eksen takımına dönüştürölür.

$$K^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} \\ -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{Bmatrix} \quad (4.14a)$$

$$K^{(2)} = \begin{bmatrix} \Phi_2 & \Phi_3 \\ \frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} & -\frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} \\ -\frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} & \frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} \end{bmatrix} \begin{matrix} \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \quad (4.14b)$$

$$K = \begin{bmatrix} \Phi_1 & \Phi_2 & \Phi_3 \\ \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & 0 \\ -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \quad (4.14c)$$

$$K = \begin{bmatrix} \Phi_1 & \Phi_2 & \Phi_3 \\ \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & 0 \\ -\frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} & \frac{A^{(1)} E^{(1)}}{2l^{(1)}} + \frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} & -\frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} \\ 0 & -\frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} & \frac{A^{(2)} E^{(2)}}{2l^{(2)}} \end{bmatrix} \begin{matrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{matrix} \quad (4.14d)$$

Benzer şekilde eleman kuvvet vektörleri de bir araya getirilirse global kuvvet vektörü elde edilir.

$$f = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ P_3 \end{Bmatrix} \quad (4.15)$$

Adım 5: Sınır koşullarının uygulanması

Şekil 4.3'te de görüldüğü üzere konu kiriş ankastre bağlıdır yani $\Phi_1=0$ 'dır. Böylece düğüm şekil değişimi matrisi aşağıdaki şekli alır.

$$\Phi = \begin{Bmatrix} 0 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} \quad (4.16)$$

Adım 6: Çözüm

Bu adımda (4.16)'da verilen denklem sisteminin çözümü uygun bir yöntemle yapılır. Böylece düğüm şekil değişimi değerleri elde edilmiş olur.

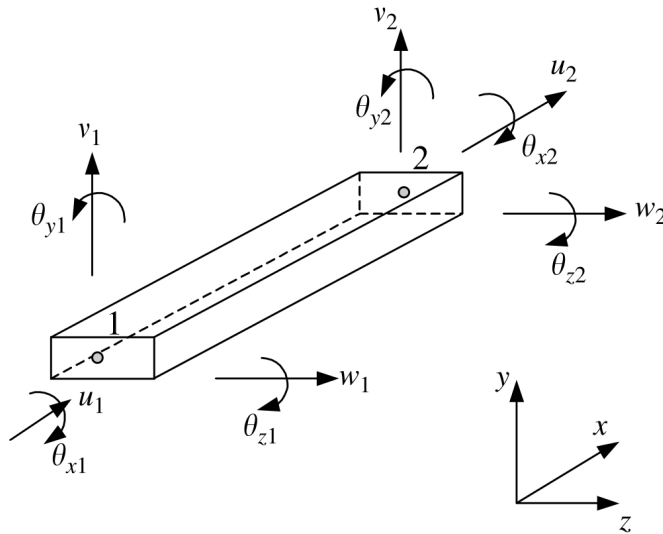
$$\begin{bmatrix} A^{(1)}E^{(1)}/2l^{(1)} & -A^{(1)}E^{(1)}/2l^{(1)} & 0 \\ -A^{(1)}E^{(1)}/2l^{(1)} & A^{(1)}E^{(1)}/2l^{(1)} + A^{(2)}E^{(2)}/2l^{(2)} & -A^{(2)}E^{(2)}/2l^{(2)} \\ 0 & -A^{(2)}E^{(2)}/2l^{(2)} & A^{(2)}E^{(2)}/2l^{(2)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ P_3 \end{Bmatrix} \quad (4.17)$$

Adım 7: Eleman çözümleri

Bu adımda ise (4.17)'nin çözümü ile elde edilen düğüm şekil değişimi değerleri interpolasyon fonksiyonunda yerine koyularak elemanlar boyunca meydana gelen şekil değişimleri hesaplanır.

4.4.3. Kiriş elemanın katılık ve kütle matrisi

Bu çalışmada karbon bağlarını temsil etmek için Euler-Bernoulli formülasyonuna uyan kiriş eleman kullanılmıştır. Kiriş elemanın serbestlik dereceleri Şekil 4.4'te gösterilmiştir.



Şekil 4.4: Kiriş Elemanın Serbestlik Dereceleri [40]

Bu elemanın katılık matrisi aşağıdaki gibidir [40].

$$K = \begin{bmatrix} K_{ii} & K_{ij} \\ K_{ij}^T & K_{jj} \end{bmatrix} \quad (4.18a)$$

$$K_{ii} = \begin{bmatrix} EA/l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/l^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/l^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/l^3 & 0 & -6EI_y/l^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -6EI_y/l^2 & 0 & 4EI_y/l & 0 \\ 0 & 6EI_x/l^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/l \end{bmatrix} \quad (4.18b)$$

$$K_{ij} = \begin{bmatrix} -EA/l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -12EI_x/l^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/l^2 \\ 0 & 0 & -12EI_y/l^3 & 0 & -6EI_y/l^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/l^2 & 0 & 2EI_y/l & 0 \\ 0 & -6EI_x/l^2 & 0 & 0 & 0 & 2EI_x/l \end{bmatrix} \quad (4.18c)$$

$$K_{jj} = \begin{bmatrix} EA/l & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/l^3 & 0 & 0 & 0 & -6EI_x/l^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/l^3 & 0 & 6EI_y/l^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/l^2 & 0 & 4EI_y/l & 0 \\ 0 & -6EI_x/l^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/l \end{bmatrix} \quad (4.18d)$$

Burada E Young modülü, A dik kesit alanı, I_i ise i eksenine göre alan atalet momentidir.

Karbon atomları kirişin iki ucundaki noktasal cisimler olarak farz edilirse, m_c karbon atomunun kütlesi olmak üzere, kütle matrisi aşağıdaki gibi yazılır.

$$M = \begin{bmatrix} m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_c \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

4.4.4. Mekanik sistemlerde sönüm

(4.1) de tanımlanan sönüm matrisi, mekanik sistemlerdeki enerji kaybını ifade etmektedir. Bu enerji kaybı sistemin yapısından kaynaklanabileceği gibi çevresiyle etkileşiminden de kaynaklanabilir. Mekanik sistemlerde iç enerji kaybı temel olarak sabit parçalarla hareketli parçalar arasındaki sürtünmeden kaynaklanır. Çevreden kaynaklanan enerji kaybı ise genellikle yapının bir akışkanın içinden geçmesiyle ortaya çıkar.

Sistemlerde enerji kaybı istenmeyen bir etki olabileceği gibi (yuvarlanmalı yataklarda olduğu gibi) özellikle sisteme dahil edilen bir etki de olabilir (şok emiciler gibi).

Malzemeler de bünyelerinde sönüm barındırırlar. Örneğin metallerde sönüm tane sınırları arasındaki kaymadan dolayı ortaya çıkar. Farklı malzemelerin sönüm mekanizmaları farklıdır.

Kaynağı ne olursa olsun sönüm kuvvetlerinin matematiksel olarak ifade edilmesi genellikle çok zor ve karmaşıktır. Bu sebeple gerçek sönümle aynı etkiyi yaratacak matematiksel sönüm ögeleri tanımlanır.

