<u>İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ</u>

NANOİNDENTASYON DENEYİ İLE MALZEME DAVRANIŞLARINI İNCELEME, SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE SİMULASYONU VE TERSİNİR DAVRANIŞ TANIMLAMA

YÜKSEK LİSANS TEZİ Kamil Armağan GÜL

Anabilim Dalı : Metalurji ve Malzeme Mühendisliği

Programı: Malzeme Mühendisliği

ARALIK 2010

<u>İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ</u>

NANOİNDENTASYON DENEYİ İLE MALZEME DAVRANIŞLARINI İNCELEME, SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE SİMULASYONU VE TERSİNİR DAVRANIŞ TANIMLAMA

YÜKSEK LİSANS TEZİ Kamil Armağan GÜL (506071411)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih :5 Kasım 2010Tezin Savunulduğu Tarih :2 Aralık 2010

Tez Danışmanı :Prof. Dr. Eyüp Sabri KAYALI (İTÜ)Diğer Jüri Üyeleri :Prof. Dr. Hüseyin ÇİMENOĞLU (İTÜ)Prof. Dr. Arif Nihat GÜLLÜOĞLU (MÜ)

ARALIK 2010

ii

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitimim boyunca tez danışmanım olmasının ötesinde çok çeşitli konularda bilgi ve tecrübesi ile geleceğimi ve kariyerimi yönlendirmem konusunda bana yardımcı olan, maddi manevi olarak hiçbir şekilde desteğini esirgemeyen çok değerli hocam Sayın Prof. Dr. Eyüp Sabri KAYALİ 'ya sonsuz teşekkür ve şükranlarımı sunarım.

Yüksek lisans eğitimim boyunca bana destek olan bilgi ve tecrübesiyle bana yol gösteren, laboratuar olanaklarından yararlanmamı sağlayan değerli hocam Sayın Prof.Dr. Hüseyin ÇİMENOĞLU 'na sonsuz teşekkür ve şükranlarımı sunarım.

Tezdeki deneysel çalışmalarım esnasında bana yardımcı olan değerli hocam Sayın Doç.Dr. Murat BAYDOĞAN' a teşekkür ederim.

Çalışmalarımı tamamlamada katkıları olan ve bana yol gösteren, fikirlerini esirgemeyen Yük.Müh. Mert GÜNYÜZ ve Dr. Özgür ÇELİK'e teşekkürü borç bilirim. Deneysel çalışmaları yapmamda ve cihazları kullanmada bana yardımcı olan Yük. Müh. Rıza KARADAŞ'a ve çalışma odasını, çalışma masasını benle paylaşan araştırma görevlisi Yük.Müh. Onur MEYDANOĞLU' na teşekkür ederim.

Sonlu elemanlar ve malzeme davranışları konusunda bana bilgilerini aktaran Prof.Dr. Samuel Forest'a ve Dr.Müh. Nicolas Rupin'e teşekkürlerimi sunarım.

Elde ettiğim başarı bursu ile bana yüksek lisans eğitimim boyunca ekonomik destek sağlayan TÜBİTAK Bilim İnsanı Destekleme Daire Başkanlığı'na teşekkür ve şükranlarımı iletirim.

Son olarak beni yetiştirip başarılı bir mühendis ve birey olmamı sağlayan aileme sonsuz saygı ve sevgilerimi sunarım.

Aralık, 2010

Kamil Armağan GÜL

Metalurji ve Malzeme Mühendisi

iv

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	iii
İÇİNDEKİLER	v
KISALTMALAR	ix
ÇİZELGE LİSTESİ	xi
ŞEKİL LİSTESİ	xiii
ÖZET	xvii
SUMMARY	xix
1. ÇALIŞMANIN AMACI VE KULLANILACAK PERSPEKTİF	1
1.1 Çalışmanın Önemi	1
1.2 Indentasyon un Tanımı	2
1.3 Nanoindentasyon	3
1.4 İndentasyon Cihazının Çalışma Prensibi	3
1.5 Seçilen Simulasyon Yaklaşımı	4
1.6 Simulasyon Yaklaşımındaki Kavramlar	5
2. İNCELENEN SPESİFİK OLAYLAR	7
2.1 Ölçülen ve Belirlenen Özellikler	8
2.2 Indetasyon Sonuçlarını Etkileyen Temel Faktörler	. 10
2.2.1 İndentasyonda boyut etkisi (indentation size effect-ISE)	. 10
2.2.2 Batıcı uç pürüzlülüğü	. 11
2.2.3 Batıcı uç geometrisi	11
2.2.4 Yüzey pürüzlülüğü	11
2.2.5 Kalıntı gerilmeler	12
3. DERINLIK HASSASİYETLİ YÖNTEMLERDE (DHY) DENEY	
VERİLERİNİN İŞLENMESİ	13
3.1 Derinlik Hassasiyetli İndentasyon Deneyi	13
3.2 DHY ile Çeşitli Mekanik Özelliklerin Ölçümü	14
3.3 Plastik Deformasyon Prosesi Teorik Yaklaşım	14
3.4 Eğrilerin Analizi	14
3.4.1 Yük(F)-batma derinliği (h) ilişkileri	14
3.4.2 Yükleme durumunda temas alanı değişimi	16
3.4.3 Boşaltma durumunda temas alanı değişimi	17
3.4.3.1 Boşaltma eğrisi incelemesi	17
3.4.3.2 Derinlik değerlerinin anlamları	17
3.5 Veri Işleme Yöntemleri	18
3.5.1 Eğri uydurma yöntemleri	18
3.5.1.1 Doerner Nix eğri uydurma yöntemi	18
3.5.1.2 Oliver ve Pharr eğri uydurma yöntemi	. 19
3.5.1.3 Marx eğri uydurma yöntemi	19
3.5.2 Temas alanı hesaplama yöntemleri	. 19
3.5.2.1 Suresh yöntemi	. 19
3.5.2.2 Doerner N1x yöntem1	20

3.5.2.3 Oliver ve Pharr yöntemi	20	
3.6 Indentasyonda Enerji Yaklaşımı		
4. GEOMETRİK MODELLERİN OLUŞTURULMASI	23	
4.1 Batıcı Uç Geometrileri	23	
4.1.1 Berkovich uç	24	
4.1.2 Vickers uç	24	
4.1.3 Küresel uç	24	
4.1.4 Eğri tepeli sivri uç	24	
4.2 Numune Geometrisi	25	
5. SONLU ELEMANLAR AĞININ (MESH) OLUŞTURULMASI	27	
5.1 Numuneler için Seçilen Mesh Ağı	27	
5.1.1 Genel yaklaşım	27	
5.1.2 Silindirik numune	28	
5.1.3 Küp şekilli numune	29	
5.2 Batıcı Üç Sonlu Elemanlar Ağı	31	
5.2.1 Berkovich batıcı uç	31	
5.2.2 Küresel uc	33	
5.3 Nanoindentasyon Modeli için Sonlu Elemanlar Sınır Koşulları	36	
6. KONTAK MEKANİĞİ VE GENEL KONSEPTİ	39	
6.1 Hertz Elastik Kontak Teorisi ve Cözümlemesi	39	
6.2 Genişleyen Kavite Modeli (GKM)	40	
6.3 Code-Aster ile discret kontak modellemesi	41	
6.3.1 Kontak cifti olusumunda slave-master konsepti	42	
6.3.2 Nodal, yüzeysel ayrışma ve kontak çifti normallerinin tanımlanması	43	
6.3.3 Signorini kontak sartları	44	
6.3.4 Kontak şartlarının özeti	45	
6.4 Sürekli Yöntem ile Kontak Modellemesi	45	
7. NANOİNDENTASYONDA KULLANILAN ANALİTİK VE NÜMERİK		
MALZEME DAVRANIŞ KANUNLARI	47	
7.1 Numerik Malzeme Davranış Modelleri	47	
7.1.1 Elastik davranış modeli	47	
7.1.2 Elasto-plastik davranışlar	48	
7.1.3 Elasto visko plastik: tekkristal davranış modeli	49	
7.1.4 Kocks-Rauch dislokasyon dinamiği modeli	49	
7.2 Diğer Numerik Modeller	49	
7.3 Analitik Davranış Modelleri	50	
7.3.1 Indentation-size-effect bağımlı davranış modelleri	50	
7.4 Davranış Kanunlarının Mekanik Modellenmesi	50	
7.5 Tam Elastik Davranış	52	
7.6 Elasto-Plastik Davranış	52	
7.6.1 Bilineer izotropik pekleşme bağıntısı	55	
7.6.2 Multilineer (çekme eğrisi ile ifade edilen) plastisite davranışı	56	
7.6.3 Üssel ilişkili izotropik pekleşme bağıntısı (powerlaw isotropic		
plasticity)	57	
7.7 Elastoviskoplastik Tekkristal Davranış Kanunu	58	
7.7.1 Kayma sisteminin tanımlanması	58	
7.7.2 Yüzey merkezli kübik (YMK) kafesteki kayma sistemleri	59	
7.7.3 Kristal viskoplastisitesi	60	
=	00	
7.7.4 Elastoviskoplastik davranışın formülasyonu	60	

7.7.4.2 Kinematik pekleşme (hardening) oluşumunun formülasyonu	62
7.7.4.3 Isotropik pekleşme (hardening) oluşumunun formülasyonu	62
7.8 Kocks-Rauch Modeli Formülasyonu	63
7.9 Dislokasyon Dinamiği Modelleri Formülasyonu	64
8. DENEYSEY ÇALIŞMALAR	69
9. GERÇEKLEŞTİRİLEN SİMÜLASYONLAR	75
9.1 İki Boyutlu Analizler ve Bilineer Davranış için Parametre Belirleme	75
9.2 Üç Boyutlu Simülasyonlar	80
9.2.1 Elastisite simülasyonları	80
9.2.2 Bilineer Von Mises izotropik plastisite temelli simülasyonlar	81
9.2.2.1 İdeal Berkovich uç	81
9.2.2.2 Uç eğriliği verilerek yapılan simülasyonlar	89
9.2.3 Multilineer Von Mises izotropik plastisitesi	89
9.2.4 Üstel ilişkili Von Mises izotropik plastisitesi	90
9.3 Tek-kristal Viskolplastisitesi Simülasyonları	93
9.4 Kocks-Rauch Dislokasyon Dinamiği Simülasyonları	96
9.5 Davranış Kanunları Genel Bulgular	96
10. DENEYSEL VERİLERİN ANALİZİ	97
10.1 Nitrürsüz 316L 2µm Batma Derinliği Deneyi	97
10.1.1 Eğri uydurma ve klasik özellik inceleme	97
10.1.2 Sonuçlardaki sapmalar	99
10.1.3 Dislokasyon yoğunluğu hesabı ve dislokasyon bağımlı eğriler	100
10.1.4 Elde edilen genel bulgular ve öneriler	102
11. GENEL SONUÇLAR VE ÖNERİLER	103
KAYNAKLAR	105
ÖZGEÇMİŞ	111

viii

KISALTMALAR

AFM	: Atomik Kuvvet Mikroskopisi					
BD	: Batma Derinliği					
DBE	: Deney Boşaltma Eğimi					
E	: Malzemenin Young modülü					
Et	: Malzemenin Plastisite Modülü					
GKM	: Genişleyen kavite modeli					
GND	: Geometrik Olarak Gerekli Dislokasyon Yoğunluğu					
GPa	: Gigapaskal					
ISE	: Indentasyonda Boyut Etkisi (Indentation Size Effect)					
keV	: Kilo elektron volt					
KY	: Kuvvet-Yerdeğiştirme					
Maks.	: Maksimum					
Min.	: Minimum					
mN	: Mili Newton					
MPa	: Megapaskal					
nm	: Nanometre					
Para.	: Kullanılan Parametre Bileşimleri					
SEM	: Taramalı Elektron Mikroskobu					
SSD	: Statik Olarak Barındırılan Dislokasyon Yoğunluğu					
Sy	: Akma Gerilmesi					
μm	: Mikrometre					

ÇİZELGE LİSTESİ

<u>Sayfa</u>

Çizelge 1.1 : Değişik İndentasyon Uçlarının Geometrik Bağıntı ve Özellikleri	2
Çizelge 3.1 : C sabiti hesaplama denklemleri	15
Çizelge 5.1 : 1boyutlu sonlu elemanların bünye fonksiyonları	33
Çizelge 7.1 : VonMises ve Tresca kriteri karşılaştırılması	54
Çizelge 8.2 : Standart 316L malzeme parametreleri	69
Çizelge 8.3 : Östenitik ve beynitik tipte çelik malzeme parametreleri	70
Çizelge 8.4 : 316L numunesinde 2 µm batma derinliği deneyinden elde edilen	
analitik veriler	72
Çizelge 8.5 : Nitrürlü 316L numunesinin 2 µm batma derinliği deneyinden elde	
edilen analitik veriler	72
Çizelge 8.6 : Nitrürlü 316L numunesinde 5 µm ve 10 µm batma derinliği deney	
sonuçları	73
Çizelge 9.2 : Eksen simetrik simülasyonun sonuçlarının yorumlanması - Deney	
Eğimi 1.08	79
Çizelge 10.1 : 2µm batma derinliği deney eğrisinden elde edilen özellikler	98
Çizelge 10.2 : Alan ve Young modülü hesabında oluşan sapmalar	100

xii

ŞEKİL LİSTESİ

<u>Sayfa</u>

Şekil 1.2 : Vickers tipi indentasyonun şematik gösterimi	1
Şekil 1.2 : Tipik yük-batma derinliği eğrisi	3
Şekil 1.3 : Atomik Kuvvet Mikroskopu ile elde edilmiş nano iz görüntüsü	4
Şekil 1.4 : Nanoindentasyon test cihazının örnek işleyiş şeması	4
Şekil 2.1 : Deney sonucu elde edilen kuvvet-yerdeğiştirme eğrisi	7
Şekil2.2 : a) Taşma oluşumu, kontak yüksekliği ile görülen alan(A) ve teorik	
alan(As) gösterimi b)Çökme oluşumu,kontak yüksekliği ile görülen	alan
ve teorik alan gösterimi	8
Şekil 2.3 : Berkovich uçta görülen uç eğriliği a) AFM resmi, b)Modellenmiş	
uç resmi	11
Şekil 3.1 : İki atom arasındaki mesafe (r) ile atomlar arası bağ enerjisinin	
değişimi	13
Şekil 3.2 : Yük batma derinliği eğrisi ve farklı derinlik değerleri	15
Şekil 3.3 : Temas alanı içindeki ve dışındaki yer değişiminin gösterimi	17
Şekil 3.4 : İndentasyonda toplam enerji ve enerji bileşenleri: Wt=We+Wp	21
Şekil 4.1 : Berkovich batıcı uç geometrisi	23
Şekil 4.2 : Vickers batıcı uç geometrisi	23
Şekil 4.3 : Küp numune ve küresel uç (a) ve Berkovich uç modellemesi	24
Şekil 4.4 : Konik bir ucun tepe eğriliğinin matematiksel şematik gösterimleri	25
Şekil 4.5 : İki Boyutlu sonlu elemanlar modeli	25
Şekil 4.6 : İki boyuttan üç boyuta eksenel döndürme ile silindirik numune	
oluşturulması	26
Şekil 5.1 : Kontak bölgesinde sık eleman içeren tipte üç boyutlu sonlu	
elemanlar ağının gösterimi	28
Şekil 5.2 : Tüm üst yüzeyinde sık eleman içeren tipte üç boyutlu sonlu	
elemanlar ağının gösterimi	28
Şekil 5.3 : İki boyutlu modelin 3boyutlu silindirik model ve elemanlarla	
oluşturulmuş şeklinin gösterimi	29
Şekil 5.4: Küp şeklindeki numunenin orta noktaya doğru sıklaştırılmış sonlu	
elemanlar ağı içeren tipi	30
Şekil 5.5 : Kaba ve sık bir ağ yapısında ideal Berkovich ucun bırakacağı izin	
temsili görüntüleri	31
Şekil 5.6 : Offset olarak oluşturulan küt uç.	32
Şekil 5.7 : Tam eğrilik verilerek oluşturulan uç.	32
Şekil 5.8 : Berkovich uca kademeli olarak eğrilik verilmiştir.	32

Şekil 5.9 : Bir Sıcaklık Problemi İçin Farklı Elemanların Sonuçları Ne	
Hassaslıkla Verebileceğinin Gösterimi: a) Lineer Elemanlar	
b) Kuadratik Elemanlar c) Kübik Elemanlar	34
Şekil 5.10 : Simulasyonlarda kullanılan sonlu elemanlar tiplerinin gösterimi	35
Şekil 5.11 : İki boyutlu modelin üzerinde sınır koşullarının gösterimi	37
Şekil 5.12 : 3Boyutlu Model Üzerinde Numune İçin Limit Koşullarının	
Gösterimi	37
Şekil 6.1 : İki dairesel cismin elastik temasının şematik gösterimi.	40
Şekil 6.2 : "dh" miktarı batma sonucu "da" kadar kontak yarıçapında artış	
olmakta bunun sonucunda plastik hacimda "dc" kadar bir genişleme	
oluşmaktadır.	41
Şekil 6.3 : GKM de plastik zonun radyal bölgelere ayrımının şematik temsili	42
Şekil 6.4 : Kontak şartlarının belirlenerek, kontak yönetimini sağlayan	
master-slave ayrışma yöntemlerinin gösterimi	44
Şekil 6.5 : Cisim normallerinin yönü daima dışarı çıkan doğrultudadır	44
Şekil 6.6 : Yüzey mesh gruplarının belirlenmesi ve master-slave yüzeylerinin	
normal vektörleri ile birlikte gösterimi	45
Şekil 6.7 : İki cisim arasında iç içe geçme olduğu durumda orjinal kontak	
yüzeylerinin ve cisimlerin gerçek yerleşiminin temsili	45
Şekil 6.8 : Yüzey pürüzlülüğüne sahip cisimler arası kontağın yürütülme	
adımları	46
Şekil 6.9 : a) Komplians modeli b) İdeal Signorini modeli	
c) Multi-Niveau modeli	46
Şekil 7.1 : Asal gerilmeler türünden gerilme yüzeylerinin temsili gösterimi	53
Şekil 7.2 : VonMises ve Tresca akma yüzeylerinin karşılaştırılması	54
Şekil 7.3 : Izotropik ve kinematik pekleşme olaylarının akma yüzeyine etkisi	54
Şekil 7.4 : Izotropik ve kinematik pekleşme olaylarının gösterimi	
Şekil 7.5 : Bilineer VonMises plastisite davranışı gerilme-gerinme eğrisi temsili	.55
Şekil 7.6 : Multilineer plastisite davranışı temsili gerilme-gerinme eğrisi	56
Şekil 7.7 : Üssel İlişki plastisitesi için farklı n değerleri için R(p) pekleşme	
fonksiyonları temsili	.58
Şekil 7.8 : Miller indisleri ile doğrultuların gösterimi.	.59
Şekil 7.9 : Kübik yüzey merkezli yapı için kayma düzlemlerinin gösterimi	.60
Şekil 7.10 : Orjinal Nix and Gao batıcı uç altı GND yoğunluğu gösterimi	.65
Şekil 7.11 : NG ve GND modelindeki plastik zon boyutlarının gösterimi	.66
Şekil 8.1 : CSM marka nanoindentasyon cihazı	.71
Şekil 8.2 : 316L numunesinde 2 µm batma derinliği deneyi K-Y eğrisi	.71
Şekil 8.3 : Nitrürlü 316L numunesinin 2 µm batma derinliği deneyi K-Y eğrisi	72
Şekil 8.4 : Nitrürlü 316L numunesinde 5 µm ve 10 µm batma derinliği	
deneylerinde K-Y eğrileri	.73
Şekil 8.5 : 2 µm nitrürlü ve nitrürsüz deneyleri K-Y eğrileri karşılaştırması	.74
Şekil 9.1 : E,Et ve Sy parametrelerinin etkileri	.76
Şekil 9.2 : E ve Sy sabitken Et değişiminin K-Y eğrisi üzerine etkisinin	
gösterimi	77

Şekil 9.3 : E-Et ikilisi belirli ölçüde sabitken Sy değişiminin K-Y eğrisine etkisi	77
Şekil 9.4 : Parametrelerin (E190000, Et100000, Sy200, Coef: 1.2, S: 0.51) K-Y	
eğrisi simülasyonu	77
Şekil 9.5 : Parametrelerin (E190000, Et40000, Sy400, Coef:2.2, S:0.97) K-Y	
eğrisi simülasyonu	78
Şekil 9.6 : Parametrelerin (E75000, Et6500, Sy300, Coef 8, S 1.16) K-Y eğrisi	
simülasyonu	78
Şekil 9.7 : İki boyutlu simülasyonda temel indentasyon olaylarının gösterimi	80
Şekil 9.8 : Küresel batıcı uç ile elastik indentasyon ve radyal alan dağılımı	80
Şekil 9.9 : Tam elastik indentasyon durumu kuvvet yer-değiştirme eğrisi	81
Şekil 9.10 : 2µm batma derinliğinde E190Gpa, ET40Gpa, Sy 475MPa	
parametreleri	81
Şekil 9.11 : 2µm batma derinliğinde E193GPa, ET35GPa, Sy 200MPa	
parametreleri	82
Şekil 9.12 : K-Y eğrisinde E193 serisi simülasyonlarının genel karşılaştırılması	82
Şekil 9.13 : 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET40GPa, Sy 400MPa	
parametreleri	83
Şekil 9.14 : 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET25GPa, Sy 400MPa	
parametreleri	83
Şekil 9.15 : 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET25GPa, Sy 300MPa	
parametreleri	84
Şekil 9.16 : 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET30GPa, Sy 200MPa	
parametreleri	84
Şekil 9.17 : K-Y eğrisinde E190 serisi simülasyonları genel karşılaştırılması	84
Şekil 9.18 : 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET27.5GPa, Sy 200MPa	
parametreleri	85
Şekil 9.19 : K-Y eğrilerinde E190GPa, ET27.5GPa, Sy200MPa parametreleri ile	
eğim karşılaştırması	85
Şekil 9.20 : Yer değiştirme alanının gösterimi, maksimum yer değiştirme	
0.002 mm	86
Şekil 9.21 : Yer değiştirme alanının yükleme ($2\mu m$) ve boşaltma ($1.77\mu m$)	
sonu gösterimleri	86
Şekil 9.22 : Deformasyon alanı ve deformasyon miktarlarının yükleme sonunda tür	m
iz üzerinde gösterimi	87
Şekil 9.23 : İzin ortasından alınan dikey kesit deformasyon alanı görüntüsü	87
Şekil 9.24 : Gerilme alanlarının gösterimi	87
Şekil 9.25 : Kontak halindeki bölge (kırmızı) ile kontak dışındaki bölgenin (mavi)	1
gösterimi	87
Şekil 9.26 : 2µm batma derinliğinde sık mesh içeren numunede parametre	
ayarlaması	88
Şekil 9.27 : Uç eğriliği ile yapılan simülasyonlar a) küt uç b) eğrisel uç	89
Şekil 9.28 : Multilineer davranış modeli ile elde edilen eğriler ve	
karşılaştırılmaları	90

Şekil 9.29 : K-Y eğrisinde a=1, n=0.06, Sy175MPa parametrelerinin
simülasyonunun deney sonucu ile karşılaştırılması
Şekil 9.30 : K-Y eğrisinde a=20, n=0.5, Sy175MPa parametrelerinin
simülasyonunun deney sonucu ile karşılaştırılması
Şekil 9.31 : K-Y eğrisinde a=20, n=0.64, Sy200MPa parametrelerinin deney sonucu
ile simülasyonunun karşılaştırılması92
Şekil 9.32 : K-Y eğrisinde a=17.5, n=0.64, Sy200MPa parametrelerinin deney
sonucu ile simülasyonunun karşılaştırılması
Şekil 9.33 : K-Y eğrisinde a=18, n=0.64, Sy200MPa parametrelerinin deney sonucu
ile simülasyonunun karşılaştırılması93
Şekil 9.34 : 3 farklı yönlenme ile yapılan çekme simülasyonu sonuçlarının
gösterimi94
Şekil 9.35 : İndentasyon durumunda yönlenmeye bağlı modelin test edilmesi95
Şekil 9.36 : Mono kristalde 2 farklı yönlenme ile yapılan indentasyon deney sonucu
ile simülasyonunun karşılaştırması95
Şekil 10.1 : Yükleme ve Boşaltma Kademelerine Eğri Uydurma97
Şekil 10.2 : NG ve GND yoğunluklarının derinliğe bağlı olarak değişimi101
Şekil 10.3 : Farklı SSD yoğunluklarının K-Y eğrisine yani mukavemete etkisi101
Şekil 10.4 : Deney eğrisi ile teorik dislokasyon yoğunluğu eğrisinin
gösterilmesi102

NANOİNDENTASYON DENEYİ İLE MALZEME DAVRANIŞLARINI INCELEME, SONLU ELEMANLAR YÖNTEMİ İLE SİMULASYONU VE TERSİNİR DAVRANIŞ TANIMLAMA

ÖZET

Sanayi alanında kullanılan malzemelerin özelliklerini tespit etmek, kullanım şartlarındaki performansını öngörmek çok önemlidir. Sertlik testi özelliklerin kolaylıkla belirlenmesinde kullanılan bir yöntemdir. Teknolojinin ilerlemesi ile nano ve mikro indentasyon gibi derinlik hassasiyetli sertlik testlerini uygulamak mümkün olmuştur. Bu deneylerden elde edilen kuvvet-yer değiştirme eğrileri her malzeme için karakteristiktir.