Bunlardan en çok tercih edileni, orantısal sönüm olarak da bilinen Rayleigh sönümüdür. Rayleigh sönümü aşağıdaki gibi tanımlanır [36].

$$S = aM + bK \quad (4.20)$$

Burada a ve b sabitlerdir. M sistemin kütle matrisi, K ise sistemin katılık matrisidir.

5. MODEL DERECEİ DÜŞÜRME TEKNİKLERİ

5.1. Giriş

Mühendislik yapılarının dinamik yükleme durumundaki davranışının hesaplanması (frekans cevabı ya da zaman cevabı) sıklıkla karşılaşılan bir problemdir. Bu problem başta sonlu elemanlar yöntemi olmak üzere çeşitli sayısal ya da analitik yöntemlerle çözülebilir. Zaman zaman, modelleme sonucu yüksek serbestlik dereceli sistemler ortaya çıkmaktadır. Öyle ki, bilgisayarların işlem gücü bu sistemleri analiz etmek için yetersiz kalmaktadır. Böyle durumlarda model derecesi düşürme teknikleri uygulanarak sistemin derecesi düşürülür ve analizi yapılarak aranan cevap elde edilir.

Günümüzde birçok model derecesi düşürme tekniği kullanılmaktadır. Bu yöntemler, model derecesi düşürme işlemi sonunda elde edilen serbestlik derecelerinin karakterine göre kabaca üç sınıfa ayrılabilir [41].

- Fiziksel serbestlik derecelerine dayalı model derecesi düşürme teknikleri
- Genelleştirilmiş serbestlik derecelerine dayalı model derecesi düşürme teknikleri
- Hem fiziksel hem genelleştirilmiş serbestlik derecelerine dayalı model derecesi düşürme teknikleri

Bu sınıflandırma içinde belki de en basit teknikler fiziksel serbestlik derecelerine dayalı model derecesi düşürme teknikleridir. Basitliğinden ötürü bu esasa dayalı birçok teknik mevcuttur. Bunların en iyi bilineni ilk geliştirilen model derecesi düşürme tekniklerinden biri olan statik indirgeme (Static Reduction) tekniğidir. Yine bu sınıfa giren dinamik indirgeme tekniği (Dynamic Condensation, DC) iyi bilinen ve aslında statik indirgeme tekniğini iyileştirmek için geliştirilen yöntemlerden biridir.

Bu çalışmada kullanılan model derecesi düşürme tekniği ise komponent mod sentezi (Component Mode Synthesis, CMS) olarak anılan bir süpereleman analiz tekniğidir.

Bu teknik orijinal sistemi çok iyi temsil edebilmesi sayesinde günümüzde yaygın olarak kullanılmaktadır. Öyle ki sonlu elemanlar analiz yazılım paketlerine dahi girmiştir.

Model derecesi düşürme tekniklerinin formülasyonunda genellikle aşağıdaki gibi gösterilen sönümsüz bir sistem göz önüne alınır.

$$M \ddot{d} + K d = f \quad (5.1)$$

Burada M kütle matrisi, K katılık matrisi, d yer değiştirme vektörü, $\ddot{d}$ ivme vektörü, f ise kuvvet vektörüdür. Ele alınan sistemin serbestlik derecesi n_{sd} ise M ve K matrisleri $n_{sd} \times n_{sd}$ boyutunda; d , $\ddot{d}$ ve f matrisleri ise $n_{sd} \times 1$ boyutunda olacaktır.

Bir model derecesi düşürme tekniği genellikle (5.1)'in derecesini düşürürken orijinal sistemin davranışını mümkün olduğunca yansıtır. Bu süreçte genellikle (5.1) aşağıdaki gibi ikiye ayrılır.

$$\begin{bmatrix} M_{aa} & M_{ac} \\ M_{ca} & M_{cc} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{d}_a \\ \ddot{d}_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{aa} & K_{ac} \\ K_{ca} & K_{cc} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_a \\ d_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_a \\ f_c \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Burada a indisi aktif (sistemde tutulan ve sistemi ifade eden) serbestlik derecelerini, c indisi ise sistemden çıkarılan serbestlik derecelerini ifade etmektedir.

Model derecesi düşürme işlemi genellikle, mevcut serbestlik derecelerinin bir dönüşüm matrisi ile çarpılarak aktif serbestlik derecelerinin elde edilmesi şeklinde tanımlanır.

$$d = \begin{Bmatrix} d_a \\ d_c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} I_{aa} \\ \Psi_{ca} \end{Bmatrix} d_a = T d_a \quad (5.3)$$

Burada I_{aa} $a \times a$ boyutlarındaki birim matrisi, Ψ_{ca} indirgeme matrisini, T ise dönüşüm matrisini ifade eder. Derecesi düşürülmüş sistem matrisleri aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$M^{ind} = T^T M T \quad (5.4a)$$

$$K^{ind} = T^T K T \quad (5.4b)$$

$$f^{ind} = T^T f \quad (5.4c)$$

Böylece orijinal sistem (5.4)'de verilen matrislerle aşağıdaki gibi temsil edilir.

$$M^{ind} \ddot{d}_a + K^{ind} d_a = f^{ind} \quad (5.5)$$

5.2. Statik İndirgeme Tekniği

Guyan/Irons (Guyan Reduction, GR) tekniği olarak da anılan bu teknik, Guyan [42] ve Irons [43] tarafından neredeyse aynı anda bulunmuştur ve kuşkusuz en basit indirgeme yöntemidir. Bu yöntemin temel kabulü sistemden çıkarılan serbestlik dereceleriyle ilgili atalet terimlerinin, sistemde tutulan serbestlik derecelerinin şekil değişimi esnasında çıkarılan serbestlik derecelerine ilettiği kuvvetlere göre küçük olduğu ve ihmal edilebileceğidir [41]. Guyan/Irons tekniğinin formülasyonu için statik bir sistem göz önüne alınsın.

$$\begin{Bmatrix} K_{aa} & K_{ac} \\ K_{ca} & K_{cc} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} d_a \\ d_c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_a \\ f_c \end{Bmatrix} \quad (5.6)$$

Sistemden çıkarılacak serbestlik derecelerine etkiyen kuvvet olmadığı ($f_c = 0$) kabul edilsin. Böylece çıkarılan serbestlik dereceleri ile aktif serbestlik dereceleri arasında aşağıdaki eşitlik yazılabilir.

$$d_c = -K_{cc}^{-1} K_{ca} d_a \quad (5.7)$$

(5.3) göz önüne alınırsa Guyan/Irons tekniği dönüşüm matrisi (T_{GR}) aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$T_{GR} = \begin{bmatrix} I_{aa} \\ -K_{cc}^{-1} K_{ca} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{aa} \\ \Psi_{GR} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

(5.8)'e göre derecesi düşürülmüş kütle ve katılık matrisleri aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$M_{GR}^{ind} = T_{GR}^T M T_{GR} = M_{aa} + M_{ac} \Psi_{GR} + \Psi_{GR}^T (M_{ca} + M_{cc} \Psi_{GR}) \quad (5.9a)$$

$$K_{GR}^{ind} = T_{GR}^T K T_{GR} = K_{aa} + K_{ac} \Psi_{GR} \quad (5.9b)$$

Guyan/Irons tekniğinin en önemli avantajları kolay formülasyonu ve fazla işlemci gücü gerektirmeyiştir. Aktif serbestlik dereceleri doğru seçildiği sürece bu teknik çoğu analiz için yeterli hassasiyette sonuçlar vermektedir.