Sonlu elemanlar yöntemi, mekanik, termik ve dinamik etkilerin malzeme üzerindeki etkisinin modellenmesinde kullanılmaktadır. Sonlu elemanlarda başarılı bir simülasyonun gerçekleştirilebilmesi için malzeme parametreleri bilinmelidir. Ayrıca geometri ve sınır koşulları da gerçek duruma göre uygulanmalıdır. Böylece, sonlu elemanlar ile daha karmaşık analizlerin yapılabilmesi için optimum malzeme davranış parametreleri belirlenir.

Nanoindentasyon deneyi sonucu elde edilen kuvvet-yer (K-Y) değiştirme eğrisi, deneyin simülasyonu ile elde edilmeye çalışılarak malzeme parametreleri belirlenebilir. Böylece daha karmaşık analizler için hem parametreler belirlenmiştir hem de program nanoindentasyon simülasyonu üzerinden hassasiyet bakımından kalibre edilmiştir.

Çalışmada kontak mekaniği, nanoindentasyon da geçerli malzeme davranış kanunları ve derinlik hassasiyetli sertlik deneylerinde analitik veri işlemesi yöntemleri incelenmiş ve deneysel çalışmalar üzerinde uygulaması yapılmıştır. Deneysel K-Y eğrilerinden yola çıkılarak, sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak farklı davranış kanunları ile simülasyonlar yapılmış, 316L örnek malzemesi için plastisite parametreleri belirlenmiştir.

Sonuç olarak, işlemsiz 316L numune üzerinde, 3 boyutlu ideal Berkovich uç ile bilineer izotropik plastisite kanunu kullanılarak yapılan simülasyonlarda en uygun parametrelerin E=188-190 GPa, Et=28 – 32 GPa, Sy=200-275 MPa olarak alınmasına karar verilmiştir. Üstel ilişkili plastisite modeli için ise en uygun parametre bileşimi "a=18 n=0.64 Sy 200-250 MPa" üçlüsü olarak bulunmuştur.

Analitik yöntemler ile 316L işlemsiz numune için 2µm batma derinliği deneyinde C =50000 N/mm, %29 karakteristik deformasyona karşı gelen gerilme değeri 271.7 MPa, n deformasyon sertleşmesi üssü 0.302, plastik batma derinliği h_p =1788.65 nm ve plastik iş 172488 mN.nm² olarak elde edilmiştir.

STUDY OF MATERIAL BEHAVIORS BY NANOINDENTATION EXPERIMENTS, ITS SIMULATION USING FINITE ELEMENTS METHODS AND INVERSE IDENTIFICATION OF THE BEHAVIOR

SUMMARY

It is very important to identify the properties and to predict the performance of materials that are being used in field of industry under service conditions. Hardness test is a method being applied to easily determine the properties. With the technological advancement, it became possible to perform depth-sensitive hardness tests such as nanoindentation and microindentation. The force-displacement curves recovered from experiments are characteristic for every material.

Finite elements method (FEM) is being basically used to modelling mechanical, thermal and dynamical effects on material behaviors. Material parameters must be known to perform a successful simulation via FEM. It is also important to apply realistic geometrical configuration and boundary conditions. Therefore, optimized material behavior parameters can be identified to run advanced simulations comprising more complex situations.

It is the main goal to reproduce same resulting force-displacement curve from an experiment by simulations and thus determining the material parameters. By reproducing the curve, in the one hand material parameters are optimized and on the other hand software is calibrated via nanoindetation simulations.

In the present study, contact mechanics principals, material behavior models peculiar to nanoindentation and analytical data processing methods in depth-sensitive hardness tests are investigated and are applied on experiments. Considering experimental force-displacement curves, FEM simulations comprising different behavior models are used to determine plasticity parameters for 316L type steel.

Numerically, we found ideal material parameters in case of ideal sharp indentation simulations by bilinear isotropic plasticity as follows E=188 - 190GPa Et=28 - 32.0 GPa Sy= 200 - 275 MPa and by power law relation isotropic plasticity as follows a=18 n=0.64 Sy 250 MPa.

Analitically, from a 2 μ m indentation test on 316L Standard specimen we found C =50000 N/mm, stress value of 271.7 MPa corresponding %29 characteristic deformation, strain hardening exponent n= 0.302, plastic indentation depth h_p=1788.65 nm and plastic work value of 172488 mN.nm².

1. ÇALIŞMANIN AMACI VE KULLANILACAK PERSPEKTİF

1.1 Çalışmanın Önemi

Sanayide pek çok malzeme kullanılmaktadır. Bu malzemelerin mekanik davranışlarını ve özelliklerini bilmek ve bilinçli olarak kullanmak önem arz etmektedir. Bu bağlamda malzemelerin ve özellikle metalik karakterde olanlarının özellikleri belirlenmelidir. Standartlarına uygunluğu test etmek ve üretim sanayinde devamlılığı sağlamak açısından ilgilenilmesi gereken temel unsurlar bunlardır.

Bir metalin karakteristik özelliklerinden bir tanesinin de sertliği olduğu bilinmektedir. Sertlik testi adı verilen test ile malzemeye kalıcı hasar vermeden sertlik ölçümü yapılmaktadır. Tanım olarak sertlik, rijit ve test edilecek malzemeye kıyasla daha sert standart batıcı ucun uyguladığı kuvvete ve penatrasyona karşı test malzemesinin gösterdiği dirençtir [1].

Bu süreçte malzemenin yüzeyine bölgesel olarak yükleme ve boşaltma çevrimsel olarak uygulanır ve malzemenin vereceği tepki gözlenir. Yüzeyde, uygulanan yük etkisi ile batıcı ucun penetrasyonu sonucu kalıcı bir iz oluşmaktadır. Rockwell, Vickers, Brinell adında değişik indentasyon testleri mevcuttur. Şekil 1.1 de Vickers batıcı ucu ile yapılan indentasyon gösterilmektedir [2].



Şekil 1.1: Vickers tipi indentasyonun şematik gösterimi [2].

1.2 Indentasyon un Tanımı

Indentasyon sıklıkla kullanılan bir mekanik özellikleri belirleme metodudur ve hasarsız bir yöntemdir. Çalışma prensibi ise şu şekildedir: Rijit ve deforme edilemeyen bir batıcı uç test edilecek malzemenin yüzeyine yerel mekanik yükleme uygulamaktadır. Bu yükleme sonucu malzemede kalıcı bir batma izi oluşturmaktadır. Klasik indentasyon testlerinde kalıcı izin boyutları ölçülerek sertlik değeri bulunmaktadır. Bu sertlik değeri izin boyutları bakımından malzemedeki tanelerin birçoğuna basar ve bu yüzden makro sertlik olarak isimlendirilir [3]. Sertlik hesabı kabaca (1.1) denklemi ile gösterilebilir.

$$H = \frac{P_{max}}{A} \tag{1.1}$$

Burada, P maksimum yük ve A İzin izdüşümü yüzey alanıdır.

Çizelge 1.1 de değişik batıcı uçların geometrik bağıntıları verilmiştir. İzdüşümü alanı (1.1) numaralı denklemde yerine konur. Çizelgede, ayrıca her uç için sertlik hesabında kullanılan açısal değerler, ucun numune yüzeyini yakalama faktörleri ve β düzeltme faktörleri verilmiştir [4].

Batıcı Uç	İzdüşüm Alanı	θ° Yarım Açısı	αº Koniklik Açısı	Yakalama	β Faktörü
Sferik	$\pi 2 Rh_p$	0	0	0.75	1
Berkovich	$3\sqrt{3h_p^2}tan^2\theta$	65.3	70.2996	0.75	1.034
Vickers	$4h_p^2 tan^2 \theta$	68	70.32	0.75	1.012
Knoop	$2h_p^2 tan \theta_1 tan \theta_2$	86.25, 65	77.64	0.75	1.012
Konik	$\pi {h_p}^2$	α	α	0.72	1

Çizelge1.1: Değişik İndentasyon Uçlarının Geometrik Bağıntı ve Özellikleri [4].

1.3 Nanoindentasyon

Nanoindentasyon yöntemi ile hem ince kaplamaların hem de kütlesel malzemelerin özellikleri incelenebilmektedir. Bu yöntemde sertlik hesabı daha ufak bir ölçekte yapılmaktadır. Bu bağlamda numune boyutu ve ucun boyutu çalıştığımız ölçeğe adapte edilmiştir. Uygulanan yükler ve ulaşılan derinlikler daha ufaktır ama deney prensibi aynıdır [5].

Sertlik ölçümünde kullanılan derinlik hassasiyetli yöntemlerde, Şekil 1.2 de görüldüğü üzere malzemenin karakteristik özelliği olan yük-batma derinliği eğrileri elde edilmekte ve sertlik hesabı bu eğrilerden gidilerek yapılmaktadır [6].



Şekil 1.2: Tipik yük-batma derinliği eğrisi [6].

Bu yöntemde, beklendiği üzere en büyük zorluk oluşturulan izin boyutlarının ölçümüdür. Şekil 1.3 te olduğu gibi iz boyutları ufak olduğu için normal mikroskoplarla başarılı olarak ölçülmesi imkânsızdır. Bu yüzden derinlik hassasiyetli yöntemlerde yük-batma derinliği eğrileri incelenerek sertlik ölçümü yapılmaktadır. Ancak izin tam topolojisinin incelenmesi de önem teşkil etmektedir. Atomik Kuvvet Mikroskopisi(AFM) daha isabetli bir şekilde kontak yüzeyi ölçümü ve iz incelemesine olanak tanıdığı için tercih edilmektedir [7].

1.4 İndentasyon Cihazının Çalışma Prensibi

Numune (A) indentör kolonunun hizasında batıcı ucun altına (B) yerleştirilir. Batıcı uç aksamı yaylarla (D) sabitlenmiş olarak tutulmaktadır. Manyetik bobin (C) ise istenen yükün(μ N) veya batma derinliğinin (nm) numune yüzeyine uygulanmasını mümkün kılar ve batıcı uç kolonunun hareketini sağlar. Aksamın hareketini hareket algılayıcıları (E) hassas ve doğru bir şekilde belirlemektedir. Bu tip bir cihazın avantajı, penetrasyon miktarını nanometrik kararlılıkta ölçebilmesidir [8].



Şekil 1.3: Atomik kuvvet mikroskopu ile elde edilmiş nano iz görüntüsü [7].



Şekil 1.4: Nanoindentasyon test cihazının örnek işleyiş şeması [8].

1.5 Seçilen Simulasyon Yaklaşımı

Bu çalışmadaki esas amacımız nanoindentasyon deneyinin birebir simulasyonunu yapabilmektir. Bunun için geometrik bir model oluşturulmuş ve sonlu elemanlar yöntemi uygulanmıştır.

Klasik plastisite kanunu kullanarak yapılan simülasyonlara ek olarak boyut etkisi incelenmiş ve her bir tanenin karakteristik davranışını temsil edecek mikroyapısal skalada geçerli olan tekkristal kanunu ile simulasyonlarda yapılmıştır. Bu sayede tekstür etkisi, malzemede var olan kayma sistemlerinin ve yönlenmelerin deformasyon sırasındaki etkileşimlerinin gözlemlenmesi hedeflenmiştir.

1.6 Simulasyon Yaklaşımındaki Kavramlar

Nanoindentasyon deneyinin simülasyonu ve deneysel incelemesi aşamasında bahsedilmesi gereken kavramlar deneysel eğrilerin incelenmesine dönük bilgiler, deneyde elde edilen mekanik özellikler, deney sonuçlarını etkileyen faktörler, simülasyon için sonlu elemanlar modelinin oluşturulması, malzeme davranış modellerinin incelenmesi ve simülasyonlarda bu modellerin kullanılmasını içermektedir.

2. İNCELENEN SPESİFİK OLAYLAR

Makro ve mikro indentasyon testlerinde çoğunlukla oluşan batma izi optik mikroskop yardımı ile incelenebilmekte ve bu boyutlar söz konusu olduğunda izin boyutları yüksek doğruluk ile ölçülebilmektedir. Ancak nanoindentasyonda, kalıcı batma izi boyutları çok ufak olduğu için boyutlarının optik mikroskop ile isabetli ölçümü sorunludur [3]. Bu yüzden AFM ve Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) gibi cihazlar kullanılarak kalıntı izin detaylı görüntülemesi yapılmaktadır [9].

İstendiği takdirde tek bir taneye yük uygulamak ve davranışını gözlemlemek mümkündür. Bunu mümkün kılan ise bahsedildiği üzere ufak yükler ve batma derinliklerinin seçilebilmesidir. Böylelikle deney sonucu elde edilen şekil 2.1 de örneklenen yük-batma derinliği eğrileri ucun batırıldığı tanelerin karakteristik eğrileridir. Bu durumda eğrilerde elde edilen kontak direngenliği her bir tane için karakteristik olacaktır [4].



h_r kalıntı izin derinliği

h_t Maksimum yükte malzemenin yüzeyinin maksimum batma derinliği h_e Boşaltma sırasında elastik yer

değiştirme

h_a, Maksimum yükte kontak kenarı ile malzeme yüzeyi arasındaki mesafe

Şekil 2.1: Deney sonucu elde edilen kuvvet-yerdeğiştirme eğrisi [4].

AFM kullanılarak iz topolojisi incelenip malzemenin davranışı ve izin oluşumu hakkında bilgi edinilmektedir. Şekil 2.2 de indentasyon da kristal plastisite sinin etkisi ile malzeme yüzeyinde oluşan batma izinde iki temel olay gözlemlenmektedir. Taşma (pile-up) ve Çökme (sink-in) adı verilen bu olaylar malzemenin mekanik özelliklerinin indentasyon sırasında gösterdiği tepkilere göre belirgin iz topolojilerinin oluşumu sırasında ortaya çıkmaktadır [10].

Young Modülü yüksek olan sert malzemelerde çökme (sink-in) oluşurken yumuşak olan düşük Young modüllü malzemelerde ise tersi durum taşma (pile-up) gözlemlenmektedir. Burdan da anlaşaılacağı üzere yumuşak olan sünek malzemeler taşma yaparken sert malzemeler çökme davranışı göstermektedir [3].



Şekil 2.2: a) Taşma oluşumu, kontak yüksekliği ile görülen alan(A) ve teorik alan (A_s) gösterimi b)Çökme oluşumu, kontak yüksekliği ile görülen alan ve teorik alan gösterimi [10].

2.1 Ölçülen ve Belirlenen Özellikler

Deney süresince, uygulanan kuvvete karşılık kontak yüzeyinde oluşan batma derinliği değerleri kaydedilir. Bu değerlerden yola çıkılarak elde edilen kuvvet-yer değiştirme (FD) eğrileri, derinlik hassasiyetli indentasyon deneylerinde malzemenin mekanik davranışını temsil eden karakteristik eğrilerdir [6]. Yükleme ve boşaltma çevrimleri boyunca malzemenin davranışına göre elde edilirler. Yükleme sırasında malzemede herhangi bir faz dönüşümü, hal dönüşümü olmadığı ve yükün boşaltılma durumunda malzemenin gösterdiği tepkinin tamamen elastik olduğu kabulleri yapılmaktadır [11].

Elastik boşaltma durumunda eğrinin eğimi (1.2) denkleminde S ile gösterildiği üzere kontak direngenliği olarak tanımlanır. Bu denklem ile indirgenmiş modül elde edilmektedir. Oliver &Pharr metoduna göre (2.2) denklemi kullanılarak indirgenmiş modül ile malzemenin Young modülü ve Poisson oranları arasında bağıntı kurulabilmektedir. Bu sayede malzemenin Poisson oranı biliniyorsa Young modülü deney sonuçlarından yola çıkılarak hesaplanabilir [12].

İndirgenmiş Elastisite Modülü: İndentasyon deneyinde iki farklı malzeme birbiri ile kontak halinde olduğu için kontak durumuna özgü İndirgenmiş Elastisite modülü tanımlıdır. Modülün hesaplanması (2.1) denkleminde kontak direngenliği ve indentasyon izi izdüşümü alanından yola çıkılarak yapılmaktadır. Ayrıca, İndirgenmiş Elastisite Modülü test numunesinin ve batıcı uç malzemelerinin elastik sabitlerinin bileşiminden oluşan denklem (2.2) ile de hesaplanabilir [11,12].

$$E_r = \frac{1}{\beta} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{S}{\sqrt{A(h_c)}}$$
(2.1)

Er = İndirgenmiş Elastisite Modülü

A(hc) = hc derinliğinde kalıcı izin izdüşümü yüzey alanı

 β =geometrik sabit

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - v_{indenter}^2}{E_{indenter}} + \frac{1 - v_{malzeme}^2}{E_{malzeme}}$$
(2.2)

E_i, *v_i* sırasıyla batıcı uç malzemesinin Young modülü ve Poisson oranı.

Es, vs sırasıyla deney malzemesinin Young modülü ve Poisson oranı.

Malzemenin Sertliği: Sertlik değeri batıcı ucun boyutlarının bilinmesi sayesinde elde edilebilir. Yalnız dikkat edilmesi gereken husus inilen derinlik sığlaştıkça sertliğin malzemeye has bir özellik olmaktan çıkması ve iz boyutu ile değişkenlik göstermesidir [10].

Akma Gerilmesi Tabor tarafından Sy=CH şeklindeki bağıntı ile tanımlanmış olan ideal plastik malzemelerde geçerli bağıntıdır. Batıcı uca bağlı olan C sabiti Vickers için Tabor tarafından 0.3 olarak önerilmiştir [13,14]. Giannakopoulos ise C sabiti değerini FEM analizleri ile 0.48 olarak düzeltmiştir [15].

Maksimum Gerilme(σ_u): C sabitinin elastoplastik malzemeler için hesaplama denklemleri kullanılarak bulunması ve P=Ch² yükleme eğrisi denkleminde yerine konması ile sistemdeki maksimum gerilme değeri hesaplanabilmektedir.

Deformasyon Sertleşmesi Üssü (n): Maksimum gerilmenin hesaplanmasından sonra (2.3),(2.4),(2.5) denklemleri kullanılarak defomasyon sertleşmesi üssü(n) değeri hesaplanabilmektedir [16,17].

$$\frac{\sigma_u}{H_v} = \frac{1-n}{2.9} \left(\frac{12.5n}{1-n}\right)^n$$
(2.3)

(2.3) denkleminde "n" deformasyon sertleşmesi üssü, H_v vickers sertlik değeri, σ_u maksimum gerilme değeridir. Karakteristik şekil değişiminin %29 olarak bulunması ve $\sigma u/\sigma y$ oranının malzemede deformasyon sertleşmesi ile bağlantılı olduğunun kabul edilmesi ile deformasyon ve gerilmeler arasında şu denklem kurulmuştur [16,17].

$$\sigma_u = \sigma_y \left(\frac{\varepsilon_u}{\varepsilon_y}\right)^n \tag{2.4}$$

(2.4) denkleminde ε_y akma şekil değişimini, ε_u karakteristik şekil değişimini temsil etmektedir [16,17].

$$n = \frac{\ln\left(\frac{\sigma_u}{\sigma_y}\right)}{\ln\left(\frac{\varepsilon_u}{\varepsilon_y}\right)}$$
(2.5)

(2.5) denkleminde ki akma şekil değişimi ofset akma olarak alınabildiği gibi malzemenin σ/E oranından da hesaplanabilmektedir[16,17].

2.2 Indetasyon Sonuçlarını Etkileyen Temel Faktörler

Malzemenin gösterdiği davranışı ve sonuçları etkileyen çeşitli faktörler mevcuttur. Bunlardan inceleme konusu olan en önemlileri şunlardır.

2.2.1 İndentasyonda boyut etkisi (indentation size effect-ISE)

Indentasyonda boyut etkisi ufak indentasyon derinliklerinde (<1.5µm) metalik malzemelerde deneylerdeki azalan derinlik miktarı ile sertlikte artış meydana gelmesi durumu olarak açıklanmaktadır [18].

Buna neden olan çeşitli faktörler mevcuttur. Bunlara örnek olarak batıcı uç geometrisindeki düzensizliğin kalibre edilmemesi, öngörülmemiş yüzey tabakalarının varlığı, pürüzlülük gibi etmenler gösterilebilir [19].

Bu olayı açıklamak ve incelemek için üretilen teorilerin başlıcaları davranış modelleri kısmında açıklanmaktadır.

2.2.2 Batıcı uç pürüzlülüğü

Geometrik bağıntılarla ifade edilen teorik mükemmel uç üretmek mümkün olmamaktadır. Bu yüzden her ucun belirli bir uc yuvarlaklığı mevcuttur. Bu da temas basıncı ve indentasyon derinliğine göre sonuçlarda etkili olmaktadır(Berkovich uc ~100nm) [4].



Şekil 2.3: Berkovich uçta görülen uç eğriliği a) AFM resmi, b)Modellenmiş uç resmi [4].

2.2.3 Batıcı uç geometrisi

Geometrik olarak farklı olan uçların batma sırasında yaratacağı alanlar ve tepe açılarına göre oluşturacakları ortalama kontak basıncı farklı olacağından uçlar değiştikçe deneyden elde edilen sonuçlar da değişmektedir. (2.6) denklemi ile ideal geometriye göre batıcı uç için geçerli yüzey alanı hesaplama denklemi verilmiştir [4].

$$A = C_1 H_p^2 + C_2 H_p + C_3 H_p^{1/2} + C_4 H_p^{1/4} + \cdots$$
(2.6)

Burada; Hp ucun nüfuz ettiği plastik derinlik, C ler ise sabitlerdir.

2.2.4 Yüzey pürüzlülüğü

Pürüzlülük azaldıkta malzemenin gerçek davranışı ile ilgili isabetli sonuçlar elde edilmektedir. Çünkü yüzeyde var olan pürüzlülük miktarı batma derinliğini etkileyip kontak alanı ölçümüne etki etmektedir. Bunun sonucunda sertlik hesaplamasında yanlışlık yapılması muhtemeldir. Ayrıca daha keskin batıcı uçlar pürüzlülükten daha az etkilenmektedir [11].

2.2.5 Kalıntı gerilmeler

Numunelerin hazırlanma safhasında uygulanan parlatma metotları yüzeyde deformasyona uğramış tabakalar bırakarak sertlik değerlerini etkilemekte olduğu görülmüştür. Liu ve Ngan yaptıkları çalışmalarda mekanik ve elektro parlatma yöntemleri ile hazırlanmış numunelerin farklı düzeyde yüzey kalitesine ve derinliğe bağlı sertlik değişimine sahip olduklarını gözlemlemişlerdi [20].

3. DERİNLİK HASSASİYETLİ YÖNTEMLERDE (DHY) DENEY VERİLERİNİN İŞLENMESİ

3.1 Derinlik Hassasiyetli İndentasyon Deneyi

Malzemenin sertliği atomlar arası bağ kuvveti ve kristal yapısı tarafından belirlenir. Kohezif enerjideki artış, bağ uzunluğunun kısa olması ve bağ çeşidinin kovalent ağırlıkta olması sertliği arttırmaktadır. Tersi durumda ise sertlik düşmektedir. Atomlar arasındaki bağ kuvvetleri malzemenin elastik özelliklerinin ve sertliğinin tespitinde kullanılır [11,21].

Elastik modülü yüksek malzemede şekil (3.1) de görüldüğü üzere potansiyel enerji çukuru derin, bağ uzunluğu ise kısadır. Ayrıca malzemede bulunan bağların mukavemetinin dislokasyon oluşumuna ve hareketine gösterdiği direnç seviyesi sertliğin ölçüsüdür. Bu yüzden kovalent bağlanma miktarı arttıkça bağ mukavemeti ve yönlenmesi artacağından malzemenin sertliği artmaktadır [11].



Şekil 3.1: İki atom arasındaki mesafe (r) ile atomlar arası bağ enerjisinin değişimi [11].

Indentasyon esnasında batıcı uç altında yüksek gerilmeler oluşurken, gerilme dağılımı da oldukça karmaşıktır. Meydana gelen plastik deformasyon, her ne kadar malzemede çatlama ve batma olsa da nano boyutta etkin mekanizma dislokasyon oluşumu ve kaymasıdır [21]. Literatürde yapılan deney ve simülasyonlar, klasik plastisite teorisinin bu açıdan eksikliklerini ve bu boyutta malzeme davranışını temsilde yetersiz kaldığını göstermiştir [10,22,23]. Bu açıdan bakıldığında, sertliği yüksek olan malzemeler bu prosese yüksek direnç gösteren malzemelerdir.

Tane sınırlarının çokluğu, çökeltiler, empüriteler gibi mikro yapısal özellikler etkin direnç faktörleridir. İnce filmler ve kaplamalar ise, çok küçük tane boyutu ve çok yüksek yoğunlukta hata içermeleri nedeniyle yüksek sertliğe sahiptirler [24].

3.2 DHY ile Çeşitli Mekanik Özelliklerin Ölçümü

Makro sertlik yöntemlerinde, kalıntı izin boyutları optik olarak belirlenmektedir. Ancak elastik toparlanma ve yüzey değişimlerinin etkili olduğu mikro ve nano boyuttaki deneylerde iz boyutlarının tayini hatalı sonuçlar vermektedir. Derinlik hassasiyetli indentasyonda ise kalıntı izin alanının belirlenmesine gerek kalmamaktadır. Çok küçük yük veya batma derinliklerinde hassas olarak malzemenin gösterdiği davranış yük ve batma derinliği eğrileri elde edilerek belirlenmekte, temas alanı ve mekanik özellikleri (Elastik Modül, Deformasyon Sertleşmesi Üssü gibi) tayin edilebilmektedir [21].

3.3 Plastik Deformasyon Prosesi Teorik Yaklaşım

Sertlik değerine yük miktarı veya gerçek temas alanı etki etmezken, batıcı ucun tepe açısı ve tepe yuvarlaklığı (R) miktarı etkili olmaktadır. Literatürde mevcut çalışmaların sonucunda, batıcı uc derinliği (h); h>R/40 durumlarında, uç yarıçapının deney sonuçlarını etkilemeyecek düzeyde olduğu bilinmektedir [21].