Ancak çıkarılan serbestlik derecelerinin atalet etkilerinin hesaba katılmayışı ve aktif serbestlik derecelerinin uygun seçilememesi durumunda büyük sapmaların ortaya çıkması bu tekniğin zayıf yanlarıdır.

5.3. Dinamik İndirgeme Tekniği

Guyan/Irons tekniğini iyileştirmek için geliştirilen tekniklerden birisi de dinamik indirgeme tekniğidir. Atalet etkilerini de hesaba katmak için bu tekniğin formülasyonuna, orijinal sistemin sürekli rejim harmonik cevabı ile, diğer bir deyişle empedans modeli ile başlanır.

$$\left(\begin{bmatrix} K_{aa} & K_{ac} \\ K_{ca} & K_{cc} \end{bmatrix} - \Omega^2 \begin{bmatrix} M_{aa} & M_{ac} \\ M_{ca} & M_{cc} \end{bmatrix} \right) \begin{Bmatrix} d_a \\ d_c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_a \\ f_c \end{Bmatrix} \quad (5.10)$$

Burada Ω sistemi uyaran harmonik ikazın dairesel frekansıdır. Sistemden çıkarılacak serbestlik derecelerine etkiyen kuvvet olmadığı kabul edilsin ($f_c = 0$).

$$d_c = -(K_{cc} - \Omega^2 M_{cc})^{-1} (K_{ca} - \Omega^2 M_{ca}) d_a \quad (5.11)$$

(5.11)'e göre dinamik indirgeme tekniğinin dönüşüm matrisi (T_{DC}) aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$T_{DC} = \begin{bmatrix} I_{aa} \\ -(K_{cc} - \Omega^2 M_{cc})^{-1} (K_{ca} - \Omega^2 M_{ca}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{aa} \\ \Psi_{DC} \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

(5.12)'den de anlaşıldığı üzere dinamik indirgeme tekniğinde sistemden çıkarılan serbestlik derecelerinin atalet etkileri de hesaba katılmaktadır.

5.4. Komponent Mod Sentezi Tekniđi

Komponent mod sentezi tekniđi, yapısal dinamikte kullanılan ve iyice olgunlaşmış bir süperelman analiz metodudur. Bu metod konu yapıyı bir ya da daha fazla parçaya böler; her parçayı bir takım Ritz baz vektörleri ile tanımlayarak, aktif serbestlik dereceleri ve genelleştirilmiş modal serbestlik dereceleri cinsinden temsil eder. Eğer sistem birden fazla parçaya bölünmüşse, her parça için hesaplamalar tamamlandıktan sonra elde edilen değerler bir araya getirilerek derecesi düşürölmüş sistem elde edilir. Daha yalın bir ifade ile, komponent mod sentezi tekniđi, orijinal sistemin bazı normal modlarının alınarak bunlara hesaplamalı modlar olarak anılan modların eklenmesinden ibarettir. Bir araya getirilen modların toplam sayısı orijinal sistemin normal modlarının sayısından çok daha küçük olduğundan model derecesi düşürölmüş olur [41]. Ayrıca hesaplamalı modların elde edilmesi normal modların elde edilmesinden daha az işlemci gücü ve zamanı gerektirmektedir.

Bu tekniđin dönüşüm matrisi yukarıda da bahsedildiđi üzere mevcut serbestlik derecelerini (d), aktif serbestlik derecelerine ve genelleştirilmiş modal serbestlik derecelerine (z) dönüştürecek ayrıca konu sistemin normal modlarını ve hesaplamalı modları bünyesinde barındıracaktır. En genel halde böyle bir dönüşüm matrisi (T) aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$d = T z \quad (5.13a)$$

$$T = [\Psi \Phi_n] \quad (5.13b)$$

Burada Ψ hesaplamaları modları, Φ_n ise hesaba katılan n adet normal modu göstermektedir. Hesaplamalara katılacak normal modlar genellikle ikaz frekansının iki katına kadar olan bütün modlardır.

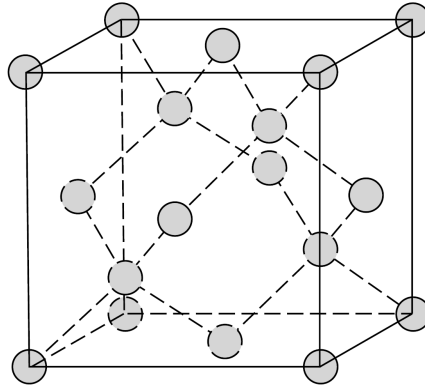
Hesaplamalı modlar olarak anılan modları elde etmek için birçok farklı yöntem mevcuttur [41]. Bunlardan en çok bilinen ve kullanılanı kısıtlı modlar (Constraint Modes, CM) olarak da anılan Craig-Bampton modlarıdır [44]. Kısıtlı mod matrisi aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\Psi_{CM} = \begin{bmatrix} \Psi_{aa} \\ \Psi_{ca} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{aa} \\ -K_{cc}^{-1} K_{ca} \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

6. ELMAS KRİSTALİNİN SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE MODELLENMESİ VE MODEL DERECESİNİN DÜŞÜRÜLMESİ

6.1. Elmas Kristalinin Yapısı

Elmas, cisim köşegeni boyunca $\frac{1}{4}$ oranında ötelenerek, iç içe geçmiş iki yüzey merkezli kübik kristal ya da diğer bir deyişle, tetrahedral noktaların sadece yarısı dolu olacak şekilde, bazı iki atomlu ($0,0,0$ ve $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) olan yüzey merkezli kübik yapıdır [45]. Elmas kristalin Strukturbericht gösterimi A4, uzay grubu $Fd\bar{3}m$ (#227) olarak verilir [46] ve Schönflies gösterimine göre T_h , Hermann-Mauguin sistemine göre $m\bar{3}$ simetrisine sahiptir [47]. Birim hücre toplam 8 atom barındırır ve Pearson gösterimi cF8'dir. Koordinasyon sayısı 4'tür. Elmasın kristal yapısı Şekil 26.1'de gösterilmiştir. Elmas kristalin kafes parametresi $a=3.56741(5)$ Angstrom'dur [48, 49].



Şekil 6.1: Elmas Kristalinin Yapısı [12]

6.2. Elmasın Elastik Sabitleri

Elmas kristalinin elastisite tensörü aşağıda verilmiştir. Burada elastisite tensörünün tarif edildiği eksen takımının doğrultularının, elmas kristalin birim hücresinin kenarlarıyla paralel olduğu kabul edilmiştir. Bu elastik sabitlerin değerleri Tablo 6.1'de verilmiştir.