Dikkat edilmesi gereken diğer nokta ise bu yöntemde malzemenin mekanik özellikleri ve yük-batma eğrileri batıcı ucun geometrisinden etkilenmektedir. Farklı uçlar ile yapılan simulasyonlarda elde edilen yük-batma derinliği eğrileri (FD), deneysel olarak elde edilen eğrilerden sapma göstermektedir [25].

3.4 Eğrilerin Analizi

3.4.1 Yük(F)-batma derinliği (h) ilişkileri

Yükleme eğrisi $P_{max}=C h^2$ denklemine göre üssel fonksiyona uygun davranmaktadır. C malzemenin eğrilik katsayısıdır. P_{max} uygulanan maksimum yük ve h maksimum
yükte oluşan maksimum batma derinliğidir. C sabiti, elastik ve elasto-plastik malzemeler için vede Vickers ve Berkovich uçları için Çizelge 3.1 deki denklemler ile verilmiştir [4,21,26-28].

D.Tipi	Sabitlerin Denklemleri	Uç	No
Е	$C = 2.077 \times (1 - 0.1655\nu - 0.1737\nu^2 - 0.1862\nu^3) \times \frac{E}{1 - \nu^2}$	V	3.1 a
	$C = 2.1891 \times (1 - 0.21\nu - 0.01\nu^2 - 0.41\nu^3) \times \frac{E}{1 - \nu^2}$	В	3.1b
EP	$C = 1.19 \sigma_{y} \times \left(1 + \frac{\sigma_{u}}{\sigma_{y}}\right) (\tan \alpha)^{-2} \times \left(1 + \ln\left(\frac{E \tan \alpha}{3\sigma_{y}}\right)\right)$	V	3.1c
	$C = 1.273 \sigma_{\rm y} \times \left(1 + \frac{\sigma_{\rm u}}{\sigma_{\rm y}}\right) (\tan \alpha)^{-2} \times \left(1 + \ln\left(\frac{E \tan \alpha}{3\sigma_{\rm y}}\right)\right)$	В	3.1d

Çizelge 3.1: C sabiti hesaplama denklemleri.

D.Tipi: Davranış Tipi, E: elastisite, EP: elastoplastisite, V: Vickers Uç, B:Berkovich Uç

Burada "v" ve "E" sırasıyla malzemenin Poisson Oranı ve Young Modülüdür. " σ_y " basma akma gerilmesi, " σ_u " %29 luk karakteristik plastik şekil değişimine karşı gelen maksimum gerilme değeri ve α batıcı ucun indentasyon açısıdır. Vickers 22° ve 24,7° dir.



Batma Derinliği (h)

Şekil 3.2: Yük batma derinliği eğrisi ve farklı derinlik değerleri [21].

İndentasyon sonucu elde edilen yük-batma derinliği eğrisi yorumlaması malzemenin özelliklerini tayin etmek açısından önem taşımaktadır. Değerlerin yorumu aşağıda ki gibidir [21].

- hm değeri maksimum yükte malzemede meydana gelen maksimum batma derinliğidir.
- hf derinliği yük tamamen boşatıldıktan sonra malzeme yüzeyinde kalan nihai plastik batma derinliğidir.
- Eğride S ile gösterilen eğim dP/dh yükün boşalma hızı olup kontak direngenliği olarak adlandırılır ve İndirgenmiş elastik modül hesabında kullanılmaktadır.
- h_s^{ul} boşaltma esnasında temas sınırı dışında kalan pile-up veya sink-in bölgelerindeki yüzey yer değişimidir.
- h_{is} temas sınırı içinde malzemede meydana gelen yüzey yer değişimidir.
- h_{ic} boşaltmanın sonundaki gerçek temas yer değişimidir.

Yükleme sırasında yük-derinlik oluşum ilişkisi gözlenirken, boşaltma sırasında direngenlikte dP/dh eğimi şeklinde elde edilmektedir. Yük-derinlik eğrisinin boşaltma kısmının Doerner ve Nix tarafından ortaya atılan sonrasında Oliver ve Pharr tarafından geliştirilen analizi ile test edilen malzemenin elastik modülü ve sertliğinin hesabı yapılmaktadır [29].

3.4.2 Yükleme durumunda temas alanı değişimi

Yükleme prosesinde, temas sınırının dışındaki yüzeyin dikey yer değişimi (3.2) ve (3.3) denklemleri ile bulunabilir.

$$h_s^L = h_{max} - h_c \tag{3.2}$$

$$h_s^L = \varepsilon \frac{P_{max}}{S} \tag{3.3}$$

Burada; L indisi yükleme durumunu belirtmektedir. h_s^L , batıcı uç ile temas bölgesi dışında ne kadar yüzey yer değişimi olduğunu göstermektedir. ε batıcı uç geometrisi sabitidir (Vickers, Berkovich için ≈ 0.75 tir) [29].

Temas alanı dışında ve içinde olan derinlik değişimleri tam olarak belirlenmeli ve hesaplamalar buna göre yapılmalıdır. Şekil 3.3 te görüldüğü üzere, hc indentasyon sırasında gerçek temas derinliğidir ve sertlik hesabında kullanılan derinlik değeri bu

olmalıdır. Şekil 3.2 de ki "hs" değeri kullanılırsa temas bölgesi içindeki temas alanı değişimleri yok sayılacağından sertlik değerleri yanlış hesaplanmaktadır [21,30].



Şekil 3.3: Temas alanı içindeki ve dışındaki yer değişiminin gösterimi [21].

3.4.3 Boşaltma durumunda temas alanı değişimi

3.4.3.1 Boşaltma eğrisi incelemesi

Eğrinin ilk kısmı lineer davranış göstermektedir. Bu aşamada batıcı uç geri çekilirken, alttaki alanın tamamı elastik olarak toparlanır. Temas alanının içindeki ve dışındaki bölgede yüzey yerdeğişimleri burada toparlanmaktadır. Boşaltma eğrisi sürekli doğrusal olarak devam etmez, çünkü kalıcı plastik deformasyon sonucu malzeme bir aşamadan sonra elastik toparlanmayı bitirmektedir ve batıcı uç geri çekildikçe temas alanı azalmaktadır. Bunun sonucunda doğrusal olmayan temas değişim miktarını belirten eğrisellik gözlenmektedir [21].

 h_{max} değerinden geri dönülürken lineer kısmın sağında kalan bölge (hp nin sağında kalan ($h_{max} - h_s$) ile tanımlı bölge) temas alanı dışındaki yer değiştirmedir. h_s nin solunda kalan (h_s - h_f) ile tanımlı bölge ise temas alanı içindeki yer değiştirmedir [21].

Belirli bir yükün altında, malzemede oluşan tüm elastik deformasyon toparlanmakta ve batıcı uç tamamen geri çekilip temas alanı sıfırlandığında malzeme yüzeyinde plastisite sonucu kalıntı iz ortaya çıkmaktadır [21]. Bu temas alanı değişimlerinin karmaşık yapısı yüzünden plastik iz boyu ve indentasyon derinliği arasındaki ilişki batıcı ucun boyutları ile aynı değildir [15].

3.4.3.2 Derinlik değerlerinin anlamları

Boşaltma sırasında sürecinde oluşan ve yük-yerdeğiştirme eğrisinde belirlenebilen farklı yer değiştirmeler incendiğinde şu çıkarımlar elde edilmektedir.

 Boşaltmada yüzey yer değişimi (h_s^{ul}) : Temas sınırı dışında gerçekleşen yüzey yerdeğişimidir. Diğer bir deyişle taşma–çökme bölgelerinde gerçekleşen toparlanma değeridir.

$$h_s^{ul} = h_{max} - h_s \tag{3.4}$$

Indentasyon içindeki yüzey yer değişimi (h_{is}) : Boşaltma durumunda uç ile temas halindeki bölgenin elastik toparlanmasından kaynaklanan geri çekilmedir. Uç geri çekilirken temas alanı belli bir derinliğe kadar aynı kalır çünkü tüm hacim elastik olarak toparlanmaktadır. Bu bölüm boşaltma eğrisinin ilk başlangıcındaki doğrusal bölüme karşı gelir. Malzeme tamamen elastik toparlanmayı bitirince artık batıcı uç ile malzeme temas alanı azalır bu yüzden doğrusallıktan sapma meydana gelmekte ve eğrisel davranış gözlemlenmektedir. (3.5) denklemi ile hesaplanan bu temas kaybı değeri, doğrusal boşaltma fonksiyonu ile boşaltma eğrisinin bitiminin x ekseni üzerinde kestikleri derinlik değerleri arasındaki fark alınarak bulunmaktadır [21].

$$h_{is} = h_s - h \tag{3.5}$$

Gerçek temas yer değişimi(h_{ic}): Boşaltma sırasındaki anlık temas olarak ifade edilmektedir [21].

$$h_{ic} = h_f - (h_s - h_f) = 2h_f - h_s$$
 (3.6)

3.5 Veri İşleme Yöntemleri

3.5.1 Eğri uydurma yöntemleri

Eğri uydurma ve veri işleme metotlarının yoğunlaştığı nokta boşaltma durumundaki kontak direngenliğini hesaplayarak elastik özelliklerin elde edilmesidir. Ayrıca, yükleme rejimine uydurulan eğriler ile maksimum gerilme hesabı ve deformasyon sertleşmesi üssü hesaplanmaktadır.

3.5.1.1 Doerner Nix eğri uydurma yöntemi

Boşalma eğrisinin 1/3 lük başlangıç kısmındaki veriler alınarak denklem (3.7) de verilen doğru uydurulur. Bu yöntem batıcı uç ile malzemenin temas alanının sabit

kaldığını varsayarak başlangıçtaki 1/3 lük kısma göre eğri uydurmaktadır. Ancak bu metodun, temas alanı belirli bir yükten sonra azalacağı ve doğrusallıktan sapacağı için kısıtları bulunmaktadır. Plastisitenin kolay gerçekleştiği metaller için iyi işlemekle birlikte yüksek elastik toparlanma içeren seramik veya kaplama malzemelerinde geçerliliğini yitirmektedir [21].

$$P_{max} = S(h_{max} - h_c) \tag{3.7}$$

3.5.1.2 Oliver ve Pharr eğri uydurma yöntemi

Boşaltma kademesine üstel eğri uydurarak tamamını temsil etmeyi amaçlamaktadır. Eğri nin denklemi (3.8) ve direngenlik hesabı (3.9) denklemi ile ifade edilmektedir. A ve m deneysl sabitler olup,"m" sabiti konik uç için 2, eğrisel uçlar için 1.4 olarak belirlenmiştir. Bu yöntemin kısıtı ise taşma durumunda yetersiz kalmasıdır [29].

$$P = A \left(h - h_f \right)^m \tag{3.8}$$

$$S = \frac{dP}{dh}|h = h_{max}| = mA(h_{max} - h_f)^{m-1}$$
(3.9)

3.5.1.3 Marx eğri uydurma yöntemi

Boşaltma bölgesinin başlangıcının %5 lik kısmındaki verileri alarak doğru uydurulmakta ve eğimi hesaplanarak kontak direngenliği elde edilmektedir [21].

3.5.2 Temas alanı hesaplama yöntemleri

Sertliği, elastik ve plastik özelliklerin isabetli değerlendirilebilmesi için malzemede çökme veya batma oluşup oluşmadığı bilinmeli ve gerçek temas alanı doğru bir şekilde bulunmalıdır. Gerçek temas alanı indentasyon yükleme eğrisi "Ch²" nin altında kalan alan olarak hesaplanmaktadır. C katsayısı ideal olarak Berkovich ve Vickers için sırasıyla 24.56 ve 24.50 olarak verilmektedir [21].

3.5.2.1 Suresh yöntemi

Malzeme de çökme ve kabarma oluşumlarını yüzey yer değiştirme faktörü β parametresine bağlı olarak ifade eden bir yöntemdir. Gerçek temas alanı ile ideal temas alanlarının oranı şeklinde (3.10) denklemiyle gösterilmektedir. Malzeme

davranışı ifade edilirken $\beta >1$ iken çökme, $\beta <1$ iken taşma olmakta, $\beta = 1$ ise ideal durum söz konusu olmaktadır.

$$\beta = \frac{A_i}{A_g} = \frac{24.5}{C_g} \tag{3.10}$$

Bu yöntemde ayrıca toplam yer değişimi ile gerçek temas yer değişiminin birbirine oranı şeklinde ifade edilen ilişkisi de denklem (3.11) ile verilmektedir [15].

$$A_g = \frac{24.5}{\beta} h_{max}^2 = 24.5 h_c^2 \tag{3.11}$$

3.5.2.2 Doerner Nix yöntemi

Denklem (3.12) kullanılarak gerçek temas derinliğinden alan hesabı yapılmaktadır. Deneysel eğriden elde edilen derinlik değeri denklem (3.11) de yerine konarak alan hesaplaması yapılmasını sağlar.

$$P_{max} = S(h_{max} - h_c) \rightarrow \int \frac{dP}{P_{max}} = \int \frac{dh}{(h_{max} - h_c)}$$
(3.12)

3.5.2.3 Oliver ve Pharr yöntemi

Denklem (3.13) te verildiği şekliyle h_c değeri deformasyon miktarı, maksimum yük ve S eğimine bağlı olarak hesaplanır ve denklem (3.11) de yerine konarak alan hesaplanır. Bu yöntem çökme gösteren malzemelerde başarılı olurken, kabarma gösteren malzemeler için yetersizdir. Çünkü (3.13) denkleminde görüldüğü üzere h_c nin alabileceği en büyük değer h_{max} tır. Bu yüzden de kabarma durumlarını temsil etmekte başarısız olmaktadır [29].

$$h_s^L = h_{max} - h_c \to h_s^L = h_{max} - \varepsilon \frac{P_{max}}{S}$$
(3.13)

3.6 Indentasyonda Enerji Yaklaşımı

Indentasyon sırasında plastik deformasyon için harcanan enerjinin plastik olarak deforme edilmiş hacme oranı denklem (3.13) e göre klasik sertlik hesaplama denklemi ile ilişkilendirilmiştir [31].

$$\frac{Y\ddot{u}k}{Alan} = \frac{Plastik \, \dot{I}_{\$} \, (W_p)}{Plastik \, Hacim \, (V_p)}$$
(3.14)

Bu yöntem ile sertlik belirleme, malzemenin gösterdiği çökme ve kabarma gibi deformasyon davranışlarından, batıcı uç geometrisinin değişkenliğinden ve yüzey pürüzlülüğü gibi etmenlerden etkilenmemektedir. Ayrıca yük-batma derinliği eğrisinden gidilerek iş ve hacim hesabı yapıldığı için kalıntı iz alanı hesaplanmaz [32].

Deney düzenli olarak kaydedilirken elde edilen yük-derinlik eğrilerinin işlenmesi ile harcanan enerjiyi hesaplamak mümkündür. Eğrinin yükleme kısmının altında kalan alan indentasyonda elastik ve plastik deformasyona harcanan enerjiyi vermektedir. Enerjiyi hesaplamak içinse şekil 3.4 de gösterilen indentasyon eğrisi integre edilerek toplam enerji elde edilir. (3.15) denkleminde ki boşaltma eğrisine uydurulan eğrinin integral değeri ise elastik enerjiyi vermektedir [21,33].



Şekil 3.4: İndentasyonda toplam enerji ve enerji bileşenleri: W_t=W_e+W_p.

Vickers uç için elde edilen Vickers sertliği izin köşegenine(d) bağlı (3.16) daki denklemler ile ifade edilir. Birinci denklemdeki ortalama diyagonel boyunu mükemmel keskin uç için batma derinliği eşiti olan d=7h_p ile değiştirirsek, ikinci denklemi elde ederiz. Kullanılan hp derinlik değeri boşalma eğrisinin ilk kısmı için uydurulan eğrinin derinlik eksenini kestiği noktadaki derinlik değeridir.

$$HV = 1.8544 \times 10^{-3} P_{max} / d^2 \to HV = 0.0378 \times 10^{-3} P_{max} / h_p$$
(3.16)

Plastik deformasyon için harcanan enerji, maksimum yükün, kalıntı izin izdüşüm alanına oranı şeklinde ifade edilirse $P_{max}/A = W_p/V_p$ eşitliğine ulaşılmaktadır. Plastik olarak deforme olan hacim (Vp) ideal batıcı uç için $V_p=24.5h_p^3/3$ olarak kabul edilirse, enerji yaklaşımı ile Vickers uç için sertlik değeri (3.17) denklemi ile hesaplanır [21].

$$HV(GPa) = 1.8544 \times 10^{-3} W_p(Joule) / h_p^3(\mu m)$$
(3.17)

4. GEOMETRİK MODELLERİN OLUŞTURULMASI

Geometri bileşenlerinin oluşturulması safhasında Salome-Meca adlı Linux tabanlı CAD programı kullanılmıştır. Deney sistemini tam olarak temsil edecek, batıcı uç ve numune grafiksel olarak tasarlanmış ve Pyton dilinde varyasyonlara hazır olarak dokümantasyon altına alınmıştır.

4.1 Batıcı Uç Geometrileri

Berkovich ve Vickers batıcı uç geometrileri sırası ile şekil 4.1 ve şekil 4.2 de verilmiştir. Birinci aşamada, 2 Boyutlu simülasyonlarda yarım konik uç kullanılmış ve Berkovich eşdeğeri yarım açı değeri seçilmiştir. 3 Boyutlu simülasyonlarda ise ayrı ayrı küresel ve Berkovich uçlar modellenmiştir.

İkinci aşamada ise 2 boyutta çizilen yarım konik ucun sivri kısmına tepe eğriliği verilmesi amacıyla literatürde mevcut uç eğriliği denklemleri kullanılarak yay oturtulmuştur. 2 boyuttaki geometri 3 boyutta temsil edilebilmesi açısından simetri ekseni etrafında 3 adımda döndürülerek Berkovich uç elde edilmiştir.



Şekil 4.1: Berkovich batıcı uç geometrisi [4].



Şekil 4.2: Vickers Batıcı Uç Geometrisi [4].

4.1.1 Berkovich uç

Berkovich ucun kullanılmasının gerekliliği kullandığımız cihazda da aynı tip ucun bulunmasından kaynaklanmaktadır. Bu şekilde yapılan testler ve simülasyonların tutarlılığı irdelenebilmektedir. Berkovich ucun geometrik ölçüleri literatürde olduğu gibi cihazın kullanma kılavuzunda da bulunmaktadır [4]. Ayrıca sonlu elemanlar yönteminde gerekli sınır koşullarını uygulayabilmek için batıcı ucun üst ve alt kontak yüzlerinin geometrik grupları oluşturulmuştur [Şekil 4.3].

4.1.2 Vickers uç

Şekil 4.3b de görülen Berkovich uç modellemesindeki prensipler kullanılarak, geometrik bağıntılarından yola çıkılarak de Vickers uç modellenmiştir [4].

4.1.3 Küresel uç

Literatürde ilk olarak incelenen Hertz elastik kontak teorisi olmuştur. Bu teori, elastik kontak durumunda 2 boyutlu modeller üzerinde yer değiştirme alanı için analitik çözüm sunmaktadır. Buradan yola çıkarak şekil 4.3a daki küresel uç kullanımı ile simulasyona karar verilmiştir.



Şekil 4.3: Küp numune ve küresel uç (a) ve (b) Berkovich uç modellemesi.

4.1.4 Eğri tepeli sivri uç

Mükemmel sivri uç üretilmesi mümkün olmadığı için literatürde belirtildiği üzere çeşitli eğrilik yarıçaplarında 2 boyutta ve 3 boyutta uç eğriliği verilerek Berkovich ve eşdeğer konik uç modellemeleri yapılmıştır. (Şekil 4.4) Tepe ucunun eğriliğinin hesabı ve yükseklik değerleri 4.1 ve 4.2 denklemleri ile bulunabilir [4,34].

 $\Delta h = 0.064R$

$$h_s = R(1 - \sin \alpha) \tag{4.2}$$

(4.1)





4.2 Numune Geometrisi

2 boyutlu simülasyonlar için dikdörtgen yüzey modellemesi yapılmıştır. 3 boyutlu simülasyonlar için ilk alternatif 2 boyutlu yüzeyin şekil 4.5 döndürülerek şekil 4.6 da görülen silindirik numunenin elde edilmesidir [10]. Doğrudan 3 boyutlu simülasyonlar da kullanılmak için küp şeklinde bir geometri de kullanılabilmektedir.



Şekil 4.5: İki boyutlu sonlu elemanlar modeli.



Şekil 4.6: İki boyuttan üç boyuta eksenel döndürme ile silindirik numune oluşturulması [10].

5. SONLU ELEMANLAR AĞININ (MESH) OLUŞTURULMASI

Sonlu elemanlar yönteminde en önemli aşamalardan bir tanesi de mesh yani eleman ağının oluşturulmasıdır. Geometrik modelin nasıl sonlu parçalara ayrılacağına, hangi bölgelerin daha sık bir şekilde bölüneceği bu aşamada gerçekleştirilmektedir.

Bu çalışmada geometrik modeli meshlemek için çeşitli stratejiler denenmiştir. Her durum için sırası ile eleman tipleri ve geometrik formları değiştirilirken (tetrahedral, hexaedral, kuadratik veya lineer gibi), bu elemanların yerleşim şekilleri ve yoğunluk dağılımlarını etkileyen farklı algoritmalar kullanılmıştır.

Modelde, batıcı uç ve numunenin alt ve üst geometrik yüzeylerine karşı gelen mesh grupları oluşturulmuştur. Ayrıca programlama algoritmalarında malzeme tipini ve mekanik davranış biçimlerini atayabilmek için batıcı uç ve numune bulk olarak ayrıca gruplanmıştır [35].

Programda, meshleme işlemi tüm geometrik komponentler için, sırasıyla 1D,2D ve 3D de parçalanmalı olarak sıralı bir şekilde gerçekleşmektedir. Bunun içinde algoritmalar ve bunların hipotezleri kullanılmaktadır. Seçilen elemanların lineer veya kuadratik olması, bölümleme sıklığı ve eleman tiplerine karar verilir.

5.1 Numuneler için Seçilen Mesh Ağı

5.1.1 Genel yaklaşım

2 boyutlu simulasyonlar için 1 boyutta, kenar ayrıtlarının parçalanma sayısını belirten "wire discretisation" algoritması seçilmiştir. Bu kod sayesinde eşit uzunlukta parçalama yapılabildiği gibi analitik yoğunluk fonksiyonu tanımlayarak belirli bir nokta etrafında parçalama sıklığını arttırma da yapılabilmektedir.

Her kademede bir sonraki adımda seçilecek elemanlara uygun tipte alt elemanlar seçilmelidir. 2D de üçgen elemanları seçtikten sonra 3D de prizmatik elemanlar seçmek doğru sonuçlar vermemektedir. Ayrıca batıcı ucun numune yüzeyindeki karşıt noktası koordinat sisteminin merkezi seçilmiş ve "Opave" şeklinde isimlendirilmiştir.

3 boyutlu simülasyonlarda farklı tipte mesh sıklığı içeren numuneler kullanılmıştır. Şekil 5.1 ve şekil 5.2 de nanoindentasyon için orta bölgesi dairesel olarak sıklaştırılmış ve sadece üst yüzeyi sıklaştırılmış sonlu elemanlar ağı modelleri gösterilmektedir.



Şekil 5.1: Kontak bölgesinde sık eleman içeren tipte 3 boyutlu sonlu elemanlar ağının gösterimi.





5.1.2 Silindirik numune

2 Boyutlu simülasyonlarda ilk akla gelen ve kullanılan geometri tipi dikdörtgen elemanlardan oluşan büyük bir dikdörtgen bloktur [3]. 3Boyutlu simülasyonlarda ise ilk düşünce silindirik geometride bir numune kullanımını amaçlamaktadır [5]. 2D de kullanılan dikdörtgen blok, yoğunluk fonksiyonu kullanılarak koordinat merkezine doğru daha sık eleman içerecek şekilde meshlenmiştir.

Şekil 5.3 te gösterilen şekilde Z ekseni simetri ekseni kabul edilerek, 2 boyutlu modelin tam rotasyonu yapılıp silindirik 3 boyutlu numune elde edilmiştir. Sonrasında, limit koşullarının uygulanabilmesi için mesh grupları oluşturulmuştur.

Rotasyon işlemi 2 boyutta oluşturulan grupları ve elemanları ekstrüzyon işlemi ile 3 boyutta uzatır.



Şekil 5.3: 2 boyutlu modelin 3boyutlu silindirik model ve elemanlarla oluşturulmuş şeklinin gösterimi [10].

Bu modelde, rafinasyonda daha sık ve düzgün şekilli elemanlar merkeze doğru toplanmışken, belirli bir radyüs dışındaki dikdörtgen elemanlar ekstrüzyon sonucunda geometrik olarak çarpıklaşmıştır. Oluşturulan pentahedrik elemanların boyut oranları düzgün değildir. Bu çarpıklık, yükleme sonucu oluşan gerilme, yer değiştirme ve deformasyon gibi etki alanlarının homojen olmayan ve hassasiyetten uzak sonuçlar vermesine neden olmaktadır.

Sonuç olarak, elde edilecek iz ve kontak yüklemesi sonucu oluşacak mekanik etki alanları, çarpılmış eleman formlarının yaratacağı etki yüzünde antisimetrik ve hassaslıktan uzak olacaktır. Bu tip anti simetrik etkiler batıcı uç geometrisinden veya kontak mekaniğinin doğasından kaynaklandığında anlam teşkil etmektedirler. Bu yüzden simetrik model terk edilmiştir.