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

Tablo 6.1: Elmasın Elastik Sabitleri

Referans	$C_{11}[GPa]$	$C_{12}[GPa]$	$C_{44}[GPa]$
Djemia ve diğ., 2007 [50]	1155	281	600
Erdakos ve Ren, 1998 [51]	1076.4	125.2	577.4
Hellwege ve Hellwege [52]	1040	170	550
McSkimin ve diğ., 1972 [53]	1079	124	578

6.3. Elmas Kristalinin Kiriş Eleman ile Modellenmesi

6.3.1. Temel fikir

Şekil 6.1'de gösterilen elmas kristaline, mekanik ve sonlu elemanlar yöntemi gözüyle bakıldığında kovalent bağların, atomik potansiyellerden yararlanmak suretiyle kafes eleman ya da kiriş eleman ile, karbon atomlarının ise noktasal kütlelerle modellenebileceği akla gelmektedir.

Kafes elemanlar sadece eksenel yük taşıyabildiklerinden, malzemelerin simülasyonunda son dönemlerde yaygın olarak kullanılan çok parçacık (many-body) potansiyellerini temsil etmeleri söz konusu değildir.

Öte yandan kiriş elemanlar eksenel yüklere ek olarak eğilme ve burulma yüklerini de taşıyabilirler. Çok parçacık potansiyellerin genel formu (3.9) göz önüne alınırsa bu potansiyel terimlerinin özellikle birincil bağlarla ilgili olanlarının, kiriş elemanların yük taşıma kabiliyeti ile büyük bir benzerlik gösterdiği anlaşılır. Açıkça ifade etmek gerekirse, bağ uzunluğu teriminin eksenel yükleri taşıma ile, bağ açısı ve ters açı terimlerinin eğilme yüklerini taşıma ile ve son olarak dihedral açı teriminin burulma yüklerini taşıma ile benzeştiği görülür.

6.3.2. DREIDING atomik potansiyeli

Bu çalışmada, bir çok parçacık potansiyeli olan, Mayo ve diğ. [29] tarafından geliştirilmiş DREIDING atomik potansiyeli kullanılmıştır. DREIDING potansiyelinin matematiksel formu (3.9) gibidir.

Genel olarak, kovalent sistemlerde bağ enerjisine esas katkı birincil bağlara ilişkin terimlerden gelir [54]. Buna dayanarak konu terimler dışındaki terimler ihmal edilirse DREIDING potansiyeli aşağıdaki gibi verilir.

$$U = \left(K_{ij} \Delta R^2 \right) + \left(\frac{1}{2} C_{ijk} \left(\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_{ijk}^0 \right)^2 \right) + \left(\frac{1}{2} V_{jk} \left[1 - \cos \left[n_{jk} - (\phi_{jk} - \phi_{jk}^0) \right] \right] \right) + (K_i) \quad (6.2a)$$

$$C_{ijk} = \frac{K_{ijk}}{(\sin \theta_{ijk}^0)^2} \quad (6.2b)$$

Bu terimlerin barındırdığı parametrelerin sayısal değerleri elmas kristali için Tablo 6.2'de verilmiştir.

Tablo 6.2: DREIDING Potansiyelinin Karbon Atomu için Parametreleri

Parametre	Değer	Parametre	Değer
K_{ij}	$700 [(kcal/mol)/\text{\AA}^2]$	n_{jk}	3
K_{ijk}	$100 [(kcal/mol)/\text{\AA}^2]$	ϕ_{jk}^0	60°
θ_{ijk}^0	109.471°	K_i	0
V_{jk}	$2.0 [kcal/mol]$		

Dikkat edilirse ters açığı ifade eden K_i parametresi 0 olarak verilmiştir. Bunun sebebi DREIDING potansiyelinde karbon atomu için ters açı etkilerinin dihedral açı terimi içinde ele alınmış olmasıdır.

Çalışma kapsamında, DREIDING potansiyeli dışında, Cornel ve diğ. [28] ve Sun [30] tarafından geliştirilen atomik potansiyeller de denenmiştir. Bu üç potansiyelin parametreleri arasında yaklaşık %5-%15 aralığında değişen bir fark vardır. Bu iki potansiyelin DREIDING potansiyelinden en önemli farkı elmasta bulunan karbon bağları için ters açı teriminin verilmemiş olmasıdır. Bu da mekanik özelliklerde,

DREIDING potansiyeline göre %5-%10 aralığında farka sebep olmaktadır. Bu sebeple bu iki potansiyel ile yapılan çalışmaların sonuçlarına burada yer verilmemiştir.

6.3.3. Kiriş eleman parametrelerinin elde edilmesi

Atomik potansiyeller atomların konumuna göre sistemin enerjisini verdiklerinden, kiriş eleman parametrelerinin enerji eşitliğinden çıkarılması mantıklı gözükmemektedir. Ancak aşağıda verildiği üzere [13] kiriş elemanların enerji eşitlikleri ile atomik potansiyel terimleri arasında bir benzerlik olmadığından ilk bakışta bu parametrelerin elde edilmesi mümkün görünmemektedir.

$$U_{cb} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = (...) = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (6.3a)$$

$$U_e = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = (...) = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (\Delta \theta)^2 \quad (6.3b)$$

$$U_b = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = (...) = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta \phi)^2 \quad (6.3c)$$

Burada U_{cb} , U_e ve U_b sırasıyla çekme-basma enerjisini, eğilme enerjisini ve burulma enerjisini göstermektedir. N , M ve T sırasıyla çekme-basma kuvvetini, eğilme momentini ve burulma momentini göstermektedir. E ve G , Young modülünü ve kayma modülünü göstermektedir. L , A , I ve J sırasıyla kiriş boyunu, kiriş alanını, kiriş alan atalet momentini ve kiriş polar alan atalet momentini göstermektedir. Son olarak ΔL , $\Delta \theta$ ve $\Delta \phi$ sırasıyla kiriş boyundaki değişimi, eğilme açısını ve burulma açısını göstermektedir.

Gelin [54] çalışmasında, harmonik yaklaşımın atomik potansiyel enerji terimlerini ifade etmekte küçük deformasyonlar için yeterli olacağını bildirmektedir. Öyleyse (6.2)'de verilen terimler için harmonik eğri uydurma yapılırsa kiriş eleman parametreleri elde edilebilir. Aşağıda maksimum hata %0.5'ten küçük olacak şekilde eğri uydurma yapıldığında elde edilen kiriş eleman parametreleri verilmiştir.

$$\frac{E A}{L}=700[(kcal/mol)/\text{\AA}^2] \quad (6.4a)$$

$$\frac{E I}{L}=98.28[(kcal/mol)/rad^2] \quad (6.4b)$$

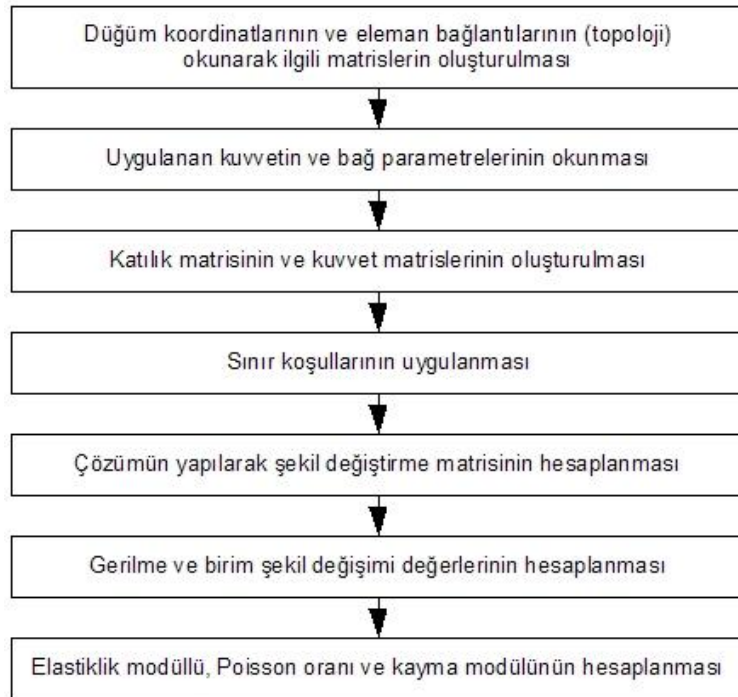
$$\frac{G J}{L}=8.98[(kcal/mol)/rad^2] \quad (6.4c)$$

Karbon atomunun kütlesi ise $m_C=12.011[mol/gr]$ olarak alınmıştır [55].

Böylece (4.18) ve (4.19) matrislerini oluşturmak için gerekli veriler elde edilmiş olur.

6.3.4. Modelin doğrulanması

Yukarıda elde edilen veriler kullanılarak MATLAB ortamında statik analiz yapabilen bir program yazılmıştır. Bu programın akış şeması Şekil 6.2'de verilmiştir. Program ile küp şeklinde olan ve 5x5x5, 10x10x10, 15x15x15 ve 20x20x20 adet birim hücre içeren örnekler analiz edilmiştir. Bu örnekler sırasıyla 1110, 8515, 28234, 66225 adet atom barındırmaktadır ve kenar uzunlukları yaklaşık olarak $1.784[nm]$, $3.567[nm]$, $5.351[nm]$, $7.135[nm]$ 'dir.



Şekil 6.2: MATLAB Programı Akış Şeması

Oluşturulan modellerin Young modülünün ve Poisson oranının belirlenebilmesi için örneklere statik çekme testi uygulanmıştır. Her örneğin $x=0$ düzlemindeki düğümlerinin x yönündeki öteleme serbestlik derecesi sıfır olacak şekilde kısıtlanmıştır. Benzer işlem $y=0$ ve $z=0$ düzlemindeki düğümlere de uygulanmıştır. Böylece simetrik olarak kısıtlanan örnekler, z yönünde çekmeye zorlanmıştır.

Kayma modülünün belirlenebilmesi için ise $z=0$ düzlemindeki düğümlerin x ve z öteleme serbestlik dereceleri, $y=0$ düzlemindeki düğümlerin ise y öteleme serbestlik dereceleri sıfır olacak şekilde kısıtlanmış ve $z=z_{maks}$ düzlemindeki düğümlere x yönünde kuvvet uygulanmıştır.

Hesaplamalarda kullanılan şekil değişimi değerleri, kuvvetin ve kısıtların uygulandığı düzlemlerden bir birim hücre kadar uzaktan ölçülmüştür. Ayrıca bir düzlemin öteleme miktarı ya da kayma miktarı hesaplanırken ilgili düğümlerin şekil değiştirme değerlerinin aritmetik ortalaması alınmıştır.

Elde edilen sonuçlar literatürde verilen deneylerle yüksek derecede uyumlu bulunmuştur. Sayısal değerler bir sonraki bölümde verilmiştir.

6.4. Model Derecesinin Düşürülmesi

Model derecesi düşürme işlemi 10x10x10 adet birim hücre içeren örnek için ANSYS ortamında komponent mod sentezi (Component Mode Synthesis, CMS) tekniği ile yapılmıştır; elde edilen derecesi düşürülmüş model ve orijinal modelin dinamik davranışları karşılaştırılmıştır.

Statik analizlerde kullanılan model ANSYS ortamında tekrar oluşturulmuştur. Model oluşturulurken kullanıcı tanımlı MATRIX27 elemanı katılık ve kütle matrisi seçenekleri ile kullanılmıştır. Böylece statik analizde kullanılan ve (4.18) ile (4.19)'da verilen formülasyon korunmuştur.

Örnek tek bir komponent olarak ele alınmıştır. Aktif serbestlik dereceleri olarak, kısıtlanan $z=0$ düzlemindeki düğümler ve kuvvetin uygulandığı $z=z_{maks}$ düzlemindeki düğümler seçilmiştir. Böylece sistemin serbestlik derecesi 51762'den 2628'e düşürülmüştür. Böylece modelin derecesi %95 oranında düşürülmüştür. Model derecesi düşürme ve süper eleman analiz parametreleri Şekil 6.3 ve Şekil 6.4'te gösterilmiştir.

Component Mode Synthesis

[CMSOPT] Component Mode Synthesis Options

CMSMethod: Fixed Interface

NMODE No. of modes to extract: 10

FREQB Start Freq (initial shift): 0

FREQE End Frequency: 50

[SEOPT] Substructuring Analysis Options

Sename Name to be assigned to -: elmas_kr

- CMS SuperElement matrix file

SEMATR Matrices to be generated: Stiffness+Mass

SEPR Items to be printed: No printout

SESST Save space for [S]? ☐ No

(([S] is the stress stiffness matrix))