5.1.3 Küp şekilli numune

Silindirik numunenin yerine küp şeklinde bir numune kullanılmıştır. Rafinasyon için farklı algoritma ve hipotezler kullanılmıştır.

<u>2 Boyutlu Simulasyonlar</u>: 1 boyutta "wire discretisation" algoritması ile kenar ayrıtları parçalaması yapılırken, 2 boyutta sonlu eleman ağı dikdörtgen elemanlar ile tamamlanmıştır.

1 Boyutta kenar ayrıtlarının parçalama algoritmasının merkeze doğru rafinasyon

sağlaması için bir yoğunluk fonksiyonu kullanılmıştır. 2 boyutta ise dikdörtgen elemanlar seçilerek mesh modeli oluşturulmuştur.

<u>3 Boyutlu Simülasyonlar:</u> İlk olarak koordinat merkezindeki "Opave" yani (000) noktası merkez alınarak rafinasyona başlanmıştır. Birinci strateji yoğunluk fonksiyonu belirleyerek, nokta etrafında eleman sıklığı arttırılmıştır. İkinci stratejide fonksiyon tanımlamadan sadece Opave noktası etrafında bulunacak elemanların kenar uzunlukları minimum boyutta atanarak 3 boyutta (0 0 0) noktasında doğru sıklaşan bir eleman ağı oluşturulmuştur.

1 Boyutta, kenar ayrıtlarının parçalanması eşit sayı verilerek elemanların eşit boyutta oluşturulması amaçlanmıştır.

2 Boyutta, ilk başta dikdörtgen şekilli elemanlar seçilmişse de, batıcı ucun tepe noktasının numune ile ilk temas edeceği noktada rafinasyon gerekliliğinden üçgen şeklinde elemanlara dönülmüştür.

3 boyutta, üçgen elemanlara uygun olması açısından üçgen piramit elemanlardan faydalanılmıştır.

Şekil 5.4 te Opave orta noktasına doğru sıklaşma gösteren ve eleman hacmi küçülen tipte mesh yapısı görülmektedir.



Şekil 5.4: Küp şeklindeki numunenin orta noktaya doğru sıklaştırılmış sonlu elemanlar ağı içeren tipi.

Numunenin, özellikle de kontak durumuna geçecek bölgelerin neden öncelikli olarak daha sık bir sonlu elemanlar ağına sahip olması gerektiği ve sonuçların kaba bir ağ yapısında nasıl yetersiz kaldıığı şekil 5.5 te gösterilmektedir.



Şekil 5.5: Kaba ve sık bir ağ yapısında ideal Berkovich ucun bırakacağı izin temsili görüntüleri.

5.2 Batıcı Uç Sonlu Elemanlar Ağı

Batıcı uçlar deforme olabilmesine karşın test edilen malzemelere oranla daha direngen oldukları için elastik davranış gösterirler. Bu yüzden, plastisite analizinde kullanılacak mesh ağının çok rafine olmasına gerek görülmemiştir.

5.2.1 Berkovich batıcı uç

Berkovich geometrisine, kaba mesh ağı ve bölümleme oluşturan otomatik bir algoritma (NETGEN) ile mesh oluşturulmuştur. Tetrahedral elemanların eşit olarak dağıtılması yeterlidir. Aşırı yoğun bir mesh ağı ile hesaplama zamanını yükseltmek gereksiz görülmüştür.

Şekil 5.6 – 5.8 de sırası ile ideal bir Berkovich uca 100nm mertebesinde tepe noktası eğriliği verilerek oluşturulmuş sonlu elemanlar modellerini göstermektedir. Şekil 5.6 ofset diye tabir edilen küt uçtur. Şekil 5.7 deki eğrilik 2boyutta üçgen yüzlerin tepe kısımlarından eğriltilmesi ile oluşturulmuştur. Şekil 5.8 tepe noktasında giden doğru parçalarının 100nm eğriliğe karşı gelen dikey koordinatlardan itibaren parçalı olarak eğim verilmesi ile elde edilmiştir.



Şekil 5.6: Offset olarak oluşturulan küt uç.



Şekil 5.7: Tam eğrilik verilerek oluşturulan uç.



Şekil 5.8: Berkovich uca kademeli olarak eğrilik verilmiştir.

5.2.2 Küresel uç

Küresel uç kullanıldığında lineer elemanların kullanılması geometriyi temsil etmekte sıkıntı çıkarmaktadır. Lineer elemanlar sadece 2 düğüm noktası (node) içerdiği için eğrisel yüzeyi temsil etmede zorlandığı görülmüştür. Çizelge 5.1 de farklı elemanların bünye fonksiyonları verilerek karşılaştırması yapılmıştır. Şekil 5.9 da temsili bir sıcaklık profilini farklı eleman tiplerinin hangi hassaslıkta yansıtabildiği gösterilmiştir [36]. Lineer elemanların matematiksel bünye bağıntıları geometrik temsilde lineer interpolasyon uyguladıkları için yüzey topolojisi karmaşık şekilleri iyi temsil edemezler. Bu problemi aşmak için orta düğüm noktası bulunduran kuadratik elemanlar kullanılarak küresel uca mesh oluşturulmuştur.

Eleman Tipi	Bünye Fonksiyonları
Lineer	$T = C_1 + C_2 X$
Kuadratik	$T = C_1 + C_2 X + C_3 X^2$
Kubik	$T = C_1 + C_2 X + C_3 X^2 + C_4 X^3$

Çizelge 5.1: 1boyutlu sonlu elemanların bünye fonksiyonları[36]

C değerleri eleman katsayıları, X yatay eksende uzunluk/birim değerleridir.

Şekil 5.10 da boyutlarına göre simulasyonlarda kullanılan sonlu eleman tipleri verilmiştir. Buna göre 1boyutta lineer elemanlardan kuadratik ve kubik tiptekilerin şekilleri görülmektedir. Yüzey elemanlarından üçgen ve dörtgen elemanlar temsil edilmektedir. 3 boyutlu olarak ta üçgen piramit, pentahedrik (5 yüzlü üçgen tabanlı prizma) ve hexahedrik (6 yüzlü küp) elemanlar da şekil 5.10 da gösterilmiştir [37]. Yapılan simülasyonlarda 3 boyutlu durum için kullandığımız elemanlar genellikle üçgen piramit ve hexahedrik elemanlar olmuştur.

Ayrıca analizlerde etki alanlarının daha homojen temsil edilebilmesi amacıyla tetrahedral elemanları hexahedral 6 yüzlü elemanlarla değiştirilmiştir. Hexahedral elemanların kullanabilmek için ana geometri de 6 yüz içermelidir. Bu yüzden küresel uç yarım küre yerine çeşitli CAD operasyonları ile 6 yüz içerecek şekilde tam bir küreden kesilip çıkarılmıştır. Ardından mesh atılmıştır.

Sıcaklık Dağılımı Grafiksel Gösterimi



Şekil 5.9: Bir Sıcaklık Problemi İçin Farklı Elemanların Sonuçları Ne Hassaslıkla Verebileceğinin Gösterimi: a) Lineer Elemanlar b) Kuadratik Elemanlar c) Kübik Elemanlar [36].



Şekil 5.10: Simulasyonlarda kullanılan sonlu eleman tiplerinin gösterimi [37].

5.3 Nanoindentasyon Modeli için Sonlu Elemanlar Sınır Koşulları

Sınır koşullarını belirleyebilmek için gerçek bir nanoindentasyon deneyinin nasıl yapıldığını incelemek yeterli olmaktadır. Şekil 5.11 ve şekil 5.12 da 2 ve 3 boyutlu simulasyonlarda kullanılan sınır koşulları sırasıyla gösterilmektedir.

 Batıcı uç numune yüzeyine doğru harekete geçer ve iki yüzey arasında kontak gerçekleşir.

Sonlu elemanlar yönteminde, hesaplama gidiş yolunda kontak doğrudan formülasyon da tanımlı değildir. Kontak durumu, program üzerinde kodlama yaparken hangi yüzeylerin kontak halinde olacağı tanımlanarak temsil ettirilmektedir. Bu bağlamda batıcı uç ve numunenin kontak durumundaki yüzeyleri seçilir ve kodlamada yerleştirilir.

- Numunenin alt yüzeyi hiç bir şekilde hareket etmemelidir. Dikeyde ve yatayda yer değiştirme gösteremez. Bunu temsil edebilmek için alt yüzey seçilerek ankastre olacak şekilde sabitlenir.
- Numune orijinal olarak yanal alanlarından serbesttir. Simülasyonlarda kullanılan numune mikroyapıdan kesilip çıkarılan bir hacim olarak ta kabul edilebilir. Bu yüzden programlamada yanal sınır koşulları olarak yüzeyler serbest bırakılmıştır.
- 4. Derinlik hassasiyetli deneyler, yer değiştirme veya yük kontrollü yapılmaktadır. Yük kontrollü gidiş yolunu seçmek programın hesaplama aşamasında yakınsama sorunları yaratabildiği görülmüştür. Elastik limit aşıldığında, plastisite durumunda gerilme-gerinme diyagramı yataylaşır. Bu yüzden hesap süresi artmaktadır.

Uygulanan yük eğri üzerinde hesaplama çevriminin ve yakınsamanın daha dar bir bölgeye hapsolmasına ve hatta yakınsamanın gerçekleşmemesine neden olduğu görülmüştür. Bu yüzden batıcı ucun üst yüzeyi, yer değiştirme kontrolü seçilerek simülasyonda yükleme durumu temsil edilmektedir.

Yer değiştirme ekseni Z ekseni olarak tayin edilmiştir.



Şekil 5.11: 2 boyutlu modelin üzerinde sınır koşullarının gösterimi.



Şekil 5.12: 3 boyutlu model üzerinde numune için limit koşullarının gösterimi.

6. KONTAK MEKANİĞİ VE GENEL KONSEPTİ

Kontak mekaniği temas halindeki iki yapının birbiri ile etkileşimini mekanik temeller bakımından incelemektedir. Kontak sırasında oluşan ortalama basınç ve basınç dağılımı profilini belirlemek amaçlanmaktadır. Etkileşim sonucu meydana gelen gerilme alanı ve kritik gerilme değerleri belirlenebilmektedir. Malzemenin özellikleri ile kontak mekaniğinin etkileşime verdiği tepki arasında ilişkilendirilme yapılmaktadır. Kontak halinde bulunan yapıların, yüzeylerin uyumlu olması şartı yoktur (Conforming Contact). Birbirinden geometrik olarak farklı ve birbiri ile uyuşmayan yüzeylerde kontak halinde bulunabilmektedir (Non-Conforming Contact) [10].

Kontak tipi elastik ve ya inelastik olabilir. 2 Boyutlu sürekli kontak modellerinde analitik sağlama yapılabilmektedir. Bu sağlama Hertz teorisi ile gerçekleştirilmektedir. İnelastik kontak mekaniğinin çözümü ise analitik olarak yetersiz kalmaktadır. Bu yüzden nümerik analiz yöntemleri kullanılmaktadır [38].

6.1 Hertz Elastik Kontak Teorisi ve Çözümlemesi

Şekil 6.1 de görülen Hertz tipi kontak durumunda 2 cisim veya yüzey temas gerçekleştiği andan itibaren elastik olarak etkileşime girdiği durumdur [10].

İki cismin elastik olarak birbirine penetrasyonu gözlemlenirken kontak bölgesinde oluşan gerilme ve deformasyon dağılımları bulunarak malzemenin hasara uğrayıp uğramayacağı tahmin edilebilmektedir. Kontak bölgesindeki basınç dağılımı p(r) aşağıdaki denklem ile hesaplanabilmektedir [10].

$$P(r) = P_0 [1 - (r/a)^2]^{1/2}$$
(6.1)

Burada; "**P**⁰" maksimum basınç, r kontak noktasının radyal uzaklığı ve "a" kontak bölgesi yarıçapıdır.

Aks simetrik 2 elastik katının kontak durumunda oluşturdukları basınç dağılımını veren fonksiyon denklem (6.2) de verilmiştir [10].



Şekil 6.1: 2 dairesel cismin elastik temasının şematik gösterimi [10].

$$\sigma_r/p_0 = \sigma_\theta/p_0 = -(1+\nu)\left[1 - \left(\frac{z}{a}\right)\arctan\left(\frac{a}{z}\right)\right] + \frac{1}{2}(1+z^2/a^2)^{-1}$$
(6.2)

$$\sigma_{z}/p_{o} = -(1 + z^{2}/a^{2})^{-1}$$
(6.3)

Gerilme dağılımı (6.1) denkleminden hareketle (6.2) ve (6.3) denklemlerinden maksimum basınç ve yer değiştirmelerin dâhil edilmesi ile hesaplanmaktadır

Hertz Teorisi batıcı uç altında oluşan gerilme ve yer değiştirmelerin analitik olarak hesaplanabilmesi için genel süreç işleyişine yönelik örnek teşkil etmektedir [10].

6.2 Genişleyen Kavite Modeli (GKM)

İndentasyon da inelastik kontak sonucu oluşan plastisite durumunda ucun altında ki hacimde meydana gelen deformasyon bölgeleri "Genişleyen Kavite Modeli" ile analitik olarak 2 boyutta incelenebilmektedir. Analitik çözümleme (6.3) denklemi ile 2 boyutta verilmektedir.

Bu modelde deformasyon hacmi 3 temel bölgeye ayrılmaktadır. Penetrasyon arttıkça bu zonlar yer değiştirme artacağından radyal olarak genişler.

Zon 1 -batıcı ucun hemen altında yüksek plastik deformasyon sonucu kesme kuvvetine maruz kalan hidrostatik çekirdeğin bulunduğu ve batıcı uç ile birebir kontak halinde bulunan bölgedir. Bu plastik kesme zonu klasik kayma hattı teorisi (Classical slip line theories of rigid perfect plasticity) ile açıklanmaktadır [11,21,39].

Zon2- daha çok plastisitenin etkin olduğu elastik-plastik davranış gösteren bölgedir.Zon1 in çevresinde küresel ikinci bir katman olarak yer alır (Şekil 6.2). Bu bölgedeki deformasyon gradyantları Johnson tarafından belirlenen sınır şartları ile incelenmektedir [11,21,39].

Zon3- En dışta bulunan ve elastik limit içinde deformasyon gösteren bölgedir [Şekil 6.3] [11,21,39].

Deformasyon alanları incelemesine göre Tabor Zon2 deki karakteristik plastik şekil değişiminin %8 deformasyona denk geldiği önermesini yaparken literatürde yapılan FEM simülasyonları plastik kesme zonu içinde karakteristik deformasyonun %29 olduğu sonucunu vermiştir [16,21,39].

$$\frac{Basinc}{\sigma_y} = \frac{2}{3} \left[1 + ln \left(\frac{\left(\frac{E}{\sigma_y}\right) tan\beta + 4(1 - 2\nu)}{6(1 - \nu^2)} \right) \right]$$
(6.4)

6.4 denklemin de E Young modülü, σ akma gerilmesi, v Poisson oranı, β uç açısıdır.



Şekil 6.2 : "dh" miktarı batma sonucu "da" kadar kontak yarıçapında artış olmakta bunun sonucunda plastik hacimde "dc" kadar bir genişleme oluşmaktadır [11].

6.3 Code-Aster ile discret kontak modellemesi

Code-Aster bünyesinde kontak durumunun modellemesi 2 temel yöntem ile yapılabilmektedir. Birincisi "discrete methode" olarak adlandırılan kontak durumu-



Şekil 6.3: GKM de plastik zonun radyal bölgelere ayrımının şematik temsili [39].

nun sonlu elemanlar (SE) çözümleme aşamasının dışında değerlendirildiği ve 2 aşamalı kontak kotrolü+sonlu elemanlar çözümünün iteratif olarak tekrarlandığı yöntemdir. Ikincisi ise kontak ve SE algoritmalarının tanımlama kurulum ve çözümünün birlikte ele alındığı sürekli yöntemdir [40].

Her iki yöntemde de yükleme olarak tabir ettiğimiz kontak şartlarının belirlenip programlamaya girilmesi gerekmektedir. Kullanılacak kontak algoritması tipi seçilebilmektedir. Bu doğrultuda, iki yüzey arasındaki ayrışma tipi, usta (master) diye tabir edilen batırılan cismin yüzeyi, köle (slave) olarak tabir edilen batmanın oluştuğu cismin yüzeyi belirtilmelidir. Temas eden yüzeylerdeki SE çözüm denklemlerinin çözümünde kullanılacak iterasyon sayısının sistemin tamamında kullanılan iteratif çözüm sayısından ayrıştırılması gibi özelliklerde mevcuttur. Nano indentasyonda bu çalışmada kullanılmamış olsa da programda sürtünme katsayıları da tanımlana-bilmektedir. Bundan sonraki aşamada kontak için geçerli olacak matematiksel yakınsama kriteri, kontak ilerleyişinin zaman adımlarına ayrıştırılması ve genel çözüm için uygulanacak çözüm algoritması seçilir.

6.3.1 Kontak çifti oluşumunda slave-master konsepti

"Discrete" kontakt metodunda veya "Continous" tipteki kontak metodunda master ve slave yüzeyleri belirlenir ve geometrik modellemeye bağlı olarak yüzey arası ayrışma tipi belirlenerek iki cismin birbiri ile teması sırasında mekanik davranışın ele alınış biçimi programa tanıtılmaktadır. Bu yüzey seçimleri master ve slave tanımlamaları rastgele yapılmamaktadır. Mantıksal ve fonksiyonel seçimleri şu kurala göre yapılmaktadır.

Master Yüzey: Kontak sırasında baskın olan ve etken ana katı cisme ait olan yüzey mesh grubudur. Master olarak tanımlanan yüzey slave diye tanımlanan yüzeye batabilir, yani onun içine penetre edebilir. Nanoindentasyonda master yüzey batıcı uç olarak seçilmiştir [41].

Slave Yüzey: Kontak sırasında baskın olmayan ve temastan etkilenen katı cisme ait yüzey mesh grubudur. Slave yüzeyi üzerindeki elemanlar ve nodelar etkileşim sırasında master yüzeyin içine kesinlikle giremez. Nanoindentasyonda slave yüzey numunenin üst yüzeyi seçilmiştir [41].

Bu yüzey tiplerinin seçimi çok önemlidir. Yanlış seçim, tutarsız sonuçlara neden olabildiği gibi simülasyonun gerçekleşmemesine de neden olabilmektedir. Master ve slave yüzeyler belirlendiği zaman hangi katı cisim hangisine penetre edebileceği şarta bağlanmış olmaktadır. Bu sayede kontak sırasında slave yüzeyin master yüzeye penetrasyonu, o yüzeyi yarması ihtimali tamamen ortadan kaldırılmış olmaktadı. [41].

6.3.2 Nodal, yüzeysel ayrışma ve kontak çifti normallerinin tanımlanması

Yükleme sırasında, ayrışma tipi seçimi kontak mekaniği bağıntılarının oluşturulması aşamasında denklem kurulumunda yer alacak master-slave çiftlerinin belirlenmesi sonrasında gerçekleştirilmektedir. Çiftler belirlendikten sonra temas sırasında aralarında ayrışma şartları berlirlenerek kontağın nasıl ilerleyeceği ve algoritmanın her ilerleme adımını nasıl yorumlayacağı seçilmektedir. En temel ayrışma biçimleri Şekil 6.4 da gösterildiği üzere nodal ve yüzeyseldir. Nodal karmasık olmayan yüzeyler ya da tekil kontak içeren problemlerde kullanışlı iken, yüzeysel ayrışma karmaşık veya geniş yüzeysel temasın olduğu problemlerde kullanılmaktadır [41].

Master ve Slave yüzeylerin normal vektörlerinin yönüde temel rol oynamaktadır. Çünkü slave yüzeye ait her bir noktanın yükleme ve kontak esnasında master yüzeye yansıtılması ve kontak şartlarının incelenerek kontak denklemlerinin numerik olarak yazımı ardında da SE çözüm aşamasının gerçekleştirilmesi ardışık olarak kademe kademe yüzey normallerinin etkisi ile gerçekleştirilmektedir [41].

Yüzey normalleri vasıtası ile yüzey noktaları yansıtılıp temas olup olmadığı kontrol edildiği ve SE çözümüne müdahale edildiği gibi ayrıca bu normal yönleri vasıtası ile katı cisimlerin iç ve dış yüzeyleri belirlenmektedir.

Şekil 6.5 de gösterildiği üzere normallerin tanımlanmaması durumunda program katı cisimlerin yerleşimini bilemeyeceği için kontak çözümlemesini yapamamaktadır [42].



Master-Slave Temelli Blok Ayrışma

Nod Temelli Tekil Ayrışma

Şekil 6.4: Kontak şartlarının belirlenerek, kontak yönetimini sağlayan master-slave ayrışma yöntemlerinin gösterimi [41].



Şekil 6.5: Cisim normallerinin yönü daima dışarı çıkan doğrultudadır [42].

6.3.3 Signorini kontak şartları

Bu şartlar, ön tanımlı olarak iç içe geçmeme, içe girişmeme şartları olarak tanımlanır. Kontak olmadığı durumda, doğal olarak normal kontak kuvveti sisteme etkimeyecektir. Birbirine penetrasyon, iç içe geçme imkânsızdır. Bu şartın ihlal edilerek yanlış kontak yorumlaması Şekil 6.6 da gösterilmektedir. İlk olarak kontak haline geçen yüzeyler koyu çizgilerle gösterilmiştir. İlerleyen durumda program iç içe geçmeyi algılayamamakta ve hala bu yüzeyleri iki cisim arasındaki tek temas çizgisi olarak kabul ederek yanlış hesaplama yapmaktadır. Kontak oluştuğu durumda ise yüzey normali yönündeki kontak reaksiyonları iç içe geçmeyi, birbirine penetrasyonu önlemek kaydıyla herhangi pozitif değerleri alabilmektedirler. Negatif değer almaları imkânsızdır çünkü bu içe içe pentrasyonu göstermektedir. Şekil 6.7 de gösterildiği üzere bu şartları koşularak yapılan, iki cisim birbirlerine temas ettikleri andan itibaren birbirlerinin içine geçmeden, birbirlerini yarmadan, farklı iki cisim olarak kalmak kaydıyla birbirleri ile etkileşime devam etmek zorundadırlar [42,43].

6.3.4 Kontak şartlarının özeti

Kullanılan algoritma bloğu ile program temel olarak hangi cismin hangi cisme baskın olacağını ve penetre edeceğini tanımaktadır. İçe geçme ve içe penetrasyon, yırtılma gibi durumlar ne olursa olsun kontakt sırasında oluşmamalıdır. Kontak durumunun devam edebilmesi için yüzey normallerinin doğrultusu bilinmelidir. Bu olmadığında master-slave eşleşmesinde cisimlerin 2 veya 3 boyutta yerleşimi, iç-dış yüzey tanımlamaları gerçekleştirilememekte, mekanik etkileşim hesaplanmamakta ve algoritma çökmektedir.



Şekil 6.6: Yüzey mesh gruplarının belirlenmesi ve master-slave yüzeylerinin normal vektörleri ile birlikte gösterimi [42].



Şekil 6.7: İki cisim arasında iç içe geçme olduğu durumda orjinal kontak yüzeylerinin ve cisimlerin gerçek yerleşiminin temsili [41].

6.4 Sürekli Yöntem ile Kontak Modellemesi

Bu yöntemin en büyük avantajı çatlak içeren modelleri, yüzey pürüzlülüğüne sahip yüzeyler arasında gerçekleşen kontak hesaplamalarında daha başarılı olmasıdır. Bu yüzden ileri kontak hesaplamalarında sürekli yöntemin seçilmesi daha doğru sonuçlar vermektedir. Şekil 6.8 de yüzey pürüzlülüğüne sahip cisimler arası kontak görülmektedir. Uygunluk şartları bakımından ifade edilmesi ve sürekli kontak yönteminin getirdiği avantaj şekil 6.9 da gösterilmektedir [42,43].

Compliance modeli Discreet kontak yöntemi ile yüzey pürüzlülüğüne sahip cisimlerin kontağındaki oluşan durumu göstermektedir. "dn" yüzey pürüzlülük değeri olarak açıklanmaktadır. Çıkınıtıların ezilmesi gerekirken iç içe penetrasyon gerçekleşmektedir. Buda Signorini modelindeki kontak mekaniğinin sağlıklı ilerlemesi için gerekli şartları ihlal etmektedir. Sürekli Kontak yönteminde ise iç içe geçme ortadan kaldırılır. Multi-Niveau modeli ile gerçekçi bir kontak mekaniği simulasyonu elde edilir [42,43].



Şekil 6.8: Yüzey pürüzlülüğüne sahip cisimler arası kontağın yürütülme adımları [43].



Şekil 6.9: a) Komplians modeli b) İdeal Signorini modeli c) Multi-Niveau modeli [43].

7. NANOİNDENTASYONDA KULLANILAN ANALİTİK VE NÜMERİK MALZEME DAVRANIŞ KANUNLARI

7.1 Numerik Malzeme Davranış Modelleri

Sonlu elemanlar analizinde, geometri ve mesh ağı oluşturup sınır koşullarını belirledikten sonraki aşama malzemenin gösterdiği davranışa uygun kanunları seçip simülasyonda uygulamaktır.

Yükleme ve sınır koşullarının anlatıldığı kısımda bahsedildiği üzere, geometrik modelde numune alttan ankastre yapılmış ve üst yüzeyi batıcı uç ile kontak bölgesi olarak tanımlanmıştır. Yanal yüzeyleri tüm davranış modelleri için serbest yüzeyler olarak seçilmiştir. Izotropik kanunlar için kontrol hacminin çevresindeki malzemeninde izotropik olduğu ve serbest olarak etkilendiği düşünülerek yanal yüzeylere kısıtlayıcı sınır koşulları verilmemiştir. Boyut etkisi için kullanılan tekkristal dislokasyon dinamiği kanunlarında ise kontrol hacmini tek bir tanenin tamamen içinde kalacağı düşünülerek etrafındaki malzemenin de aynı taneye ait olacağından yola çıkılarak yanal yüzey kısıtlaması yapılmamıştır.