[LUMPM] Use lumped mass approx? ☐ No

OK Cancel

Şekil 6.3: Model Derecesi Düşürme Parametreleri

Full Transient Analysis

[NLGEOM] Large deform effects ☐ Off

[SSTIF] Stress-stiff effects ☐ Off

[NROPT] Newton-Raphson option: Program chosen

Adaptive descent: ON if necessary

[TRNOPT] VT Speedup: No

[EQSLV] Equation solver: Program Chosen

Tolerance/Level -

- valid for all except Frontal and Sparse Solvers

Multiplier -

- valid only for Precondition CG

Single Precision - ☐ Off

- valid only for Precondition CG

Memory Save - ☐ Off

- valid only for Precondition CG

[TOFFST] Temperature difference-: 0

- between absolute zero and zero of active temp scale

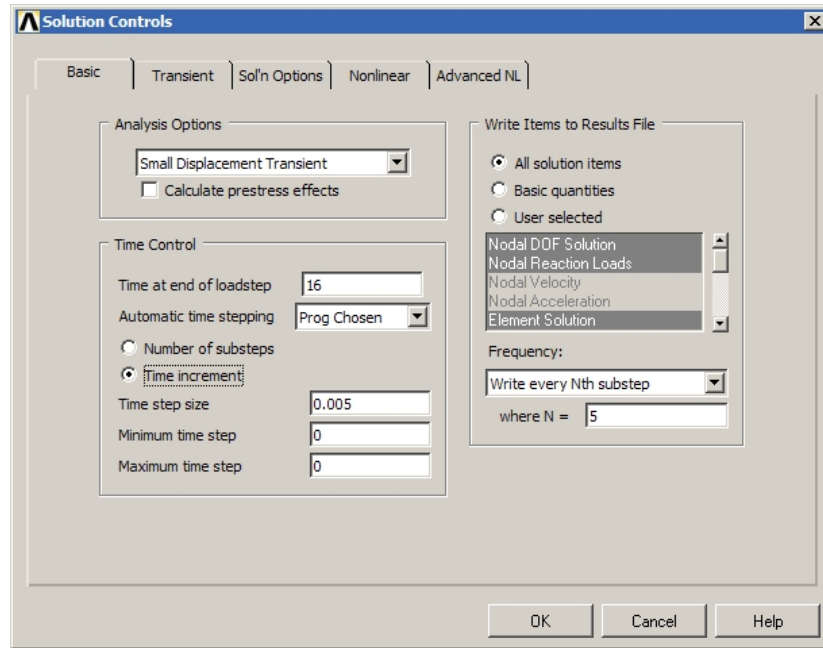
OK Cancel Help

Şekil 6.4: Süper Eleman Analiz Parametreleri

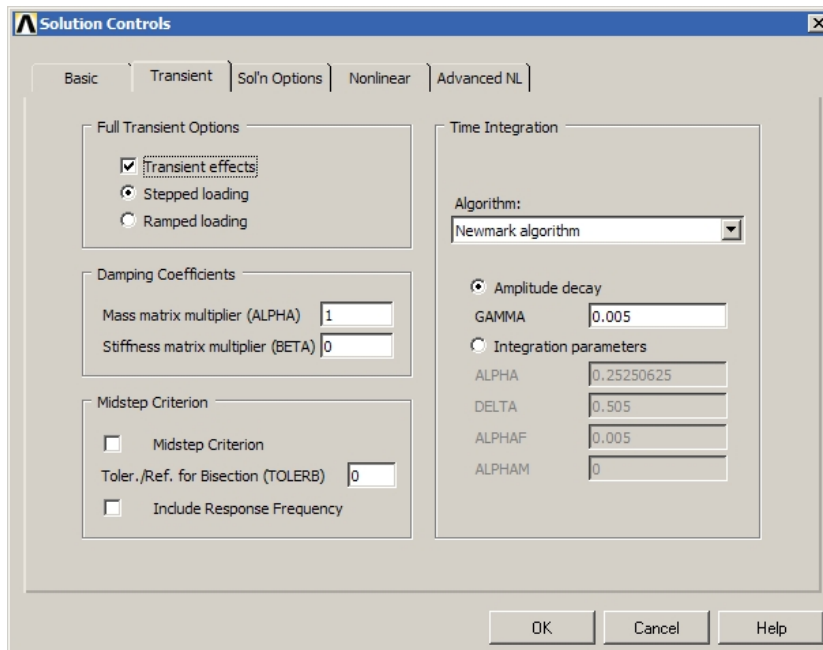
Hem orijinal model hem de derecesi düşürülmüş model $z=0$ düzlemindeki düğümlerin bütün serbestlik dereceleri sıfır olacak şekilde kısıtlanmış ve z yönünde her düğüme $100000[fN]$ büyüklüğünde çekme şeklinde basamak girişi

uygulanmıştır. Ayrıca hem statik hem dinamik cevabın gözlenebilmesi için her iki modele de $S=M$ olacak şekilde orantısal sönüm uygulanmıştır (S sönüm matrisi, M kütle matrisi). Analiz süresi toplam $1600[ps]$ 'dir. Analiz seçenekleri Şekil 6.5 ve Şekil 6.6'da verilmiştir. Diğer seçenekler var sayılan değerler olarak bırakılmıştır.

Her iki modelin dinamik cevabı birbiriyle büyük bir uyum içindedir. Sayısal değerler bir sonraki bölümde verilmiştir.



Şekil 6.5: ANSYS Analiz Seçenekleri



Şekil 6.6: ANSYS Analiz Seçenekleri

7. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

7.1. Modelin Doğrulanması: Statik Analiz Sonuçları ve Değerlendirme

Elmas kristali için deneysel olarak elde edilen Young modülü (E), Poisson oranı (ν) ve kayma modülü (G) Tablo 7.1'de ilgili referanslarla birlikte verilmiştir. Dikkat edilirse Young modülü ve kayma modülü arasında yaklaşık %10'luk bir fark vardır. Bu durum Tablo 6.1'de de görülmektedir. Poisson oranı için ise çok daha yüksek bir fark mevcuttur. Literatürde Poisson oranı için çok farklı değerlere rastlanmaktadır. Örneğin Hellwege ve Hellwege [52] Poisson oranını $\nu=0.115$ olarak vermiştir. Wilks ve Wilks [57] çalışmalarında, literatürde Young modülü ve kayma modülü için %10 civarında Poisson oranı için ise çok daha büyük bir saçılma olduğunu doğrulamaktadırlar.

Tablo 7.1: Elmasın Mekanik Özellikleri

Referans	$E [MPa]$	ν	$G [MPa]$
Djemia ve diğ., 2007 [50]	1008	0.153	600
Wang ve diğ., 2004 [56]	1143	0.013	579

Modelin doğrulanması için yapılan statik analiz sonuçları Tablo 7.2'de verilmiştir.

Tablo 7.2: Statik Analiz Sonuçları

Örnek Büyüklüğü	$E [MPa]$	ν	$G [MPa]$
5x5x5	957	0.153	514
10x10x10	1013	0.129	602
15x15x15	1032	0.122	635
20x20x20	1041	0.119	649

Young modülü ve kayma modülü göz önüne alındığında elde edilen değerlerin deneysel hassasiyette olduğu açıkça görülmektedir; bu bakımdan sonlu elemanlar modeli çok başarılıdır. Poisson oranı değerleri ise literatürde verilen değerlerin

yaklaşık olarak ortasına denk gelmektedir. Literatürde verilen değerlerin geniş bir aralığa saçılması Poisson oranı için bir yorum yapmayı şimdilik imkansız kılmıştır.

Tablo 7.2'deki veriler incelendiğinde hesaplanan değerler arasında küçük farklılıklar göze çarpmaktadır. Bunun sebebi, kristal büyüdükçe yüzeyde yer alan atomların sayısının toplam atom sayısına olan oranının hızlı bir şekilde değişmesidir. Bu oran, çevresindeki atomlara simetrik olarak bağlı olmayan atomların sayısını değiştirmektedir. Bu da hesaplanan değerlerde küçük sapmalara sebep olmaktadır.

Ayrıca, kurulan modellerle ilgili önemli noktalardan biri de, sayısal bir yöntem olan sonlu elemanlar yönteminin kullanılmasına karşın elde edilen değerlerin kesin oluşudur. Yani Tablo 7.2'de verilen değerlerde sonlu elemanlar yönteminin kendisinden kaynaklanan herhangi hata yoktur.

Böylece kovalent bağlı bir kristalin sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak başarı ile modellenebileceği gösterilmiştir. Bu çalışmada verilen formülasyon korunarak, doğru atomik potansiyel parametreleri bulunabilirse her türlü kovalent bağlı yapıyı modellemek mümkündür. Aynı yaklaşım iyonik bağlı yapıların modellenmesinde de kullanılabilir. Metalik bağlı yapıların modellenmesi için ise, metalik bağın yönsüz yapısı nedeniyle, iki parçacık potansiyelleri ile kafes elemanın kullanımı daha uygun görünmektedir.