7.1.1 Elastik davranış modeli

Yüklemenin başında özellikle küresel bir uç ile çalışılırken malzemenin gösterdiği tepki tamamen elastik olmaktadır. Bunu en iyi temsil eden durum 2 yarı dairesel cismin P kuvveti etkisi altında temas haline geçmesi halinde görülmektedir. İlk başta tek bir noktada temas vardır. Zaman ilerledikçe ilk temas noktası etrafında elastik olarak cisimler deformasyona uğrar ve iki cisim arasındaki temas alanı artar. Temas alanı üzerinde P kuvveti etkisi ile oluşan gerilme dağılımını ve asal gerilmeleri belirlemek, analitik olarak her nokta için bu hesapları yapmak çözülmesi gereken esas problemdir [44]. Elastik davranışta oluşan yer değiştirme ve gerilme alanları analitik olarak Hertz teorisi ile incelenebilmektedir. Kontak sırasında davranışın tamamen elastik olduğunu kabul ederek, Hertz teorisini temel alarak çalışılmaktadır [10]. Elastik kontak şartlarında cisimlerin etkileşimini nümerik ve analitik

yöntemlerle karşılaştırmasını yapan çalışmalardan elde edilenlere göre iki yöntemin benzer sonuçlar verdiği görülmüştür [45,46].

7.1.2 Elasto-plastik davranışlar

Indentasyonda test edilen numunenin elasto-plastik davranış gösterdiği kabul edilerek plastisite analizleri ilk etapta J2 (VonMises 2.variant) temelli akma kriterini esas alan, hıza bağımsız plastisite teorileri kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bu bağlamda kullanılan teoriler VMIS_ISOT_LINE ve VMIS_ISOT_PUIS adlarıyla Code-Aster programına kayıtlı elasto plastik katılar için bir elastik davranış bölgesi ve isotropik hardening şeklinde plastik davranış bölgesi içeren davranış kanunlarıdır. VMIS_ISOT_LINE elastik rejimden sonra lineer izotropik pekleşmeye (linear isotropic hardening) dayalı plastisite kullanarak çalışmaktadır. VMIS_ISOT_PUIS ise elastisiteden sonra deformasyon sertleşmesi üssüne bağlı plastisite kullanarak malzeme davranışını temsil etmektedir [47].

Bu davranış kanunları polikristal malzemelerin davranış doğasına uygun olup tamamen isotropic ve hıza bağımsız özelliktedirler. J2 tipi kanunlarda plastik akmanın kayma süreci ile aktive olduğu önerilmektedir. Bu kayma süreci ile dislokasyon kayma hareketi arasında fiziksel uyumluluk bulunmaktadır. Ayrıca analitik olarak ifade edilen akma yüzeyi, belirgin yönlenme içermeyen polikristal malzemelerdeki davranış durumunu ifade etmekte tutarlıdır. Malzemenin her tanesi yönlemesine bağlı olarak farklı davranış göstermekte bu da makro düzeyde akma yüzeyi ile temsil edilene uygun izotropik bir davranış sergilemektedir [48].

Bu modeller Needleman ve Bouvier'in çalışmasında bahsedildiği üzere malzemenin homojen bir davranış sergilemesine neden olmakta, yükleme durumuna bağlı olarak tane yönlenmesinin etkisi ve kayma sistemlerinin etkileşimi ve aktivasyonu gözardı edilmektedir. Ayrıca bu tip kanunlar yüklemenin hızının etkilerini de temsil edememektedir. Oysaki malzeme de tek bir tane üzerine yapılan yüklemelerde boyut etkisi, aktif pasif kayma sistemleri etkisi görülmektedir [49].

Indentasyonda tek bir tanenin hacminden daha az malzeme hacmini etkileyen batmanın gerçekleştiği sığ derinlikli deneylerde derinlik azaldıkça sertlik artışı olarak ortaya çıkan ve boyut etkisi (ISE) olarak tanımlanan malzeme davranışı önem kazanmaktadır. Izotropik kanunların diğer bir kısıtı da bu etkiyi temsil etmekte yetersiz kalmalarıdır [50].

7.1.3 Elasto visko plastik: tekkristal davranış modeli

Burdaki temel amaç malzemenin elastoviskoplastik davranışını simule edebilmektir. Bu amaçla, indente edilen malzemenin belirli bir yönlenmeye sahip tek bir kristalden oluştuğunu varsayarak bir tekkristal davranış modeli tanımlanmıştır [10].

Tekkristal kanun un fonksiyonel yapısı sayesinde numune istenen kristalografik doğrultularda yönlendirilebilmektedir. Kristale yönlenme verme, numune geometrisinin tanımlı olduğu global kartezyen kordinat sistemine göre tek bir tanenin kristalografik kordinat sistemini tanımlamak için Euler açılarının seçilmesi ile gerçekleştirilmektedir [51].

7.1.4 Kocks-Rauch dislokasyon dinamiği modeli

Her kayma sistemi bünyesinde var olan ve yaratılan dislokasyon yoğunluğunu iç değişken olarak hesaba katan ve formülasyonunda barındıran bir modeldir. Değişik sıcaklıklarda ki dislokasyon yoğunluğunun etkisini de yansıtabilmektedir [51].

7.2 Diğer Numerik Modeller

Yukarıda bahsedilen numerik modeller dışında literatürde özelliklede elektronik kaynaklardan çıkan yayınlarda değişik viskoplastik davranışlar kullanılarak, inelastik davranış biçimini boyut etkisini ve deformasyon hızının etkisini içine alan modeller oluşturulmuştur.

Fleck ve arkadaşları tarafından geliştirilen deformasyon gradyenti plastisitesi (strain gradient plasticity, SGP) mikron altı boyutlarda etkili olan deformasyon ve pekleşme davranışını dislokasyon teorisine ve yoğunluğu değişimine bağlamaktadır. Haque ve Saif in çalışmalarında yer aldığı üzere deformasyon gradyantı temelli modeller ince filmler gibi çok ufak boyuttaki sistemlerin davranışını incelemede kullanılmaktadır. Tho ve arkadaşları yaptıkları çalışmada ufak boyutlardaki deformasyonun gradyant etkisini incelemek amacıyla SGP, deformasyon gradyantı plastisitesi temelli davranış modeli kullanarak simülasyonlar gerçekleştirmişler ve boyut etkisini yorumlamışlardır [52-54].

Malzeme davranışları 1 boyutlu mekanik sistemlerle de ifade edilebilir. Bu sistemler elastik, plastik, vizkoz davranış gösterirler. Bu reolojik sistemler kullanılarak viskoplastik davranış gösteren modeller türetilebilmektedir. Viskoplastik Genel Bingham Modelinde plastik davranış, vizkoz piston elemanı eklenerek viskoplastik davranışa yükseltilmiştir. Ovaert ve arkadaşlarının çalışmasında sıcaklık etkisini de hesaba katmak ve nanoindentasyonda sürünme davranışını incelemek için elastoplastik ile plastik davranış elemanlarının paralel bağlandığı viskoplastik reolojik model türetilip simulasyonlar ile test edilmiştir [55,56].

7.3 Analitik Davranış Modelleri

Bu davranış modelleri, sonlu elemanlar analizlerinde direk kullanılamayan, ilk ortaya çıkma temelleri deneysel çalışmalardan ve dislokasyon teorilerinden yararlanılarak gerçekleştirilen yöntemlerdir.

7.3.1 Indentation-size-effect bağımlı davranış modelleri

İndentasyonda karşılaşılan boyut etkisini plastik zonun boyutu ve dislokasyon teorisine dayandırarak inceleyen ve deney sonuçlarını yorumlayan modellerdir. Taylor dislokasyon modelinden hareketle Nix ve Gao tarafından önerilen dislokasyon teorisi ve modifiye edilmiş olan Geometrik Olarak Gerekli Dislokasyon teorisi ile bu iki teoriden hareketle sertlik hesabı yapan Ma-Clarke modelleri en çok kullanılan modellerdir. Öyle ki SGP numerik analiz modeli bunlar üzerinden yorumlanarak geliştirilmiştir [52].

7.4 Davranış Kanunlarının Mekanik Modellenmesi

Plastisite ve viskoplastisite için farklı davranış kanunları kullanılabilmektedir. Ayrıca sonlu eleman modelindeki farklı kısımlara farklı davranış tipleri atanabilmektedir. Örnek olarak bizim modelimizdeki batıcı uç mükemmel elastik bir malzeme olarak kabul edilmiştir. Numune ise elastik, elastoplastik ve elastoviskoplastik olarak 3 farklı şekilde modellenmiştir. Ayrıca numune 2 kısımdan oluşan kaplama ve taban malzeme olarak programa tanıtılıp bu iki kısma farklı malzeme parametreleri atanabilmektedir.

J2 temelli akma kriteri kullanılan simülasyonlarda temel hipotezlerimiz iki tanedi. İlki (small deformations) ufak deformasyonlardır. İkinci de ise keskin indentasyon durumlarında yüksek deformasyon oluşumu nedeniyle (large deformations) büyük deformasyonlar formülasyonuna göre hesaplama yapılır [10]. (7.1) denklemi ile sistemin herhangi bir bölümündeki yerel denge şartları verilmiştir. Buna göre denklemin sağ tarafında bulunan sisteme etkiyen dış kaynaklı hacimsel kuvvetler
sıfır olmak zorundadır. Sol tarafta ise sisteme etkiyen gerilme akısı ile f kuvveti kaynaklı dinamik yüklemelerin toplamı sıfır olmak durumundadır. Statik bir problem incelediğimiz için f kuvveti kaynaklı dinamik etkiler sıfırdır. Gerilme akısıda bu yüzden sıfırdır [57].

$$div \,\sigma + \vec{f} = \rho \vec{\gamma} = 0 \tag{7.1}$$

Nanoindentasyon sisteminde hacim kaybı olmadığı için büyük deformasyonlar durumunda analiz yaparkende (7.1) denge denklemi geçerliliğini korumaktadır. Ufak ve büyük deformasyonlar arasında gerinme tensörü ifadeleri farklıdır. Ufak deformasyonlar hipotezinde normal gerinme ve kayma durumlarını ifade etmek için (7.2a) denklemindeki ε_{ij} lineer deformasyon tensörü kullanılmakta ve yapının deforme olmamış hali esas alınmaktadır. Cauchy gerilme tensörüde homojen olarak kullanılmaktadır. Büyük deformasyonlar sözkonusu olduğunda deforme olmuş yapının uzaydaki konfigürasyonuda önemlidir. İlk durum ile son durum arasında bağ oluşturan F_{ij}(E_{ij}) deformasyon gradyantı tensörü kullanılır. Yer değiştirmelerden yola çıkarak deformasyon hesabını yapar. E tensörü E_e ve E_p şeklinde elastik ve plastik parçalara ayrılır. Gerilme tensörü de Cauchy-Green halini alarak elastik ve plastik olarak ayrılır. E tensörü kullanılarak büyük deformasyonlar durumunda geçerli deformasyon tensörü (7.2b) de verilmiştir [58,59].Yer değiştirmelere bağlı olarak deformasyonların hesaplanması (7.2) denklemi ile gerçekleştirilmektedir [57].

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left[\overrightarrow{grad} \ \vec{u} + \left(\overrightarrow{grad} \ \vec{u} \right)^T \right]$$
(7.2a)

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x'_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x'_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x'_i} \frac{\partial u_k}{\partial x'_j} \right]$$
(7.2b)

Code-Aster bünyesinde büyük deformasyonlar için elastoplastik kanunlarda Simo-Miehe tarafından önerilen deformasyon hesabı yöntemi kullanılırken, viskoplastik monocristal kanunları için Green-Lagrange deformasyon tensörü kullanılarak hesaplama yapılmaktadır [59].

7.5 Tam Elastik Davranış

Elastisite teorisinin detaylı açıklamasını burada yapmamakla beraber temel denklemlerin aktarılması uygundur. Izotropik elastisite davranışı klasik olarak (7.3), (7.4), (7.5) denklemleri ile ifade edilmektedir. Rijitlik tensörü 3 boyutlu gerilme tensörünü deformasyon tensörüne (7.3) denklemi ile bağlar [60,61].

$$\varepsilon_{ij} = A_{ijkl} : \sigma_{kl} \tag{7.3}$$

Elastisite kanununun Young modülü ve poisson oranı cinsinden ifade edilişi (7.4) denklemi ile Lame sabitleri cinsinden homojen malzemeler için ifade edilişi ise (7.5) denklemi ile verilmiştir [60,61].

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} tr(\sigma_{ij}) \delta_{ij}$$
(7.4)

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \tag{7.5}$$

Burada; E: Malzemenin Young Modülü (GPa), A_{ijkl}: Elastik Katılık (Rijidite) Tensörü, v: Poisson Oranı (Birimsiz), μ,λ: Lamé katsayıları (Birimsiz, GPa)

7.6 Elasto-Plastik Davranış

Elastoplastik davranış modeli 2 aşamalıdır. Bir elastik davranış bölgesi mevcuttur. Elastik limit üzerinde de plastik davranış bölgesi tanımlanmıştır. (7.6) denklemi ile toplam deformasyonun elastik ve plastik olarak bileşenlere ayrıştırılması görülmektedir [47,62].

$$\dot{\varepsilon}^{tot} = \dot{\varepsilon}^{elastik} + \dot{\varepsilon}^{plastik} \tag{7.6}$$

(7.7) ve (7.8) denklemleri ile sırasıyla bu modelde malzemede deformasyona yol açan deviatoric gerilme komponenti ile equivalent VonMises gerilme değerleri hesaplanmaktadır vermektedir [47,62].

$$S_{ij} = \sigma - \frac{1}{3}\sigma_{kk}\delta_{ij} \tag{7.7}$$

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}} S_{ij} S_{ij} \tag{7.8}$$

VonMises Izotropik plastisitesini kullanan malzeme davranışı modellerinde kinematik pekleşme (kinematic hardening) ve vizkoziteye bağlı olarak deformasyon hızına duyarlılık bulunmamaktadır. Ayrıca malzemenin maruz kalacağı her türlü termik etki de göz ardı edilmektedir [47,62].

(7.9) ve (7.10) denklemleri ile gösterildiği üzere modelde plastisite bölgesindeki davranış plastik akış ve plastisite kontrol kriterleri ile sağlanmaktadır [47,62].

$$\dot{\varepsilon}^p = \frac{3}{2}\dot{p}\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_{eq}} = \dot{\varepsilon} - A^{-1}\sigma$$
(7.9)

$$\sigma_{eq} - R(p) \le 0 \quad \rightarrow p = 0 \quad if \quad \sigma_{eq} - R(p) < 0$$

$$\rightarrow p \ge 0 \quad if \quad \sigma_{eq} - R(p) = 0$$
(7.10)

 $\dot{\varepsilon}^{p}$ = Plastik deformasyon hızı, p = Birikmiş plastik deformasyon

R(p) = İzotropik pekleşme fonksiyonu

Şekil 7.1 de görüldüğü üzere plastisite, hidrostatik eksen üzerinde çakışık asal gerilmelerin koordinat takımında tanımlı temsili plastik gerilme yüzeyi ile temsil edilebilmektedir [39]. Çizelge 7.1 ve çizelge 7.2 de, Tresca ve VonMises kriterleri ve kriterlere göre oluşturulmuş gerilme yüzeylerinin birbirlerinden farkı gösterilmektedir.



Şekil 7.1: Asal gerilmeler türünden gerilme yüzeylerinin temsili gösterimi [39].

	VonMises	Tresca
Kriterler	$f(\sigma_{ij}) = J - \sigma_y$	$f(\sigma_{ij}) = max_{i,j} \sigma_i - \sigma_j - \sigma_y$
Kesme Çekme	$f(\sigma,\tau) = (\sigma^2 + 3\tau^2)^{1/2} - \sigma_y$	$f(\sigma,\tau) = (\sigma^2 + 4\tau^2)^{1/2} - \sigma_y$
Çift Yönlü Çekme	$f(\sigma_1, \sigma_2) = (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 - \sigma_1 \sigma_2)^{1/2} - \sigma_y$	$f(\sigma_{max}, \sigma_{min}) = \sigma_{max} - \sigma_{min}$
	σ_{12} τ_m	σ_2 σ_y

Çizelge 7.1:VonMises ve Tresca kriteri karşılaştırılması [55].



a) Kesme ve Çekme

b) Çift Eksenli Çekme

Şekil 7.2:VonMises ve Tresca akma yüzeylerinin karşılaştırılması [55].



Şekil 7.3: Izotropik ve kinematik pekleşme olaylarının akma yüzeyine etkisi [39].



Şekil 7.4: Izotropik ve Kinematik pekleşme olaylarının gösterimi[55]

Şekil 7.3 ve şekil 7.4 de izotropik ve kinematik pekleşmenin temsili gerilme yüzeyine etkileri gösterilmektedir. f_0 yükleme etkimeden önceki ilk gerilme yüzeyi, fi izotropik pekleşme durumunda yüzey genleşmesi, fk kinematik pekleşme durumunda yüzey değişimi, fc izotropik ve kinematik pekleşmenin birlikte bulunduğu durumda yüzey değişiminin temsilidir [39].

Code-Aster bünyesinde 3 tip VonMises plastisite modeli bulunmaktadır. Bilinear, Multilinear ve Üstel VonMises modelleridir. Hesaplamalarda temel olarak bilinear kullanılmış ise de multilinear ve üstel Von Mises modellerinin de hesaplamalardaki performansı test edilmiştir.

7.6.1 Bilineer izotropik pekleşme bağıntısı

Şekil 7.5 te Bilinear Von Mises plastisitesi kullanarak hesaplama yapan modelin elastisite ve plastisite bölgeleri görülmektedir [63]. Vizkozite etkisi bu modelde tanımlı olmadığı için plastisite bölgesinde bilinear etkiyi gösterecek şekilde eğimi malzeme parametresi olan ikinci bir doğru plastisitedeki fiziksel davranışı belirlemektedir [62].



Şekil 7.5: Bilineer Von Mises plastisite davranışı gerilme-gerinme eğrisi temsili [63].

(7.11) denklemi elastisite ve plastisitede geçerli olan gerilme hesaplarını vermektedir. L indisi yükleme durumunu temsil etmektedir. (7.12) denkleminde

plastik deformasyon ifade edilmiştir. Tek eksenli yükleme durumu elealınarak $\sigma_{eq}=\sigma_L$ kabulü yapılmıştır. Denklem (7.13) ile plastisite şartı ve pekleşme kriteri kullanılarak plastik deformasyon miktarına bağlı izotropik pekleşme fonksiyonu R(p) verilmiştir [47].

$$\sigma_{L} = E \varepsilon_{L} \qquad e \breve{g} er \quad \varepsilon_{L} \leq \frac{\sigma_{L}}{E}$$

$$\sigma_{L} = \sigma_{L} + E_{T} (\varepsilon_{L} - \frac{\sigma_{y}}{E}) \qquad e \breve{g} er \quad \varepsilon_{L} \geq \frac{\sigma_{y}}{E}$$
(7.11)

$$p = \varepsilon_L^p = \varepsilon_L - \frac{\sigma_{eq}}{E} \quad ise \ \sigma_{eq} = \sigma_L \quad ve \ \sigma = \begin{bmatrix} \sigma_L & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(7.12)

$$\sigma_{eq\approx L} - R(p) = 0 \quad i \text{ cinde} \quad R(p) = \frac{E_T E}{E - E_T} p + \sigma_y \tag{7.13}$$

Burada; denklem (7.11) de $\sigma_L \varepsilon_L$ yükleme durumu gerilme ve deformasyon değerleri, E_T tanjant modülüdür. Denklem (7.12) σ_{eq} de terimi eşdeğer gerilme değerini belirtmektedir. Tek eksenli durum için çözümleme yapıldığında $\sigma_L=\sigma_{eq}$ eşitliği geçerlidir. "p" sistemde biriken plastik deformasyon miktarını temsil etmektedir. Denklem (7.13) te R(p) biriken plastik deformasyon miktarına bağlı malzemenin gösterdiği izotropik pekleşme davranışını ifade eden denklemdir.

7.6.2 Multilineer (çekme eğrisi ile ifade edilen) plastisite davranışı

Bu modelde elastik davranış bilineer modeldeki gibi ele alnırken malzemenin plastisitedeki davranışı şekil 7.6 de görüldüğü gibi tek bir doğru ile değil, birden çok noktanın meydana getirdiği eğri ile temsil edilmektedir. Bu eğrinin noktaları çekme testinde elde edilen eğriye göre belirlenmektedir.



Şekil 7.6: Multilineer plastisite davranışı temsili gerilme-gerinme eğrisi [64].

(7.14) denklemi "n" tane nokta ile tanımlanmış temsili çekme eğrisinin lineer denklemini vermektedir. İlk tanımlanan noktadaki gerilme değeri akma değeri olarak alınmaktadır. Bu noktaya kadar malzemenin elastik davrandığı kabul edilirken, bu noktadan itibaren plastisite bölgesinde hesaplamalar yapılmaktadır [47].

$$\forall \varepsilon \in [\varepsilon_i, \varepsilon_{i+1}] \text{ ve } i+1 \leq n \text{ icin } \sigma = \sigma_i + \frac{\sigma_{i+1} - \sigma_i}{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i} (\varepsilon - \varepsilon_i)$$
(7.14)

(7.15) denklemine göre ilk noktadaki gerilme değeri akma gerilmesi olarak alınarak Young Modülü hesabı yapılmaktadır. (7.16) denkleminde plastik deformasyon miktarı hesaplanmaktadır içermektedir. Bir sonraki aşama plastik deformasyon miktarından yola çıkılarak denklem (7.17) deki R(p) pekleşme fonksiyonunun bulunmasıdır [47].

$$akma \ noktası \rightarrow \sigma_y = \sigma_1$$
 ve elastik bölgede $E = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1}$ (7.15)

$$p_i = \varepsilon_i - \frac{\sigma_i}{E} \tag{7.16}$$

$$\forall p \in [p_i, p_{i+1}]$$
 için $R(p) = \sigma(i) + \frac{\sigma_{i+1} - \sigma_i}{p_{i+1} - p_i}(p - p_i)$ (7.17)

7.6.3 Üssel ilişkili izotropik pekleşme bağıntısı (powerlaw isotropic plasticity)

Üstel fonksiyon modelinde farklı "n" üs değerleri için plastisite bölgesindeki davranışların eğrileri şekil 7.7 te gösterilmektedir. Plastisite bölgesi "n" ve "a" ya bağlı olarak eğrisel bir R(p) fonksiyonu ile tanımlanmaktadır. (7.18) denklemi bu modelin gerilme – gerinme bağıntısını verirken, (7.19) denklemi ise plastisitedeki davranışı kontrol eden R(p) fonksiyonunu vermektedir [47].

$$\sigma > \sigma_y$$
 iken $\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + a \frac{\sigma_y}{E} \left(\frac{\sigma - \sigma_y}{\sigma_y} \right)^n$ (7.18)

$$R(p) = \sigma_y + \sigma_y \left(\frac{E}{a \sigma_y} p\right)^{\frac{1}{n}}$$
(7.19)

Burada; a ve n malzeme parametreleri, p plastik deformasyon miktarıdır.



Şekil 7.7: Üssel İlişki plastisitesi için farklı n değerleri için R(p) pekleşme fonksiyonları temsili [47].

7.7 Elastoviskoplastik Tekkristal Davranış Kanunu

Nanoindentasyonda inilen derinlikler nanometrik mertebeye ulaşabildiği için tek bir taneye veya belirli sayıda tane grubuna indentasyon yapmak mümkün olmaktadır. Bu durumda tek bir taneden gelecek tepki ölçülebildiği gibi yönlenmeleri farklı olan birden çok taneden gelen tepkiler toplu olarak veya ayrı ayrı elde edilebilmektedir. Tane yönlenmelerinin ve tane etkileşimlerinin simule edilebilmesi için buna uygun bir davranış kanunu kullanmak gerekmektedir. Bu yüzden kayma sistemlerinin etkilerini içinde barındıran tekkristal ve polikristal plastisitesi davranış modeli seçilmiştir.

7.7.1 Kayma sisteminin tanımlanması

Bir tekkristal bir veye birden çok kayma sistemlerinden oluşmaktadır.(kubik, oktahedrik, bazal, prizmatik, bcc...). Ilk olarak anlaşılması gereken kavram kayma sistemi ve kayma sisteminin davranış üzeirndeki etkisinin ne olduğudur. Tekkristal ve polikristal yönlenmeleri programda üç Euler açısı belirlenerek verilmektedir [51].

Temel olarak kayma sistemi iki bileşenden oluşmaktadır. Birincisi yönlenme vektörü ikincisi ise kayma ile gerçekleşen plastik deformasyonun oluştuğu kristallografik düzlemdir. Bu vektör-düzlem çifti, kafes sistemindeki diğer vektör-düzlem çiftlerine göre mevcut yüklemede plastik deformasyona daha kolay uğradığı için kayma sistemi olarak adlandırılmaktadır. Mekanik temelde, kayma sistemi (7.20) denklemindeki gibi kristallografik tanımlamalardan yararlanılarak oluşturulan m^s yönlenme tensörü ile ifade edilmektedir [10,51,62].

$$m_{ij}^s = \frac{1}{2(n^{s\otimes l^s} + l^{s\otimes n^s})}$$
(7.20)

Burada;

l^s vektörü ile kayma yönü tanımlanır. \mathbf{n}^{s} vektörü aktif kayma düzlemine normal doğrultu vektörüdür. \mathbf{m}^{s}_{ij} tensörü diğer doğrultulardaki büyüklükleri (gerilme, deformasyon gibi) kayma sistemi üzerine yansıtmaya yarayan tensördür.