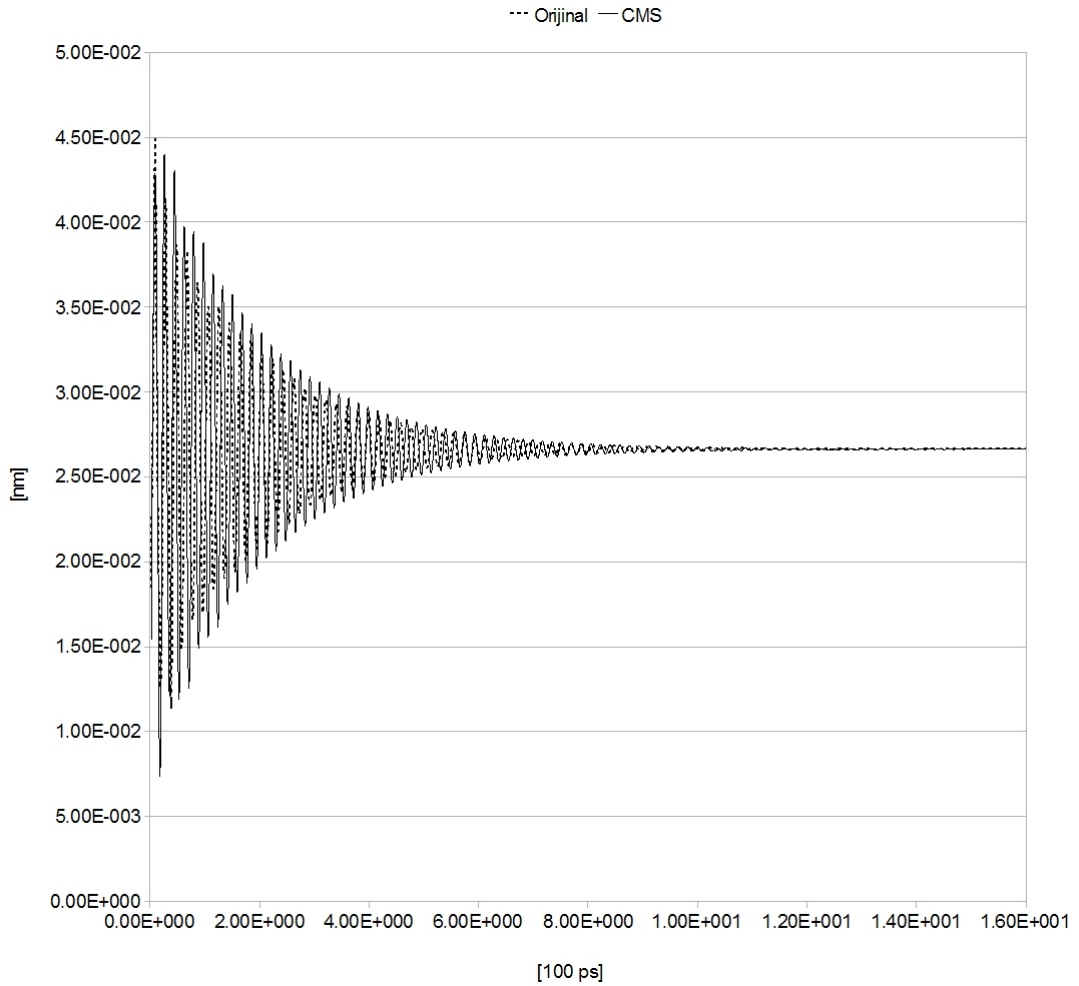
7.2. Model Derecesinin Düşürülmesi: Dinamik Analiz Sonuçları ve Değerlendirme

Şekil 7.1'de derecesi düşürülmüş sistem ile orijinal sistemin basamak girişi için zaman cevabı $z = z_{maks}$ düzleminin tam ortasındaki düğüm için gösterilmiştir.

Şekil 7.1 incelendiğinde ilk göze çarpan nokta sürekli rejim cevabının, ki burada statik çekme için şekil değişimi demektir, çok yakın olduğudur. Aslında sürekli rejim cevapları çok yakın değil tamamen aynıdır ve değeri $0.0266[nm]$ 'dir. Şekilde görünen fark grafiğin çizdirildiği yazılımın (OpenOffice.org Calc) her iki veriyi de gösterme özelliğinden kaynaklanmaktadır.

Geçici rejim cevabı incelendiğinde ise bir miktar faz farkı göze çarpmaktadır. Bu faz farkının sebebi çözüm sırasında tanıtılan orantısal sönüm ve sayısal entegrasyon işlemidir.

Böylece model derecesi düşürme tekniklerinin bu çalışmada aktarılan modelleme tekniği ile birlikte malzeme modellemek için kullanılabileceği gösterilmiştir. Bu çalışmada verilen yöntem kullanılarak, aynı işlem gücünde bilgisayarlarla çok daha büyük yapıların analizi yapılabilir.



Şekil 7.1: Derecesi Düşürülmüş Sistemin ve Orijinal Sistemin Basamak Girişi Cevabı

KAYNAKLAR

- [1] **Dobrzanski, L. A.**, 2006. Significance of Material Science for The Future Development of Societies, *Journal of Material Processing Technology*, **175**, 133-148.
- [2] **Vvedensky, D. D.**, 2004. Multiscale Modeling of Nanostructures, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **16**, 1537-1576.
- [3] **Srivastava, D. ve Atluri, S. N.**, 2002. Computational Nanotechnology: A Current Perspective, *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences*, **5**, 531-538.
- [4] **Liu, W. K., Karpov, E. G., Zhng, S., ve Park, H. S.**, 2003. An Introduction to Computational Nanomechanics and Materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 1529-1578.
- [5] **Muhammed, M. ve Tsakalakos, T.**, 2003. Nanostructured Materials and Nanotechnology: Overview, *Journal of Korean Ceramic Society*, **40**, 1027-1046.
- [6] **Ghoniem, N. M. ve Cho, K.**, 2002. The Emerging Role of Multiscale Modeling in Nano- and Micro-mechanics of Materials, *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, **3**, 147-173.
- [7] **Liu, W. K., Jun, S., ve Qian, D.**, 2005. Computational Nanomechanics of Materials, Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology edited by M. Rieth and W. Schommers, American Scientific Publishers.
- [8] **Raabe, D.**, 1998. Computational Material Science: The Simulation of Materials, Microstructure and Properties, WILEY-VCH.
- [9] **Shen, S. ve Atluri, S. N.**, 2004. Computational Nano-mechanics and Multiscale Simulation, *CMC: Computers, Materials, & Continua*, **1**, 59-90.
- [10] **Ashby, M. F. ve Jones, D. R. H.**, 1996. Engineering Materials 1: An Introduction to Their Properties and Applications, Butterworth-Heinemann.
- [11] **Roesler, J., Harders, H., ve Baekler, M.**, 2007. Mechanical Behaviour of Engineering Materials: Metals, Ceramics, Polymers, and Composites, Springer Verlag.
- [12] **Callister, W. D.**, 2005. Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach, John Wiley & Sons.
- [13] **Timoshenko, S. P. ve Goodier, J. N.**, 1951. Theory of Elasticity, McGraw-Hill.
- [14] **Sadd, M. H.**, 2005. Elasticity: Theory, Applications, and Numerics, Elsevier.
- [15] **Reddy, J. N.**, 2004. Mechanics of Laminated Composite Plates and Shells: Theory and Analysis, CRC Press.

- [16] **Oden, J. T., Prudhomme, S., Romkes, A, ve Bauman, P. T.**, 2006. MultiScale Modeling of Physical Phenomena: Adaptive Control of Models, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **28**, 2359-2389.
- [17] **Kittel, C.**, 1996. Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons.
- [18] **Ohno, K., Esfarjani, K., ve Kawazoe, Y.**, 1999. Computational Materials Science: From Ab Initio to Monte Carlo Methods, Springer.
- [19] **Hohenberg, P. ve Kohn, W.**, 1964. Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, **136**, 864-871.
- [20] **Kohn, W. ve Sham, L. J.**, 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, **140**, 1133-1138.
- [21] **Haile, J. M.**, 1992. Molecular Dynamics Simulation, Wiley & Sons.
- [22] **Hoover, W. G.**, 1986. Molecular Dynamics, Springer-Verlag.
- [23] **Rapaport, D. C.**, 1995. The Art of Molecular Dynamics, Cambridge University Press.
- [24] **Jones, J. E.**, 1924a. On the Determination of Molecular Fields. I. From the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature, *Proceedings of the Royal Society of London - Series A*, **106**, 441-462.
- [25] **Jones, J. E.**, 1924b. On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas, *Proceedings of the Royal Society of London - Series A*, **106**, 463-477.
- [26] **Tersoff, J.**, 1987. New Empirical Approach for The Structure and Energy of Covalent Systems, *Physical Review*, **37**, 6991-7000.
- [27] **Tersoff, J.**, 1988. Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon, *Physical Review Letters*, **61**, 2879-2882.
- [28] **Cornell, W. D., Cieplak, P., Bayly, C. I., Gould, I. R., Merz, K. M., Ferguson, D. M., Spellmeyer, D. C., Fox, T., Caldwell, J. W., ve Kollman, P. A.**, 1995. A Second Generation Force Field for Simulation of Proteins, Nucleic Acids, and Organic Molecules, *Journal of American Chemical Society*, **117**, 5179-5197.
- [29] **Mayo, S. L., Olafson, B. D., ve Goddard, W. A.**, 1990. DREIDING : A Generic Force Field for Molecular Simulations, *Journal of Physical Chemistry*, **94**, 8897-8909.
- [30] **Sun, H.**, 1998. COMPASS: An Ab Initio Force-Field Optimized for Condensed-Phase Applications – Overview with Details on Alkane and Benzene Compounds, *Journal of Physical Chemistry B*, **102**, 7338-7364.
- [31] **Plimpton, S.**, 1995. Computational Limits of Classical Molecular Dynamics Simulations, *Computational Material Science*, **4**, 361-364.
- [32] **Ercolessi, F.**, 1997. A Molecular Dynamics Primer, International School for Advanced Studies, Trieste, Italy, <http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/> 25.12.2007 tarihinde erişildi.
- [33] **McCracken, D. D.**, 1955. The Monte Carlo Method, *Scientific American*, **192**, 90-95.

- [34] **Palm, W. J.**, 2005. System Dynamics, McGraw-Hill Higher Education.
- [35] **Gawronski, W.**, 2004. Advanced Structural Dynamics and Active Control of Structures, Springer-Verlag.
- [36] **Palm, W. J.**, 2007. Mechanical Vibration, John Wiley & Sons.
- [37] **Bathe, K. J.**, 1996. Finite Element Procedures, Prentice Hall.
- [38] **Moaveni, S.**, 1999. Finite Element Analysis: Theory and Application With ANSYS, Prentice Hall.
- [39] **Rao, S. S.**, 2004. The Finite Element Method in Engineering, Butterworth-Heinemann.
- [40] **Liu, G. R. ve Quek, S. S.**, 2003. The Finite Element Method: A Practical Course, Butterworth-Heinemann.
- [41] **Gu, J.**, 2000. Efficient Model Reduction Methods for Structural Dynamics Analyses, *Doktora Tezi*, The University of Michigan, Michigan.
- [42] **Guyan, R. J.**, 1965. Reduction of Stiffness and Mass Matrices, *AIAA Journal*, **3**, 380-?.
- [43] **Irons, B. M.**, 1965. Structural Eigenvalue Problems: Elimination of Unwanted Variables, *AIAA Journal*, **3**, 961-962.
- [44] **Craig, R. R. ve Bampton, M. C. C.**, 1968. Coupling of Substructures for Dynamic Analysis, *AIAA Journal*, **6**, 1313-1319.
- [45] **Solyom, J.**, 2007. Fundamentals of the Physics of Solids: Volume 1: Structure and Dynamics, Springer.
- [46] **Hahn, T.**, 2002. International Tables for Crystallography Vol. A edited by T. Hahn, Kluwer.
- [47] **Cleland, A. N.**, 2003. Foundations of Nanomechanics: from Solid-state Theory to Device Applications, Springer.
- [48] **Holloway, H., Hass, K. C., ve Tamor, M. A.**, 1991. Isotopic dependence of the lattice constant of diamond, *Physical Review B (Condensed Matter)*, **44**, 7123-7126.
- [49] **Yamanaka, T., Morimoto, S., ve Kanda, H.**, 1994. Influence of the isotope ratio on the lattice constant of diamond, *Physical Review B (Condensed Matter)*, **49**, 9341-9343.
- [50] **Djemia, P., Tallaire, A., Achard, J., Silva, F., ve Gicquel, A.**, 2007. Elastic properties of single crystal diamond made by CVD, *Diamond & Related Materials*, **16**, 962-965.
- [51] **Erdakos, G. B. ve Ren, S.**, 1998. Poisson's Ratios in Diamond/Zincblende Crystals, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **59**, 21-26.
- [52] **Hellwege, K. H. ve Hellwege, A. H.**, 1979. Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology Vol 11 edited by Hellwehe, K. H., and Hellwege, A. H., Springer-Verlag.
- [53] **McSkimin, H. J., Andreatch, P., ve Glynn, P.**, 1972. The Elastic Stiffness Moduli of Diamond, *Journal of Applied Physics*, **43**, 985-987.

- [54] **Gelin, B. R.**, 1994. Molecular Modeling of Polymer Structures and Properties, Hanser/Gardner Publications Cincinnati.
- [55] **Herrero, C. P.**, 2001. The Isotopic Mass and Lattice Parameter of Diamond; A Path Integral Simulation, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **13**, 5127-5134.
- [56] **Wang, S. F., Hsu, Y. F., Pu, J. C., Sung, J. C., ve Hwa, L. G.**, 2004. Determination of Acoustic Wave Velocities and Elastic Properties for Diamond and Other Hard Materials, *Material Chemistry and Physics*, **85**, 432-437.
- [57] **Wilks, J. ve Wilks, E.**, 1991. Properties and Applications of Diamond, Butterworth-Heinemann.

ÖZGEÇMİŞ

Volkan Aydınol, 1981 yılında Ankara'da dünyaya geldi. İlk öğrenimini Özel Evrensel Kolej ve Yalçın Eski Yapan İlköğretim Okulu'nda tamamladı. 1999 yılında İncirli Lisesi'nden mezun olarak İstanbul Teknik Üniversitesi'nin Makina Mühendisliği Bölümü'ne girdi. 2005 yılında bu bölümden mezun oldu ve İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, İleri Teknolojiler ABD, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği programına kabul edildi.