7.7.2 Yüzey merkezli kübik (YMK) kafesteki kayma sistemleri

Deneylerde ve simulasyonlarda kullanılan 316L tipi paslanmaz çelik yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapısına sahiptir. Kristallerde kayma yolu ile deformasyon kristal kafes ağının en yoğun düzlemleri yönünde oluşmaktadır. YMK malzemelerde kayma sistemleri {111} düzlem ailesi ve <110> doğrultu ailesi ile çiftler oluşturmaktadır [62]. Şekil 7.8 ve şekil 7.9 de YMK kafesi yapısı için yoğun düzlemler ve doğrultular gösterilmektedir.

Euler açılarının, Miller indisleri karşılığını bulmak için geometrik dönüşümlerle hesaplamalar yapılmaktadır. Miller indislerinin belirttiği doğrultu ve düzlem çifti sistemleri Euler açıları ile programa tanıtılmaktadır. Tek kristali istenen düzlemde yönlendirerek indentasyonun bu düzlem üstünde yapılmasının sağlamak amacıyla Miller indislerinden Euler açılarına geçiş uygulanmaktadır.



Şekil 7.8: Miller indisleri ile doğrultuların gösterimi [65].



Şekil 7.9: Kübik yüzey merkezli yapı için kayma düzlemlerinin gösterimi [66].

7.7.3 Kristal viskoplastisitesi

Bir monokristalde kayma sistemlerine bağlı olarak gerçekleşen davranış tipi elastoviskoplastik karakterdedir. Kayma sistemlerinin boyut ölçeğinde geçerli olduğundan tekboyutlu olarak kabul edilmektedir [51].

Viskoplastisite, bir malzemenin zamana bağımlı olarak gösterdiği inelastik davranış biçimidir. tekkristal ve polikristal ile çalışılan durumlarda, dislokasyon oluşumu ve kayma sistemlerinin etkileşimi, hareketi sonucu oluşan plastik deformasyonun mekanizması ile ilgilenilmektedir. Viskoplastik davranışın varlığı zamanla ilintili olan dislokasyon oluşumu ve kayma sistemleri etkisinden ileri gelmektedir [62].

7.7.4 Elastoviskoplastik davranışın formülasyonu

Elastoviskoplastik davranış, toplam deformasyon hızı cinsinden ifade edilebilir. Iki temel kısımdan oluşmaktadır. (7.21) denkleminde de görüldüğü üzere toplam deformasyon, elastik ve viskoplastik olmak üzere ayrıştırılabilmektedir [10,39,51,62].

$$\dot{\varepsilon}^{total} = \dot{\varepsilon}^e + \dot{\varepsilon}^{vp} \tag{7.21}$$

Küçük deformasyonlar ve küçük sapmalar hipotezi altında geçerli olan kristal viskoplastistesi davranışı kayma sistemlerinin etkileşimini temel almaktadır. Büyük deformasyonlar ve büyük sapmalar hipotezi altında da bu model çalışsada kayma sistemlerinin etkileri parametrik olarak teker teker incelenemez. Kayma sistemleri etkileşimini temsil etmek için, (7.22) ve (7.23) denklemlerinde verilen şekliyle söz konusu olan kayma sistemine etki eden kritik indirgenmiş kayma gerilmesi ve tüm

kayma sistemleri için geçerli toplam kayma hızı olarak verilen viskoplastik deformasyon hızı tanımlanmaktadır [10,39,51,62].

$$\tau^s = \sigma^g_{ij} : m^s_{ij} \tag{7.22}$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{\nu p} = \sum_{s} m_{ij}^{s} \dot{p}^{s} sign(\tau^{s} - c\alpha_{s})$$
(7.23)

Temel yaklaşım aktarıldıktan sonra incelenmesi gereken elastoviskoplastik tekkristal kanununun hesaplama adımlarını etkileyen üç önemli bileşenidir. Bunlar sırasıyla deformasyon hızının etkisi ve akma kriteri, kinematik pekleşme ve izotropik pekleşme olaylarını betimleyen denklemlerdir [10,39,51,62].

7.7.4.1 Akma kriteri

Kayma miktarı ile kayma hızı arasında kayma sistemlerine bağlı akma kriteri/akma denklemi tanımlıdır. Malzemenin deformasyon hızına (kayma sistemleri etkileşimine) duyarlılığı bu şekilde modelde temsil edilmektedir [10,39,51,62].

$$\dot{\gamma}_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \quad ve \quad \dot{p}_s = |\dot{\gamma}_s| \tag{7.24}$$

Kayma sistemi üzerinde etkili akma hızı (akma miktarının zamanla değişimi), iç değişkenleri sistemin durumunu belirten g fonksiyonu ile tanımlanmaktadır. Bu fonksiyon, kayma sistemin üzerinde etkili kritik kayma gerilmesi(τ_s), kinematik pekleşme değeri (α_s), kayma miktarı (γ_s) ve izotropik pekleşmeyi gerçekleştiren biriken plastik deformasyon miktarı (p_s) değişkenlerinden oluşmaktadır. Ayrıca (7.24) denklemine göre sistemde biriken plastik deformasyon miktarının oluşum hızı, kayma miktarının oluşum hızının mutlak değerine eşittir [10,39,51,62]. Deformasyon hızı ise (p_s);

$$\dot{p}_s = \langle \frac{|\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s)}{k} \rangle^n$$
(7.25)

denklemi ile hesaplanmaktadır.. Buna göre, ' $c\alpha_s$ ' ile tanımlanan kinematik pekleşme sistem üzerinde etkili olan kayma gerilmesinden çıkarılarak mutlak değeri alınır. Böylece kinematik pekleşme ile plastisite yüzeyinin ötelenme etkisi ortadan kaldırılmaktadır. Sonrasında ' R_s ' ile belirtilen izotropik pekleşme değeri de kalan kayma gerilmesi değerinden çıkarılıp sisteme etkiyen net kayma gerilmesi değeri elde edilerek denklemde yerine koyularak plastik deformasyon hızı hesaplanmaktadır. "k" ve "n" ise viskozite etkisini yani kritik kayma gerilmesinin oluşumundaki hız bağımlılığını belirtmektedir [10,39,51,62].

7.7.4.2 Kinematik pekleşme (hardening) oluşumunun formülasyonu

(7.26) ve (7.27) denklemlerine göre, sistemdeki kinematik pekleşmenin oluşum hızı "h" fonksiyonu ile belirtilmektedir. Pekleşmenin oluşum hızı hesabı, kinematik pekleşme miktarı, birikmiş plastik deformasyon miktarı ve "d" parametresinin çarpımından elde edilen değerin sistemde etkili kayma miktarı hızından çıkarılması ile yapılmaktadır [51].

$$\dot{\alpha_s} = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \tag{7.26}$$

$$\dot{\alpha_s} = \dot{\gamma_s} - d\alpha_s \dot{p_s} \tag{7.27}$$

Bu fark alımı ile net kayma gerilmesi hızı elde edilmektedir. Ama bu hızdan plastik deformasyon hızı ve kinematik pekleşme çarpımı çıkarılarak, izotropik pekleşme arındırılarak kinematik ötelenme elde edilmektedir.

7.7.4.3 Isotropik pekleşme (hardening) oluşumunun formülasyonu

İzotropik pekleşme oluşumu plastik deformasyon miktarını değişken olarak alan R fonksiyonu ile ifade edilmektedir.

$$R(p_s) \tag{7.28}$$

(7.28) denkleminde p_s "s" kayma sistemine etkiyen plastik deformasyona bağlı izotropik pekleşme değeridir. R fonksiyonu, elemanları kayma sistemlerinden meydana gelmiş olan etkileşme matrisinin katkısı ile gerçekleşen pekleşme miktarını içermektedir. Izotropik pekleşme parametreleri R,Q,b ve h olarak belirtilmektedir [51].

$$R_{s}(p) = R_{o} + Q\left(\sum_{r=1}^{ns} h_{sr} \left(1 - e^{-bp_{r}}\right)\right)$$
(7.29)

R fonksiyonu izotropik pekleşme miktarının kapasitesini belirlemektedir. R fonksiyonu ve değişkenlerinin alacağı sınırlar çerçevesinde pekleşme miktarı oluşumu gerçekleşmektedir. h_{sr} parametresi etkileşim matrisini ifade etmekte olup, her bir kayma sisteminin kendi kendine ve başka sistem üzerinde yaratılan sertleşme, mukavemetlenme miktarını vermektedir. Kendi kendine sertleşme deformasyon esnasında aktif olan kayma sisteminden gelen sertleşmedir. Başka sistem üzerinde yaratılan sertleşme ise aktif olmayan kayma sistemlerinin yarattığı ikincil sertleşme olarak tanımlanmaktadır [10,39,51,62].

Programın kullanım aşamasında tekkristal ve polikristal davranışları tanımlanırken yukarıda verilen akma, izotropik pekleşme ve kinematik pekleşme bağıntıları sırasıyla «ECOU_VISC1», «ECRO_ISOT1», «ECRO_CINE1» anahtar kelimeleri ile hesaplama koduna tanıtılmaktadır [51].

7.8 Kocks-Rauch Modeli Formülasyonu

Bu modelde akma kriteri dislokasyon yoğunluğu ve etkileşimini içermektedir.

$$|\tau^{s}| > \tau_{o} \text{ ise } \qquad \tau^{s}_{eff} = \langle |\tau^{s}| - \tau_{o} - \tau^{s}_{\mu} \rangle \qquad (7.30a)$$

$$\tau_{\mu}^{s} = \frac{(\mu)^{2} \sum_{u} a^{su} r^{u}}{|\tau^{s}| - \tau_{0} r} \quad ve \ r^{u} = \rho^{u} b^{2}$$
(7.30b)

$$\tau_{eff}^{s} = 0$$
 ve $\tau_{\mu}^{s} = 0$ (7.30c)

$$\tau_{eff}^s > \tau_0$$
 ise (7.31a)

$$\Delta \gamma_s = \mathcal{G}(\tau_s, \gamma_s) = \dot{\gamma_0} exp\left(\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{kT}\right) \cdot \frac{\tau_s}{|\tau_s|} \cdot \Delta t$$
(7.31b)

$$\Delta G(\tau_{eff}^{s}) = \Delta G_o \left(1 - \left(\frac{\langle \tau_{eff}^{s} \rangle}{\tau_R} \right)^p \right)^q$$
(7.31c)

$$\Delta \gamma_{s} = \mathscr{G}(\dots) = \left[\dot{\gamma_{0}} \exp\left(-\frac{\Delta G_{o}}{kT} \left(1 - \left(\frac{\langle |\tau^{s}| - \tau_{o} - \tau_{\mu}^{s}\rangle}{\tau_{R}}\right)^{p}\right)^{q} \right) \cdot \frac{\tau_{s}}{|\tau_{s}|} \right] \Delta t \qquad (7.31d)$$

$$\Delta \rho_{s} = |\Delta \gamma^{s}| \left(\frac{1}{bd} + \frac{\sum_{u \neq s} \sqrt{r^{u}}}{b^{2}K} - \frac{g_{c}r^{s}}{b^{3}} \right)$$

$$\Delta r^{s} = |\Delta \gamma^{s}| \left(\frac{b}{d} + \frac{\sum_{u \neq s} \sqrt{r^{u}}}{K} - \frac{g_{c}r^{s}}{b} \right)$$
(7.32)

Burada; μ : kesme modülü, b: Burger vektörü, ρ^{u} : dislokasyon yoğunluğu, a^{su} : etkileşim matrisi, ΔG : aktivasyon entalpisi, k_{B} : Boltzman sabiti, T: sıcaklık, γ : akma/Akı miktarı, τ : kesme gerilmesi, p,q: üssel sabitler, K: birim mesafede dislokasyonun karşılaştığı engel sayısıdır.

Oldukça karmaşık formülasyona sahip olan bu modelde 11 malzeme parametresi bulunmakta ve (7.30), (7.31), (7.32) denklem blokları birbirine bağlı olarak işlemektedir [51].

7.9 Dislokasyon Dinamiği Modelleri Formülasyonu

Taylor modeli: (7.33) denkleminde ifade edildiği üzere kayma gerilmesinin malzemenin burgers vektörü ve dislokasyon yoğunluğu cinsinden ifadesini geliştirmiştir [67].

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \tag{7.33}$$

Burada τ gerilmesi dislokasyon yoğunluğu ρ cinsinden ifade ediliyor. α : 0.3 malzeme sabiti μ : kesme modülü, b: Burgers vektörüdür.

 ρ malzemede bulunan dislokasyon yoğunluğudur. Taylor modelinde bu yoğunluk "statik olarak barındırılan dislokasyon" (SSDs) yoğunluğu olarak alınmıştır ama malzemede önceden var olan dislokasyonlar hesaba katılmamış, yalnızca defromasyon sırasında oluşan dislokasyonların yoğunluğu SSDs olarak kabul edilmiştir [67]. Geometrik Gerekli Dislokasyon (GNDs) yoğunluğu ve SSDs ayrımı yapıldıktan sonra Ashby ρ değerinin (7.34) denkleminde verildiği üzere mevcut bulununan Statik Barındırılan Dislokasyon (SSDs) yoğunluğu ve ek olarak malzemede karmaşık yükleme sırasında deforme olan bölgenin uniform deformasyonu için gerekli olan Geometrik Gerekli Dislokasyon (GNDs) yoğunluğunun birleşimi olduğunu bulmuştur [68]. GNDs varlığı ancak karmaşık yüklemelerde mevcuttur.

$$\rho = \sqrt{\rho_{SSDS} + \rho_{GNDS}} \tag{7.34}$$

$$\sigma_{flow} = M\tau \tag{7.35}$$

Plastik deformasyon (σ_{flow}) gerilmesi ise (7.35) denklemi ile verilmiştir. M kristal anizotropisinin izotropik hale gelmesini sağlayan malzemenin Taylor sabitidir. YMK malzemeler için 3.06 olarak bulunmuştur [69].

NG Modeli: Nix ve Gao tarafından batıcı uç altında, deforme edilen hacim içinde etkili GND hacmi olduğu önerilmiştir. Kalıcı şekil değişiminde göz önüne alınması gerekenin bu uç altındaki GND bölgesidir [69]. Batma derinliği ne kadar az ise GND yoğunluğu ve etkisi o kadar fazladır. Yumuşak malzemelerde GND etkisi daha fazladır çünkü dislokasyon yoğunluğu soğuk işlem görmüş malzemelere göre daha azdır ve SSD etkisi baskın değildir [18]. Orjinal Nix ve Gao modeli kusurludur. Bunun nedeni GND lerin aktif olduğu batıcı uç altındaki hacmi şekil 7.10 gibi küresel olarak kabul edilmiştir. Gerçekte bu hacim, kavite teorisine göre daha geniş bir alana yayılmaktadır. GND yoğunluğu gerçek değerinden yüksek hesaplanmakta ve bu yüzden sertlik yüksek çıkmaktadır [18, 69].



Şekil 7.10: Orjinal Nix and Gao batıcı uç altı GND yoğunluğu gösterimi [71]

Orjinal NG modelinde GND bölgesinin aktif olduğu hacmi belirleyen a_c kontak yarıçapı batıcı uç ile temas sınırını belirleyecek şekilde belirlenmektedir [18,67,70]. Modifiye edilen GND modelinde ise $a_{PZ} = f a_c$ şeklinde kontak yarıçapı f parametresi ile çarpılmaktadır [18].

$$\rho_{NG} = \frac{\lambda}{V} = \frac{3ha_c}{2ba_c^3} = \frac{3}{2}\frac{\tan^2\theta}{bh}$$
(7.36)

$$\rho_{GND} = \frac{\lambda}{V} = \frac{3ha_c}{2bf^3 a_c^3} = \frac{3}{2} \frac{1}{f^3} \frac{tan^2 \theta}{bh}$$
(7.37)

(7.36) ve (7.37) denklemleri sırası ile NG ve GND modellerindeki dislokasyon yoğunluklarının hesaplama denklemlerini vermektedir. λ toplam ilmek çizgi uzunluğu, h batma derinliği, b Burgers verktörü, V dislokasyon muhafaza eden hacim, θ yüzey ile bayıcı uç arasındaki açıdır. Şekil 7.11 de a_c, NG modelindeki kontak halindeki alanın yarıçapını, f a_c ile a_{pz} plastik zone bölgesinin yarıçapı arasındaki ilişki faktörünü temsil etmektedir.



Şekil 7.11: NG ve GND modelindeki plastik zone boyutlarının gösterimi[71]

Klasik H=C σ Tabor bağıntısı modifiye edilmiştir ve malzemenin sertliği ile dislokasyon yoğunluğu arasında derinlik bağımsız ve derinlik bağımlı ilişkiler (7.38) ve (7.39) denklemleri ile verilmiştir [4,71]. Derinlik bağımsız denklem Taylor'ın çalışmasından türevlendirilerek bulunmuştur. Nix ve Gao nun GND konsepti ise derinlik bağımlı sertlik denkleminin çıkarılmasına etki etmiştir [71].

$$H_o = C\sigma = MC\tau = MC\alpha Gb \sqrt{\rho_{SSD}(\varepsilon_{rep})}$$
(7.38)

$$H_{ISE} = C\sigma = MC\tau = MC\alpha Gb \sqrt{\rho_{SSD}(\varepsilon_{rep}) + \rho_{GND}(h)}$$
(7.39)

C batıcı uç altındaki karmaşık gerilme durumunu tek eksenli hale indirgeyen sabittir. M, Taylor tarafından önerilmiş, kayma gerilmesini tek eksenli çekme gerilmesine bağlayan sabittir. b burgers vektörü, $\alpha = 0.5$ olarak alınan ama batıcı uc altındaki dislokasyon ağının durumuna göre değişen faktör, G kayma modülüdür.

Buradan malzemenin elastik ve plastik deformasyon için gerekli kuvvet değerleri hesabı yapılırsa denklem (7.40) ile elastik kontak durumunda gerekli kritik kuvvet ve denklem (7.41) ile sadece plastik deformasyon sırasında etkili kuvvet denklemleri elde edilebilir [71].

$$F = \frac{4}{3} E_r \sqrt{R} h^{1.5} \quad ve \ \to \ F_{crit} = \left(\frac{G}{2\pi} \frac{1}{0.12}\right)^3 \frac{R^2}{E^2}$$
(7.40)

$$F = A_c M C \alpha G b \sqrt{\rho_{SSD}(\varepsilon_{rep}) + \rho_{GND}(h)}$$

$$A_c = \pi h^2 \tan^2 \beta$$
(7.41)

(7.40) denkleminde Er indirgenmiş elastik modül, R elastik kontaktaki kürenin yarıçapı, h indentasyon derinliği, G kayma modülüdür. (7.41) denkleminde ise A_c batıcı ucun alan fonksiyonu, β koniklik açısı, M ve C sabitler, b Burgers vektörü, α =0.5, ρ ise dislokasyon yoğunluklarıdır [71].

Malzeme için derinlik hassasiyetli bağıl sertlik denklemi (7.38) ve (7.39) denklemleri kullanılarak türetilmiştir. (7.42) denklemi ise dislokasyon yoğunlukları oranı şeklinde derinliğe bağlı sertlik ile orjinal sertlik arasındaki oranı vermektedir [18].

$$\frac{H}{H_0} = \sqrt{1 + \frac{\rho_{GND}}{\rho_{SSD}}} = \sqrt{1 + \frac{h^*}{h}}$$
(7.42)

h normal indentasyon derinliği, h* malzemeye özgü boyut skalasıdır ve Ho indentasyon öncesi sertlik değeridir. H ise indentasyon derinliği ile değişen sertlik değeridir. Malzemenin sahip olduğu boyut ölçeği-karakteristik uzunluk değeri (7.43) denklemi ile şu şekilde hesaplanabilir [18].

$$h^* = \frac{81}{2} \frac{1}{f^3} b \alpha^2 \tan^2 \theta \left(\frac{G}{H_0}\right)^2$$
(7.43)

Burada, NG modeline göre f=1 GND modeline göre f=1.9, θ ise numune yüzeyi ile batıcı uç yüzeyinin yaptığı açıdır. Yukarıda verilen NG ve GND modellerinden hareketle kurulan kuvvet ve dislokasyon yoğunluğu bağıntıları analitik olarak malzemede indentasyonda boyut etkisini ve davranışı belirlemede kullanılmaktadır.

8. DENEYSEY ÇALIŞMALAR

Deneysel çalışmalarda kullanılmak üzere seçtiğimiz malzeme 316L tipi paslanmaz çeliktir. Kimyasal kompozisyonu Çizelge 8.1 de verilmiştir.

Komp.	С	Mn	Si	Р	S	Cr	Мо	Ni	N	Fe
%içerik	0.02	1.8	0.50	0.03	0.01	16.4	2.1	10.5	0.0	Kalan

Cizelge 8.1: 316L tipi paslanmaz çelik kimyasal kompozisyonu [74].

Yüksek korozyon direncinin yanı sıra düşük karbon içeriğine sahip olması sebebiyle kaynaklama sırasında meydana gelen hassaslaşma direnci yüksektir. 316L üzerinde pek çok yüzey işlemi yapılmakta ve korozyon direnci arttırılmak istenmektedir. Kaplama uygulamaları göz önüne alınarak çalışmanın devamında kaplamalı bir 316L sisteminin simülasyonu gerçekleştirilebileceği için bu malzeme seçilmiştir. Ayrıca 316L belirgin tane yapısına ve sınırlarına sahip olduğu için tek kristal ve polikristal kanunlarının uygulanması ve deneysel verilerle karşılaştırılabilmesi daha kolay olacaktır. Simülasyonlarda ve deney verilerinin analizlerinde kullanılan malzeme sabitleri ise Çizelge 8.2 ile verilmiştir.

Elastisite	Elastik	Elastik Modül =190-195 GPa				Poisson Oranı = 0.3			
Bilinear Plastisite	v = 0.3	E=7	′5-195 G	Pa	Sy=	=175-250 1	MPa	Et = 7,5	-45 GPa
Tek Kristal	Ro 39.42	Q 41.23	В 12.8	H_1 1	H ₂ 1	H ₃ 0.64	H ₄ 13.6	H ₅ 1.6	H ₆ 1.95
Kanunu	n = 7.35	K =1.2 MPa		C =129865 MPa		d =4422.5 MPa			

Cizelge 8.2: Standart 316L malzeme parametreleri [51,72,73].

Tekkristal kanunundaki n,K,C akma kriterini tanımlayan sabitlerdir, d tek başına kinematik pekleşme parametresi, R,Q,B ve H ler ise izotropik pekleşme parametreleridir.

Simülasyonlarda kullanılmak üzere beynitik ve östenitik tipteki çelikler için seçilen ek parametreler ise çizelge 8.3 te verilmiştir.

Elastisite	Elastik Modül =190-195 GPa				Poisson Oranı = 0.3					
	Ro	Q	В	H_1	H ₂	H_3	H_4	H_5	H_6	KST
Beynitik	75	10	20	1	1	1	1	-	-	BCC24
	n = 10		K =40 MPa		C=1 MPa			d=37 MPa		
	Ro	Q	В	H_1	H_2	H_3	H_4	H_5	H_6	KST
Östenitik	40	0	5	1	1	0	10	0	2	Octaed.
n = 10		= 10	K =10 MPa			C =100000 MPa			d=41	50.0 MPa
Östenitik	τ_{o}	Q_1	Q2	D_L	D _A	C ₂	B_1	B_2	H_L	KST
Tek faz	75	9.77	-33.3	0	0	0	19.3	5.4	0	Octaed.
(Policfc)	N=	= 10	K =	=40 MPa		$C_1 =$	0.00001 N	1Pa	D ₁ =	=37 MPa

Cizelge 8.3: Östenitik ve beynitik tipte çelik malzeme parametreleri [72,73].

KST: kayma sistemi tipi, östenitik çelikte 6 tane H parametresi, beynitik çelikte 4 tane H parametresi vardır. Policfe tek bir tane yerine tüm malzemede tek bir faz olduğu kabulünü yapar. Karmaşık fazlar yerine homojenleştirilmiş tek bir faz bulunmaktadır.

Burada elastisite de 3 malzeme içinde aynı Young modülü ve Poisson oranları kullanılmaktadır. Plastisite durumundaki davranış farklıdır.

Nanoindentasyon sertlik ölçme numunelerinin yüzey kalitesinin hazırlanması metalografik numune hazırlama yöntemi ile zımparalama ve parlatma işlemleri ile sağlanmıştır. Deney aşamasında, CSM marka nanoindentasyon sertlik ölçme cihazı (Şekil 8.1) kullanılmış olup deneyler yer değiştirme kontrollü olarak nanoindentasyonda Berkovich uç, mikro indentasyonda ise Vickers uç ile gerçekleştirilmiştir.

Berkovich uç ile çıplak 316 L numunesi üzerinde 2µm batma derinliği deneyi gerçekleştirilmiştir. Şekil 8.2 de bu deneyin kuvvet-yer değiştirme eğrisi ve çizelge 8.4 de deneyden elden edilen sonuçlar görülmektedir.

Nitrürleme işlemi ile yüzey sertliği arttırılan 316L numunesinde 2 μ m batma derinliği deneyinden elde edilen sonuçlar ise şekil 8.3 ve çizelge 8.5 te verilmiştir.



Şekil 8.1: CSM marka nanoindentasyon cihazı.



Şekil 8.2: 316L numunesinde 2 µm batma derinliği deneyi K-Y eğrisi.



Çizelge 8.4: 316L numunesinde 2 µm batma derinliği deneyinden elde edilen analitik veriler.

Şekil 8.3:Nitrürlü 316L numunesinin 2 µm batma derinliği deneyi K-Y eğrisi.

Çizelge 8.5: Nitrürlü 316L	numunesinin 2 µm	batma derinliği	deneyinden elde
edilen analitik	veriler.		

	2 µm Deney Sonucu				
Vickers Sertliği	922.44				
OP eğimi	4.3171 mN/nm				
Ap plastik zone alanı	90369024 nm ²				
Fmaks	883.17 mN				

Vickers uç ile mikroindentasyon deneylerinde 5 µm ve 10 µm batma derinliklerinde deneyler yapılmıştır. Derinlik grafikleri şekil 8.4 de verilmektedir. Bu grafiklere göre malzemenin elde edilen özellikleri ise çizelge 8.6 de verilmektedir.



- **Şekil 8.4:** Nitrürlü 316L numunesinde 5 μm ve 10 μm batma derinliği deneylerinde K-Y eğrileri.
- Çizelge 8.6: Nitrürlü 316L numunesinde 5 µm ve 10 µm batma derinliği deney sonuçları.

	10 µm Deney Sonucu	5 µm deney sonucu
Vickers Sertliği	313.55	511.78
OP eğimi	18.5628 mN/nm	11.9285 mN/nm
Ap plastik zone alanı	2346874368.00 nm ²	579789952.00 nm ²
Fmaks	7796.35 mN	3143.74 mN

5 μm ve 10 μm batma derinliği deneyleri 316L nitrürlü numune üzerinde yapılmıştır. Teoride batma derinliği azaldıkça sertliğin ve uygulanan maksimum yükün değerinin artışı gözlemlenmelidir. 10 μm ile 5 μm deneyi sonuçları karşılaştırılırsa sertlik derinlik azaldıkça düşmektedir. Bu durum yapılan deneylerin doğru sonuçlar verdiğini bize göstermektedir.

Nitrürleme: Malzemenin yüzeyine azot yaydırarak yüzey sertliğini arttırma yöntemidir. Nitrojen atomunca zengin ortamda yüzeye azot emdirilerek orjinal malzemeden daha sert faza sahip bir yüzey tabakası oluşturulur. Bunun sonucunda

malzemenin yüzeyindeki sertlik artar. 316L numunesinde nitrürlü ve nitrürsüz durumda yapılan deney sonuçlarından da görüldüğü üzere nitrürlü numuneyi deforme etmek için gerekli kuvvet daha fazladır. F_{max} değerleri çıplak numune için 263 mN iken nitrürlü numunede gerekli kuvvet 883 mN olarak kaydedilmiştir. Bu da nitrürleme işleminin yüzey deformasyon davranışını nasıl etkilediğini göstermektedir. Standart 316L çeliğinin sertliğinde de 3 kat artış meydana gelmiş ve sertlik değeri 297 den 922 Vickers e çıkmıştır.

Nitürleme işleminin etksinin gösterilmesi için 2 µm nitrürlü ve nitrürsüz deney eğrilerinin karşılaştırması şekil 8.5 te verilmektedir. Üst üste konulan eğrilerden mukavemet artışı rahatça görülebilmktedir.



Şekil 8.5: 2 µm nitrürlü ve nitrürsüz deneyleri K-Y eğrileri karşılaştırması.

9. GERÇEKLEŞTİRİLEN SİMÜLASYONLAR

Deney sonuçlarını karşılaştırmak amacıyla, Code-Aster isimli açık kaynak kodlu Linux tabanlı sonlu elemanlar analiz programı ile 2 boyutta ve 3 boyutta simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Elastik, Elastoplastik, Elasto-visko-plastik ve Dislokasyon yoğunluğu temelli nümerik malzeme davranışı modelleri kullanılmıştır.

9.1 İki Boyutlu Analizler ve Bilineer Davranış için Parametre Belirleme

Bilineer plastisite de malzeme için 4 parametre belirlenmektedir. Bunlar Young Modülü, Poisson oranı, akma gerilmesi ve tanjant modülüdür. Poisson oranı dışındaki parametreler simülasyon sonuçlarına etkileri itibari ile optimize edilmek zorundadırlar. Şekil 9.1 de Young Modülü (E), Tanjant Modülü(Et) ve akma gerilmesinin (Sy) bilineer modelde gerilme-gerinme eğrilerine nasıl etki ettiği sıralanmıştır.

E ve Et (veya H) değerlerindeki bir artış, boşaltma kademesindeki eğimi ve geri toparlanma bölgesini etkilediği için bu değerlerin seçimi dikkatli yapılmalıdır. Malzemenin elastik modülü, boşalma kademesindeki eğim düşünülerek uygun bir değerde seçilmelidir. Et değeri de malzemenin göstereceği plastisiteyi etkilemektedir. E-Et değerleri birlikte eğride artış sağlarken birbirilerini de etkilerler ve boşalma eğimini değiştirirler. Malzemeye uygun E değeri bulunduktan sonra, deney eğrisinin çıktığı maksimum yük miktarına erişmek için Sy akma gerilmesi değerinin uygun seçimi yapılmalıdır. Sy ile eğrinin yükleme bölümüyle birebir örtüşme sağlandıktan sonra, geri çekilme ve boşalma eğimi optimizasyonu ile E ve Et tekrar ayarlanmaktadır.

316L için elastoplastik 2 boyutlu 100 e yakın simülasyon yapılmıştır. Eksen-simetrik model kullanılarak yapılan simülasyonların verdiği sonuçlar genelleştirilmiş ve yorumlamaları yapılmıştır.

Şekil 9.2 de E ve Sy sabit olup sadece Et parametresinin değişimi ile eğrinin değişimi görülmektedir. Et değeri 40 GPa dan 50GPa ya arttığı zaman eğri yukarı doğru

kayar, ulaşılan maksimum kuvvet değeri artar ancak malzemenin gösterdiği geri çekilme de artar. E-Et ikilisinin oranı değiştiği için eğim ve toparlanma değişir.

Şekil 9.3 de E, Et ve Sy nin değişiminin eğri oluşumuna etkisi görülmektedir. Sy değeri eğrinin ulaştığı maksimum yük değerini en fazla etkileyen parametredir. E ve Et değerleri ise geri çekilme miktarını belirlemede aktiftirler.



Şekil 9.1: E,Et ve Sy parametrelerinin etkileri.



Şekil 9.2: E ve Sy sabitken Et değişiminin K-Y eğrisi üzerine etkisinin gösterimi.





Şekil 9.4-9.6 de 2µm batma derinliğindeki deney eğrisiyle çakıştırılmış simülasyon sonuçları görülmektedir. Genel sonuç Çizelge 9.2 de verilmektedir.



Şekil 9.4: Parametrelerin (E190000, Et100000, Sy200, Coef: 1.2, S: 0.51) K-Y eğrisi simülasyonu.



Şekil 9.5: Parametrelerin (E190000, Et40000, Sy400, Coef:2.2, S:0.97) K-Y eğrisi simülasyonu.



Şekil 9.6: Parametrelerin (E75000, Et6500, Sy300, Coef 8, S 1.16) K-Y eğrisi simülasyonu.

Sonlu elemanlar analizinde 2 boyutlu eksen simetrik modelin kullanım amacı hızlı sonuç vermesi ve sonuçların 3 boyuta eksen etrafında tam dönüş ile genişletilebilmesidir. Termal ve Gerilme analizlerinde tutarlı sonuçlar veren bu model, kontak mekaniğinin ve plastisitenin bulunduğu nanoindentasyonda düzgün çalışmamıştır. 2 boyuttan 3 boyuta geçiş, sonuçların $2\pi = 6.28-6.29$ katsayısı ile çarpımı ile yapılmaktadır.

Pa	rametreler (MPa	Katsayı	Boşalma Eğimi	
E190000	ET4500	Sy200	10.7	5.64
E190000	ET10000	Sy300	5.8	2.85
E190000	ET45000	Sy300	2.16	0.96
E190000	ET75000	Sy200	1.5	0.64
E190000	ET25000	Sy300	3.2	1.48
E90000	ET5000	Sy300	9	2.14

Cizelge 9.2: İki boyutlu simülasyonların sonuçlarının yorumlanması

Standart 316L üzerinde, 2μ m batma derinlikli deneyde elde edilen eğim 1.08 dir. Simülasyonlarda 316L için 190 Gpa Young modülü seçildiği zaman 2π çarpımı sonucu eğrilerin çakışması için Et değeri 4.5-10 GPa arası seçilmelidir. Ancak E-Et ikilisi 190 GPa—4.5-10 GPa aralığındaki değerleri ile kontak direngenliğini temsil eden ve elastik modül hesabında kullanılan boşalma eğiminin 1.08 olan deneysel değeri ile örtüşmemektedir. Ancak Elastik modül şekil 9.6 deki gibi 75 GPa seçilirse eğim değeri örtüşmektedir. Bu da 2 boyutlu analizlere devam etmenin, model çalışabilirliğini ve komut satırlarının test edilmesi dışında tutarlı ve isabetli sonuçlar vermediğinin kanıtı olarak yorumlanmıştır.

Buna rağmen yapılan simülasyonlarda, indentasyonda meydana gelen temel olaylar gözlenebilmiştir. Şekil 9.7 de, %29 karakteristik plastik deformasyon bölgesi, genişleyen kavite teorisine göre deformasyon alanının radyal yayılımı ve malzemeye özgü olan çökme (sink-in) olayı görülmektedir.

Genel anlamda bakacak olursak modelin başarısız olmasının sebebi kontak mekaniği ve plastisitenin var olduğu problemlerde sonuç sapmalarının yüksek olmasına bağlanmıştır.



Şekil 9.7: İki boyutlu simülasyonda temel indentasyon olaylarının gösterimi.

9.2 Üç Boyutlu Simülasyonlar

3 boyutlu simülasyonlarda sırasıyla elastik, elasto-plastik bilineer, multilineer, üstel ve elasto-visko-plastik tek kristal yasaları kullanılmıştır.

9.2.1 Elastisite simülasyonları

Elastisite simülasyonlarının yapılmasının tek amacı ilk olarak oluşturulan sonlu elemanlar sisteminin ve programlama aşamasında yazılan deneyi sanal ortamda yaptıran komut satırlarının işleyip işlemediğini kontrol etmektir.

Simülasyon sonuçları Şekil 9.8 de yer değiştirme (U) ve deformasyon (ε) alan dağılımları olarak, Şekil 9.9 te ise kuvvet-yer değiştirme eğrisi ile gösterilmektedir.



Şekil 9.8: Küresel batıcı uç ile elastik indentasyon ve radyal alan dağılımı.



Şekil 9.9 : Tam elastik sayılabilecek indentasyonun kuvvet yer-değiştirme eğrisi.

9.2.2 Bilineer Von Mises izotropik plastisite temelli simülasyonlar

Bu analizlerde malzemenin parametreleri optimize edilerek deney verileri ile tutarlılık sağlanmaya çalışılır. İlk olarak ideal Berkovich uç ile simülasyonlar yapılmıştır. Bilineer, multilineer ve üstel davranış modelleri için kullanılan geometrik sistemde numune boyutları 0.016x0.016mm olarak alınarak modellenmiş. Berkovich uç için yükseklik değeri 0.005 mm olarak kullanılarak geometrisi oluşturulmuştur.

9.2.2.1 İdeal Berkovich uç

Şekil 9.10-9.13 de değişik parametreler verilerek yapılmış 3boyutlu elastoplastik analizlerden en başarılı olanlarının verdiği eğrilerin, deney sonucu elde edilen eğri ile karşılaştırmalı simülasyon grafikleri verilmektedir.



Şekil 9.10: 2µm batma derinliğinde E190Gpa, ET40Gpa, Sy 475MPa parametreleri.

Seçim aşamasında dikkat edilen, simülasyonlarda elde edilen maksimum yüklerin deney eğrisini aşmamasıdır. Yükleme bölgesinde eğrilerin birbiri ile yakın ilerlemesi ve son olarak S eğimlerinin gerçek eğime en yakın sonucu veren değerin mevcut olduğu analizin belirlenmesi ile en doğru parametre seçimi yapılmaktadır.



Şekil 9.11: 2µm batma derinliğinde E193GPa, ET35GPa, Sy 200MPa parametreleri.



Şekil 9.12:K-Y eğrisinde E193 serisi simülasyonlarının genel karşılaştırılması.

Bu ilk sonuçlara göre E193 GPa Et 32-35 GPa Sy 475 MPa parametre değerleri benzetim için fazla gelmiştir. Hem boşaltma eğiminin deneydekinden yüksek çıkması hem de deney eğrisinin aşılması nedeniyle parametre değerlerinde değişikliğe gidilmiştir.

Bu amaçla ilk olarak Sy=475 MPa lık akma noktası parametresinde azaltma gerçekleştirilirken, Et parametresi için 25-32 GPa lık değer aralığı seçilmiştir. Ayrıca E/Et oranı göz önüne alınarak E nin arttırılmasına karar verilmiştir.

Şekil 9.13-9.14 te eğri ile çakıştırma başarılı olsada E/Et oranından kaynaklanan S eğimi deneydekinden yüksek çıkmıştır, dolayısıyla bu parametreler uygun değildir. Bu etapta uygun görülen optimizasyon E'nin arttırılması ve Sy'nin belirli oranda düşürülmesidir. Sy'nin değişimi eğimi etkilemeden eğriyi değiştirdiği için ilk olarak bu parametredeki değişimin üstüne gidilmiştir.



Şekil 9.13: 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET40GPa, Sy 400MPa parametreleri. Sy nin değişimi eğimi etkilemeden eğriyi değiştirdiği için ilk olarak bu parametredeki değişimin üstüne gidilmiştir. Şekil 9.15 te görüldüğü üzere, Sy deki azalma eğri ile çakışmayı olumlu olarak etkilemiştir. E/Et oranı değişmediği için eğim uygun değerde elde edilememiştir.

Şekil 9.16 da Et değeri arttırılarak ve Sy değeri azaltılarak eğrinin çakıştırılması büyük ölçüde gerçekleştirilmiştir. Ayrıca E190GPa/Et30GPa oranı için, elde edilen simülasyon eğimi eğimde deney eğimine yakındır. Şekil 9.17 da bu parametreler ile yapılan simülasyon sonuçları karşılaştırmalı eğriler olarak gösterilmektedir.



Şekil 9.14: 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET25GPa, Sy 400MPa parametreleri.



Şekil 9.15: 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET25GPa, Sy 300MPa parametreleri.



Şekil 9.16: 2µm batma derinliğinde E190GPa, ET30GPa, Sy 200MPa parametreleri.





E=194GPa ve Et=28GPa parametreleri kullanılarak yapılan simülasyonda eğrinin 2µm deney eğrisi ile çakışıp çakışmadığı incelenmiştir. Yükleme kısmında eğrinin çakıştığı gözlemlense de, boşaltma kademesinde eğim çok yüksek çıkmıştır. Bu son incelemeden sonra E190 GPa ve akma değeri 200 MPa olarak alınarak 2 yeni

simülasyon daha yapılmıştır. İlkinde Et değeri 25 GPa verilmiş ama S eğimi 1.10 üzerine çıkarak deneydeki veriyi aşmıştır. Boşaltma eğrisinde de çakışma olmamıştır. Son simülasyonda ise Et 27.5 GPa verilmiştir. Bu deneyde kullanılan parametreler başarılı sonuçlar elde etmemizi sağlamıştır. Bu son simülasyonun sonuçları Şekil 9.18 ve Şekil 9.19 de gösterilmektedir. Görüldüğü üzere en iyi eğri çakışma ve eğim değeri E=190GPa, Et=27.5GPa, Sy=200MPa parametreleri ile elde edilmiştir.



Şekil 9.18: 2μ m batma derinliğinde E190GPa, ET27.5GPa, Sy 200MPa, S = 1.08.



Şekil 9.19: K-Y eğrilerinde E190GPa, ET27.5GPa, Sy200MPa parametreleri ile eğim karşılaştırması.

316L tipi çelik malzemenin akma noktası 185-240 MPa civarındadır. Young modülünün de 190-193 GPa arasında olduğu göz önüne alınırsa Et parametresi uygun bir değerde seçilerek, E ye bağlı eğimin deney verisine en uygun değerde çıkması sağlanabilir. En fazla müdahale edilen E ve Et parametreleridir. Çünkü eğrinin hem eğimini hem de kuvvet ekseninde ulaştığı değerleri birlikte etkilemektedirler.

Sonuç olarak, işlemsiz 316L numune üzerinde, 3 boyutlu ideal Berkovich uç ile bilineer izotropik plastisite kanunu kullanılarak yapılan simülasyonlarda en uygun parametrelerin E=190GPa, Et=27.5 - 30GPa, Sy=180-200MPa olarak alınmasına karar verilmiştir. Şekil 9.20 da yükleme kademesi sonunda elde edilen yer değiştirme alanı verilmiştir. Şekil 9.21 de yükleme sonu maksimum yer değişimi ve elastik toparlanma miktarlarının gösterimi mevcuttur. Buna göre seçilen parametreler ile yapılan simülasyonda 2.1µm den 1.71 µm ye geri toparlanma sözkonusudur.

Şekil 9.22 ve 9.23 de iz bölgesinde gerçekleşen deformasyon alanı ve miktarları gösterilmektedir. Buna göre sonlu elemanlar ağının etkilerini de göz önüne alırsak izin merkezinde ortalama %30 civarı plastik deformasyon, bir dış katmanında %15-25 oranında plastik deformasyon oluşumu söz konusudur. Burada dikkat edilmesi gereken husus %8 lik taşma durumunu temsil eden pozitif deformasyondur. Gerilme alanına bakacak olursak normalize edilen gerilme alanı değerlerine göre indentasyon bölgesinde eşdeğer gerilme cinsinden 6 GPa'lık bir iz bölgesi bulunmaktadır (Şekil 9.24). Normal gerilmeler ise 2-6 GPa arasındadır. Şekil 9.25 te ise yükleme işlemi sonunda yüzeyde batıcı uç ile kontak şartına geçmiş bölge görülmektedir.



Şekil 9.20: Yer değiştirme alanının gösterimi, maksimum yer değiştirme 0.002 mm.



Şekil 9.21: Yer değiştirme alanının yükleme (2µm) ve boşaltma (1.77µm) sonu gösterimleri.


Şekil 9.22: Deformasyon alanı ve deformasyon miktarlarının yükleme sonunda tüm iz üzerinde gösterimi.



Şekil 9.23: İzin ortasından alınan dikey kesit deformasyon alanı görüntüsü.



Şekil 9.24: Gerilme alanlarının gösterimi.



Şekil 9.25: Kontak halindeki bölge (kırmızı) ile kontak dışındaki bölgenin (mavi)gösterimi.

Şekil 9.24 teki gerilme alanları program verisinde elde edilişleri açısından kusurludur. Deformasyon ve yer değiştirme alanları büyük deformasyonlar teorisine göre elde edilebilirken, gerilme alanı için bu gerçekleştirilememiştir. Normalize edilmemiş durumda gerilmeler çok yüksek çıkmaktadır. Normalizasyon sadece gerilme alanı dağılımı ve ortalama gerilme miktarı hakkında fikir vermektedir. Kontak yöntemi, kullanılan sonlu elemanlar ağının kalitesi itibari ile elde edilen sonuçlar başarılıdır. Ancak daha sık ve rafine bir mesh ağı kullanılmalı, geometrik olarak mükemmel batıcı ucun zımba etkisinin en aza indirgenmesi için daha geniş zaman bölümlemesi seçilmelidir.

En son aşamada Şekil 5.4 te gösterilen numune kullanılmıştır. Bu meshin özelliği önceki simülasyonlarda kullanılan numunedekinden 4 kat daha sık bir sonlu elemanlar ağına sahip olmasıdır. 3350 düğüm noktası sayısı 11.630 a çıkarılmıştır. Amaç daha hassas sonuçlar elde etmektir. Yeni yapılan simülasyonlarda, önceden belirlenen E=190GPa, Et=27.5 - 30GPa, Sy=180-200MPa parametrelerinde ufak değişiklikler yapılması gerektiği görülmüştür. E için 185-190 GPa aralığı uygun görülmüştür. Et için 28-30 GPa aralığı, Sy içinse 200-250 MPa aralığı uygun görülmüştür.

Şekil 9.26 da gösterildiği şekliyle Et > 32000MPa olduğu durumlarda deneysel eğri aşılmaktadır. Sy < 200MPa olan durum içinse deneysel eğrinin altına düşülmektedir. Bu durumda ideal parametreler E=188-190GPa, Et=27.5 - 32GPa, Sy=200-275MPa olarak belirlenmiştir.



Şekil 9.26: 2µm batma derinliğinde sık mesh içeren numunede optimizasyon.

9.2.2.2 Uç eğriliği verilerek yapılan simülasyonlar

Mükemmel keskin batıcı uç üretilememektedir. Teknolojik ve geometrik kısıtlardan dolayı üretilen uçların hepsi tepe eğriliği içermektedir. Bu eğrilik miktarının 100nm civarı olduğu bilinmektedir.

Bu uç eğriliğini temsil etmesi açısından 2 farklı tipte batıcı uç oluşturulmuştur. İlk aşamada 100nm lik kısımda mükemmel ucun tepe noktası kesilerek küt (offset) batıcı uç oluşturulmuştur. Daha sonraki aşamada uç noktadaki üçgen düzlem üstüne mesh birleştirme operasyonu ile eğrisel uç yapıştırılmıştır.

Küt uç ile yapılan simülasyonlarda, uç eğriliğinden dolayı parametrelerde değişim gözlenmiştir. Ancak KY eğrisi dalgalı şekilde oluşum göstermiştir (Şekil 9.27) Dalgalanmaların olması sebebiyle bu aşamada optimizasyonu yapılmamıştır.

Eğrisel tepeli uç ile yapılan simülasyonlar ise boşalma kademesinin temsilini gerçekleştirememiştir. Matematiksel yakınsama kriterine uygun olmayan sonuçlar verdiği için parametre optimizasyonu yapılamamıştır.



Şekil 9.27: Uç eğriliği ile yapılan simülasyonlar a) küt uç b) eğrisel uç.

9.2.3 Multilineer Von Mises izotropik plastisitesi

316L numune üzerinde yapılan çekme testi sonucunda aynı malzeme için mevcut akma noktası, çekme noktası verileri göz önüne alınarak plastisite davranışını belirleyen pekleşme fonksiyonu multilineer modelde belirtildiği şekilde tanımlanarak simülasyonlar yapılmıştır. Şekil 9.28 de görüldüğü üzere bu model ile yapılan simülasyonlar da çeşitli parametre varyasyonları denenmesine rağmen başarılı sonuç elde edilememiştir.



Şekil 9.28: Multilineer davranış modeli ile elde edilen eğriler ve karşılaştırılmaları.

Multilineer model kullanılarak başarılı simülasyonlar gerçekleştirilememiş olunmasından dolayı bu model üzerinde daha fazla çalışma yapılmamıştır.

9.2.4 Üstel ilişkili Von Mises izotropik plastisitesi

Şekil 9.29-9.33 de uygun parametrelerin belirlenmesi için yapılan simülasyonlar ve deneysel eğriler ile karşılaştırmaların sonuçları verilmiştir.

İlk yapılan simülasyonda ki parametrelerimizde a ve n değerleri çok düşük verilmiştir. Üstel plastisite deki pekleşme fonksiyonu denklem (7.18) de verilmiştir. Buna göre model, elastisiteyi bilineer modeldeki gibi yönetirken, a ve n değerleri ile plastik deformasyon oluşumunu ve plastik davranış sırasındaki pekleşmeyi yönetmektedir. Şekil 9.29 da bu değerlerin ilk olarak seçildiği simülasyonda malzeme plastisiteye tam olarak geçmemiş ve neredeyse tam elastik davranış sergilemiştir.

Şekil 9.30 daki simülasyonda a ve n değerleri arttırılarak eğriler üzerinden sonuçlar karşılaştırılmıştır. "a" ve "n" değerlerinin yükseltilmesi ile malzeme modeli plastisiteye geçmiş ve deney sonuçlarına yaklaştığı görülmüştür. Bu sonuçlar göz önünde bulundurularak sonrasında yapılan simülasyonlarda a ve n parametreleri daha hassas olarak değiştirilmişlerdir.



Şekil 9.29: K-Y eğrisinde a=1, n=0.06, Sy175MPa parametrelerinin simülasyonunun deney sonucu ile karşılaştırılması.



Şekil 9.30: K-Y eğrisinde a=20, n=0.5, Sy175MPa parametrelerinin simülasyonunun deney sonucu ile karşılaştırılması.

Bir sonraki aşamada, Şekil 9.31 de gösterilen simülasyon grafiğinde a =20 olarak alınırken n değeri 0.5 ten 0.64 e çıkarılmıştır. Sy değeri de 175MPa dan 200MPa ya arttırılmıştır. Bunun sonucunda malzeme daha fazla plastik deformasyon göstermiş buna karşın eğri deneysel eğrinin altına düşmüştür.. Dikkat çeken husus 'n' deki artışın simülasyon eğrilerinde görülen plastisite bölgesini genişletmiş olmasıdır. Bu yüzden n değeri 0.60-0.65 aralığında sabitlenmiştir.

Şekil 9.32 deki simülasyon sonuçlarından yola çıkılarak a değeri değiştirilmiş "n" ve "Sy" sabit tutulmuştur. Şekil 9.32 den görüleceği üzere a=17.5 değeri için elde edilen simülasyon eğrisi boşaltma kademesinde deney sonucu elde edilen eğimi tutturmaktadır. Ancak maksimum kuvvet ve yükleme sırasında oluşan deneysel eğriye göre simülasyonun yükleme kademesi eğrisi düşük kalmaktadır







Şekil 9.32: K-Y eğrisinde a=17.5, n=0.64, Sy200MPa parametrelerinin deney sonucu ile simülasyonunun karşılaştırılması.

Şekil 9.33 de görülen son simülasyonda ise a=18 n=0.62 Sy=200 olarak alınmıştır. Maksimum uygulanan kuvvet değerleri aynıdır. Yükleme bölgesindeki eğrilerde büyük ölçüde birbirine yakındır. Boşaltma bölgesinde ki deneysel ve simülasyon eğrilerinin eğimleri (=1.08) kullanılan parametreler itibari ile eşitlenmiştir.

Sonuçlar itibari ile üssel plastisite modeli deneyi temsil etmekte başarılı olmuştur. Daha ileri analizler yapılmak için ve parametre optimizasyonu düşünülerek önerilen parametreler bu model için şu birleşimdedir: "a=18, n=0.64, Sy 200" en ideal parametre üçlüsü olarak görülmektedir.



Şekil 9.33: K-Y eğrisinde a=18, n=0.62, Sy200MPa parametrelerinin deney sonucu ile simülasyonunun karşılaştırılması.

Sonuçlar itibari ile üssel plastisite modeli deneyi temsil etmekte başarılı olmuştur. Daha ileri analizler yapılmak için ve parametre optimizasyonu düşünülerek önerilen parametreler bu model için şu birleşimdedir: "a=18, n=0.64, Sy 200" en ideal parametre üçlüsü olarak görülmektedir.

Ancak, 2. ve 3. Bölümlerde verilen denklem (2.5) ve Çizelge (3.1) ile C ve n hesaplamaları yapılınca 316L için "n" değerinin 0.302 olduğu bulunmuştur. Bu değer alınarak a-Sy optimizasyonu ile yapılan simülasyonlar istenen sonuçları vermemiştir. Tüm denemelerde K-Y eğrilerinde ki plastik bölge genişliği ve eğim yetersiz kalmıştır. Bu bilgiler ışığında üstel ilişkili plastisite kanunun verdiği sonuçlar hakkında şüpheler oluşmuş ve üstel plastisitenin nanoindentasyon için uygun bir davranış temsili kanunu olmadığına karar verilmiştir. İdeal parametre üçlüsü analitik sonuçlara rağmen kullanılmaya devam edilebilir, çünkü deneyle örtüşmektedir. Ancak bilineer plastisite daha güçlü bir alternatif oluşturmaktadır.

9.3 Tek-kristal Viskolplastisitesi Simülasyonları

Bölüm 7.7 de bahsedilen monokristal viskoplastistesi davranış kanunu kullanılarak simülasyonlar yapılmıştır. İndentasyondaki boyut etkisini gözlemlemenin yanı sıra

tanelerin yönlenmesine bağlı olarak malzeme davranışının farklılaşması da gözlemlenebilmektedir.

İlk aşamada Şekil 9.33 de sonuçları verilen davranış kanunu testi yapılmıştır. Tek bir elemandan oluşan birim küp şeklinde ki numuneye çekme yönünde birim deformasyon uygulanmış ve bir malzemede özellikle de kübik yüzey merkezli (KYM) çelik malzemelerdeki önemli yönlenmeler seçilerek modelin çalışıp çalışmadığı incelenmiştir.

[111] [110] ve [000] yönlenmeleri seçilerek küp numune bu düzlemler üzerine çekme yapılacak şekilde sanal olarak döndürülmüştür. Şekil 9.34 teki grafikte bu 3 yönlenme ile yapılan test sonucunda [111] yönlenmesine sahip düzlem üzerinden uygulanan çekme kuvvetinin en fazla gerilme miktarı oluşumuna neden olduğu görülmektedir. [110] ve [000] düzlemleri üzerinden yapılan çekme simülasyonlarında ise daha yumuşak bir davranış görülmüştür. Sonuç itibari ile model düzgün çalışmaktadır.





Çekme simülasyonları yapıldıktan sonra ki aşamada kontak mekaniğinde de davranış değişimini gözlemlemek için 3 farklı yönlenme verilerek indentasyon simülasyonları yapılmıştır. 316L numune için simülasyon parametreleri Çizelge 8.2 den alınmıştır. Şekil 9.35 de bu simülasyonların sonuç eğrileri çakıştırılmıştır. Karmaşık sonlu elemanlar ağının ve kontak mekaniğinin etkisi ile simülasyonun yükleme ve boşaltma kademeleri görüldüğü üzere eğriler tamamlanamamıştır. Ayrıca ağ ve geometrik olarak numunedeki değişimden ötürü simülasyonun ileri aşamasında [111] ve [110] yönlenmeleri eğrilerinde hesaplama zorluğuna bağlı dalgalanmalar ve

deneysel yükleme eğrisinin düzenli eğrisel artışından keskin sapmalar görülmüştür. Temel olarak yönlenme farklarının davranışı değiştirmesi gözlemlenmiş ise de istenen sonuç elde edilememiştir.



Şekil 9.35: İndentasyon durumunda yönlenmeye bağlı modelin test edilmesi.

Şekil 9.36 te 2 farklı yönlenme ile yapılan indentasyon simülasyonunun deneysel eğri ile karşılaştırılması verilmiştir. Simülasyon eğrilerindeki keskin değişimler ve tutarsızlık şu aşamada bu modelin nanoindentasyon deneyi için bulunduğumuz aşamada başarılı temsil veremeyen bir davranış modeli olduğu sonucuna ulaşılmış ve daha detaylı inceleme yapılmasına karar verilmiştir.



Şekil 9.36: Mono kristalde 2 farklı yönlenme ile yapılan indentasyon deney sonucu ile simülasyonunun karşılaştırması.

9.4 Kocks-Rauch Dislokasyon Dinamiği Simülasyonları

İlk yapılan simülasyonlar sonucu modelin komut dosyası sonuca ulaşan simülasyonlar yaptırmaktadır. Ancak istenilen ve deneysel verilerle karşılaştırılabilecek düzeyde simülasyonlar gerçekleştirilememiştir. Numunenin yönlenme farklılığına göre ve her kayma sisteminde bulunan farklı yoğunluktaki dislokasyon miktarına bağımlı olan bu modelde yoğunluklar ve malzeme yönlenmeleri değiştirilmiş ise de sonuç eğrileri birbirinin aynısıdır.

9.5 Davranış Kanunları Genel Bulgular

Kullanılan nümerik davranış kanunlarının hepsi çalışmıştır. Ancak en başarılı sonuçları bilineer ve üstel ilişkili izotropik Von Mises plastisite kanunları vermiştir. Tek kristal, çok kristal ve dislokasyon dinamiği kanunları ile yapılan 3 boyutlu simülasyonlar sadece yükleme kademesinde çalışmış, boşaltma uygulanamamıştır. Dolayısıyla nanoindentasyon için bu çalışma çerçevesinde uygun görülmemişlerdir.

Bilineer ve üstel ilişkili plastisite kanunlarını inceleyecek olursak, bilineer plastisite kanunu üstel plastisite ye göre daha kullanışlıdır. Parametre optimizasyonu ile gerçek durum-simülasyon eşleştirmesi daha kolaydır. Elastisite ve plastisite için 2 farklı modül girilmesi ve akma noktası belirlenmesi kullanım açısından daha anlaşılırdır. Üstel plastisite deki a ve n katsayılarının belirlenmesi ve değişimlerinin etkilerinin incelenmesi daha karmaşıktır.

Tam başarılı olan izotropik davranışlar, nanoindentasyonda 1500nm altı batma derinliklerinde gözlenen boyut etkisini ve sertlikteki artışı temsil edememektedir. 500nm-1500nm arası derinlikler için uygun olan tek kristal ve çok kristal davranış kanunlarıdır. 500nm altı için, Bölüm 7 de teorisi aktarılan ve Bölüm 10 da analitik incelemesi yapılarak özellikle 300nm altında etkin olduğu görülmüş olan nümerik dislokasyon dinamiği modeli kullanılmalıdır. Yaptığımız bu çalışmada boyut etkisi için kullanılan kristal viskoplastisite kanunları ve dislokasyon dinamiği temelli davranış kanunlarından istediğimiz sonuç alınamamıştır.

İzotropik davranış kanunları indentasyonda karşılaşılan çökme ve batma gibi olayları temsil etmekte başarılı olmuşturlar. Ama izotropik temsil karakterinde oldukları için, gerçek bir malzemeden alınan izin anizotropik olma olasılığını ve anizotropik olması durumunda oluşacak yüzey topografisini oluşturamazlar.

10. DENEYSEL VERİLERİN ANALİZİ

10.1 Nitrürsüz 316L 2µm Batma Derinliği Deneyi

10.1.1 Eğri uydurma ve klasik özellik inceleme

Deney sonucu elde edilen karakteristik kuvvet-yer değiştirme eğrisi (K-Y) Bölüm 3 te anlatılan şekilde işlenerek çeşitli özelliklerin belirlenmesi gerçekleştirilmiştir.

İlk olarak, Şekil 10.1 de görüldüğü üzere deney eğrisini yükleme ve boşaltma kademelerine sırasıyla eğri uydurularak matematiksel ifadeleri elde edilmiştir. Yükleme eğrisini tanımlayan P=Ch² denklemindeki C sabiti uydurulan eğri denklemine göre hesaplanmış ve Çizelge 3.1d deki denklemden karakteristik %29 luk deformasyona karşı gelen σ_u bulunmuştur.



Şekil 10.1: Yükleme ve Boşaltma Kademelerine Eğri Uydurma.

Yükleme kademesinde uydurulan eğride x yerine h kullanılır [21]. Böylece x^2 li terimin katsayısı C olarak alınabilmektedir. C deney verilerine göre mN/nm birimindedir. Çizelge 3.1d denkleminde kullanılan parametrelerin birimleri N/mm² dir. Gerekli birim dönüşümü yapılıp C ve σ_u hesaplanmıştır. Denklem (10.1) ile verilen deformasyon sertleşmesi üssü hesabı da elde edilen verilerle mümkündür.

Denklem (10.1) de n deformasyon sertleşmesi üssü σ_u - ε_u karakteristik plastik şekil değişiminin olduğu %29 luk deformasyona karşı gelen gerilme ve gerinme değerleridir. $\sigma_y - \varepsilon_y$ ise akma noktasında gerçekleşen gerilme-gerinme ikilisidir.

Ayrıca boşaltma eğrisinin eğimi, S, kontak direngenliği de uydurulan eğri ile deneysel değerle aynı bulunmuştur. Bu denklemler kullanılarak hesaplanan değerler Çizelge 10.1 de verilmektedir.

$$n = \frac{ln\left(\frac{\sigma_u}{\sigma_y}\right)}{ln\left(\frac{\varepsilon_u}{\varepsilon_y}\right)}$$
(10.1)

Parametreler	Katsayı
C eğri sabiti	50000 N/mm
σ_{u}	271,71 MPa
n def.sert.üssü	0.30240
S	1.093 (deney 1.096)
h_p (denk.3.4)	1788.65 nm
Wplastik	172488 mN.nm ²
Welastik	13695 mN.nm ²

Çizelge 10.1: 2µm batma derinliği deney eğrisinden elde edilen özellikler.

Yükleme eğrisi ile boşalma eğrisine uygulanan denklemlerin integrali alınarak indentasyon için harcanan toplam enerji ile elastik ve plastik enerji değerleri bulunmuştur. Denklem (10.2) ve Denklem (10.3) den yararlanılarak indentasyon deneyinde kalıcı deformasyonu yaratmak için harcanan enerji aşağıdaki denklem ile hesaplanmıştır.

İdeal Plastik Hacim V_p =
$$24.5 \frac{h_p^3}{3}$$
 (10.3)

$$Hv = \frac{172488 \times 3}{24.5 \times (1789)^3} = 3.69 \times 10^{-3} \text{ Joule/}\mu\text{m}$$

10.1.2 Sonuçlardaki sapmalar

Gerek deneysel verilerde gerekse bölüm 3 te aktarılan analitik veri işleme yöntemleri ve simülasyonlar yardımı ile yapılan optimizasyonlar sonucunda elde edilen verilerde sapmalara ve tutarsızlıklara rastlanmıştır.

Bunlardan ilki deney sonucu elde edilen indentasyon modülü adıyla verilen malzeme Young modülü ile simülasyonlar sonucu elde edilen optimize edilmiş Young modülü değeri arasında bulunan farktır. Deney sonucu 105 GPa olarak verilen Young modülü, hem literatürde ki değeri olan 193 GPa dan hemde simülasyonlar sonucu onaylanan 190-192 GPa değerlerlerinden çok düşüktür. Bunun sebebi, Denklem (2.1) kullanılarak S eğiminden hareketle İndirgenmiş Modülün bulunması, bu modülün Denklem (2.2) de yerine konarak malzeme Young modülünün hesaplanması adımları sırasında, deney sonucu verilmiş plastik alan (Ac) değerinin çok yüksek olmasıdır (yaklaşık 83-84 milyon nm²). Alanın olduğundan yüksek olarak hesaplanması bu sapmaya neden olmakta ve Denklem (2.1) den başlayarak Denklem (2.2) de dâhil olmak üzere zincirleme hataya sebep olmaktadır. Yine yapılan hesaplamalardan görüldüğü üzere, malzeme Young modülünün doğru cıkması icin gerekli plastik alanın çok daha küçük olması gerekmektedir (yaklaşık 30-32 Milyon nm²). Bu yüzden, Oliver- Pharr (OP) metodu ile yapılan derinlik hassasiyetli indentasyon testlerinde hesaplanan alanın hatalı olabileceği sonucuna varılmıştır. 5 µm ve 10 µm batma derinlikli deneylerden elde edilen verilerde ki plastik alan değerlerinin çok büyük olması ancak alan değerine karşı gelen indentasyon modüllerinin 2 µm deneyine oranla daha tutarsız ve mantıksız sonuç vermesi, deney ile elde edilen indentasyon modülü değerlerinin güvenilirliğini sorgulanır duruma getirmiştir.

Deney düzeneği, örnek bloklarla sertlik bakımından kalibre edildiği için sertlik değerlerinde bir anormallik olmadığı ancak izin boyutlarının küçük olması, taşma ve kabarma durumlarının orijinal OP metodunda bulunmaması nedeniyle alan ve buna müteakip indentasyon modülü hesaplamalarının hatalı olduğu görülmüştür. Bu yüzden, deney verileri içinde itibar edilebilecek 2 önemli veri vardır. Biri deney yük-yer değiştirme eğrisi, diğeri sertlik değeridir. Alan ve Young modülünde ki sapmalar Çizelge 10.2 de verilmiştir.

Parametreler	Veriler	
2µm deney alanı (h _c)	83,377,304 nm ²	
2µm deney modülü	105,33 GPa	
2μm simülasyon modülü	190,632 GPa	
2µm modül için gerekli alan	31,000,000 nm ²	

Çizelge 10.2: Alan ve Young modülünde oluşan sapmalar.

Sonuçlardan da görüldüğü üzere deney de hesaplanan iz alanı, olması gerekenin 2.5 katı daha fazladır. Bu da OP metoduna alternatif alan inceleme ve hesaplama yöntemlerinin araştırılmasına duyulan ihtiyacı göstermektedir.

10.1.3 Dislokasyon yoğunluğu hesabı ve dislokasyon bağımlı eğriler

Analitik dislokasyon dinamiği modelleri kullanılarak Statik Barındırılan (SSD) ve Geometrik Gerekli (GND) dislokasyon yoğunlukları hesaplanmıştır. Nix-Gao ve GND nin etkin olduğu indentasyon derinlikleri Şekil 10.2 de gösterilmektedir. SSD yoğunluğu ise malzemeye bağlı olarak belirli bir gerinme değerine karşılık hesaplanan sabit değerdir. SSD yoğunluğu ilk durumu ifade ettiği için deney sırasında değişmez. GND/SSD oranı bu yüzden her malzemede farklı sertlik artışı ve boyut etkisi yaratır. Şekil 10.3 te farklı SSD yoğunlukları için malzemenin gösterdiği deneysel davranıştaki farklılaşma gösterilmiştir. Ayrıca malzemelerin gösterdiği mukavemet sadece dislokasyon dinamiğine bağlı kalsaydı elde edilecek indentasyon davranışı ile deneysel indentasyon davranışının kuvvet eğrilerinin karşılaştırılması Şekil 10.4 te verilmiştir.

Şekil 10.2 de teorik derinliğe bağlı yoğunluk değişimi incelendiğinde 200nm nin üzerinde GND yoğunluğunun azaldığı, deformasyon mekanizmasına etkisinin kalmadığı görülmektedir.



Şekil 10.2: NG ve GND yoğunluklarının derinliğe bağlı olarak değişimi.



Şekil 10.3: Farklı SSD yoğunluklarının K-Y eğrisine yani mukavemete etkisi.

Şekil 10.3 te ise malzemede bulunan başlangıç dislokasyon yoğunluğu ne kadar fazla ise teorik indentasyon kuvvet eğrisi yukarı ötelenmekte, mukavemeti arttırmakta ve GND ye karşı derinlik arttıkça daha baskın hale gelmektedir. Bu sonuçlar itibari ile batma derinliğinin azalmasıyla sertlikteki artış olarak ortaya çıkan indentasyonda boyut etkisinde temel etken mekanizma GND yoğunluğudur.

Eğer dislokasyon etkisi makro boyutta etkili olsaydı. boyut etkisi gözlemlenen sertlikte ve kuvvet değerlerinde artış Şekil 10.4 teki gibi makro düzeyde de gözlemlenirdi. Von Mises eğrisi olarak belirtilen kırmızı eğri hem boyut etkisini gösteren teorik yüksek kuvvet eğrisidir hem de dislokasyon yoğunluğunun baskın mekanizma olması durumunda kuvvet eğrisinin nasıl ilerleyeceğini gösteren eğridir. Boyut etkisinin tanımı gereği, makro düzey kabul edilen 2µm batma derinlikli bir deneyin karakteristik KY eğrisi bu teorik dislokasyon eğrisinden daha düşük düzeyde çıkmak zorundadır.



Sekil 10.4: Deney eğrisi ile teorik dislokasyon yoğunluğu eğrisinin gösterilmesi.

Malzemenin, dislokasyon dinamiği etkisini yitirmesi ile 250-300 nm ile 1500 nm arası deney batma derinliklerinde önceki bölümlerde bahsedilen "Deformasyon Gradyenti" mekanizmasına göre davranacağı sonrasında ise homojen malzeme doğasına uygun olarak izotropik VonMises plastisitesi modeline uygun davranış göstereceği sonucuna ulaşılmıştır.

10.1.4 Elde edilen genel bulgular ve öneriler

OP metodu, plastik alanı gereğinden çok fazla bulmakta ve Young modülü düşük çıkmaktadır. (E_{ydeney} = 105GPa Eysimülasyon =188-192GPa) Bu tutarsızlığı düzeltmek ve doğru Young modülünü belirlemek için sonlu elemanlar analizi ile parametre optimizasyonu yapmak başarılı ve doğru bir tercihtir. Deney sonuçları ile örtüşen simülasyon parametreleri elde edildiğinde doğru Young modülü değerine ulaşıldığı görülmüştür. Plastik alan hesaplama kademesinde kullanılan OP metoduna alternatif olabilecek, doğru belirleme yapacak bir alan ölçüm metodu kullanılması önerilmektedir.

11. GENEL SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Çalışmada kontak mekaniği, nanoindentasyon da geçerli malzeme davranış kanunları ve derinlik hassasiyetli sertlik deneylerinde analitik veri işlemesi yöntemleri incelenmiş ve deneysel çalışmalar üzerinde uygulaması yapılmıştır. Deneysel K-Y eğrilerinden yola çıkılarak, sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak farklı davranış kanunları ile simülasyonlar yapılmış, 316L örnek malzemesi için plastisite parametreleri belirlenmiştir.

Yapılan deney ve simülasyonlar sonucunda elde edilen bulgular ve öneriler aşağıda belirtilmiştir.

- Yapılan çalışma sonucu kolayca gerçekleştirilebilen, numune hazırlama ve derinlik hassasiyetli indentasyon deneyi sonuçlarına bilgisayar ortamında sonlu elemanlar yöntemi ile elasto-plastik ve elasto-visko-plastik davranış kanunları kullanılarak uygun plastisite parametreleri belirlenmiştir. İncelediğimiz sistem temel bir deney temsilidir. Parametrelerin belirlenmesindeki ilk amaç deneysel sistemdeki kusurları incelemektir.
- Nanoindentasyon da, deney ve simülasyon karşılaştırmaları için sonlu elemanlar yönteminin kullanılması başarılı olmuştur.

Numerik olarak elde edilen bulgular aşağıda verilmiştir.

- 2boyutlu eksen simetrik model ile yapılan simülasyonlar programın çalışabilirliğini sınamaktan öteye gidememiştir. Uygun parametrelerin elde edilmesi gerçekleştirilememiştir. 3boyutlu model ile yapılan simülasyonlar ise başarılı olmuş ve gerçekçi sonuçlar vermiştir.
- Sonuç olarak, işlemsiz 316L numune üzerinde, 3 boyutlu ideal Berkovich uç ile bilineer izotropik plastisite kanunu kullanılarak yapılan simülasyonlarda en uygun parametrelerin E=188 – 190 GPa, Et=28 – 30 GPa, Sy=200-275 MPa olarak alınmasına karar verilmiştir. Üstel ilişkili plastisite modeli için ise en uygun parametre bileşimi "a=18 n=0.64 Sy 200-250 MPa" üçlüsü olarak bulunmuştur.

- Simülasyonlar ile uygulamada önem teşkil eden Young modülü, akma gerilmesi ve S kontak direngenliği/eğimi başarı ile belirlenmektedir.
- Simülasyonlar sonucu elde edilen yer değiştirme ve deformasyon alanlarının kartografisi gerçekçi sonuçlar vermiştir.

Analitik olarak elde edilen bulgular aşağıda verilmiştir.

 Derinlik hassasiyetli sertlik deneyleri uygulanması nispeten kolay deneylerdir. Herhangi bir mühendislik malzemesi, sertlik deneyine tabi tutularak karakteristik KY eğrisinin elde edilerek pek çok malzeme özelliği ve parametresi elde edilmektedir.(C, S, n, ε_u, h batma derinliği değerleri, W: iş) Analitik yöntemler ile 316L işlemsiz numune için 2µm batma derinliği deneyinde C =50000 N/mm, %29 karakteristik deformasyona karşı gelen gerilme değeri 271.7 MPa, n deformasyon sertleşmesi üssü 0.302, plastik batma derinliği h_p=1788.65 nm ve plastik iş 172488 mN.nm² olarak elde edilmiştir.

Özetle,

- Yaptığımız bu deneysel veriler ile optimizasyon ve tersinir parametre belirleme çalışması daha ileri seviye olan ve daha fazla zaman isteyen simülasyon çalışmalarına temel teşkil etmektedir.
- Ayrıca belirli malzeme için optimum parametreleri deneysel verilerle etkileşim halinde belirleyerek simülasyon programının da seçtiğimiz birimlere, mesh ağına ve parametre değerlerine duyarlılığı kalibre edilmektedir.
- 3. Geleceğe dönük öneriler,

Code-Aster bünyesinde çeşitli davranış tipleri vardır. Örnek olarak sıcaklık ile faz dönüşümü etkisini içeren elasto-plastik davranış kanunu kullanılarak sırasıyla karmaşık fazlı bir malzemenin ısıl işlem, kaynak ve şekillendirme sırasında oransal olarak beynit, martensit, östenit, perlit miktarlarının değişiminin simülasyonu yapılabilir. Optimize edilmiş elasto-plastik davranış parametreleri kullanılarak sıcaklık ve deformasyon sonucunda faz dağılımı simüle edilebilir. Yine program bünyesinde bulunan davranış modeli ile parçanın servis şartlarında sıcaklık ve yükleme etkisi altında iken elasto-plastik davranışı mevcut çalışmamızda optimize ettiğimiz parametreler temel alınarak termomekanik olarak incelenebilir. Korozif ortama hassasiyet içeren davranış kanunu, elasto-plastik davranış kanunu birlikte ele alınarak emniyetli çalışma ömrü ve emniyetli gerilme limitleri incelemesi yapılabilir.

KAYNAKLAR

- [1] Kayah, E.S., Cimenoğlu, H., Eruslu, N., Ürgen, M., ve Taptık, Y., 1997. Hasar Analizi Seminer Notları, 7.Bölüm, Sertlik Deneyi, TMMOB yayınları, İstanbul, Turkiye.
- [2] **url-1** <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Vickers-path-2.svg> 22.08.2010 tarihinde alınmıştır.
- [3] **Muller, A.L.,** 2008. Identification Inverse du Comportement des Matériaux, Rapport de Stage, EDF R&D Rénardières, France
- [4] **Fischer-Cripps, A.C.,** 2002. Nanoindentation, Mechanical Engineering Series, Springer, NewYork.
- [5] Page, J., 2009. Identification Inverse du Comportement des Matériaux : Modélisation de l'Essai de Nanoindentation, Rapport de Stage, EDF R&D. Rénardières, France.
- [6] David, F., and Bahr, D.J., 2008. Nanoindentation : Localized Probes of Mechanical Behaviours of Materials, Ed. W. Sharpe Jr., Handbook of Experimental Solid Mechanics, 389-408, Springer, NewYork.
- [7] **url-2** <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Nanoindent.JPG> 22.08.2010 tarihinde alınmıştır.
- [8] Meyers, M.A., and Chawla, K.K., 2009. Mechanical Behavior of Materials, pp.214-226, Cambridge University Press, Cambridge.
- [9] Martinez, E., Romero, J., Lousa, A., and Esteve, J., 2003. Nanoindentation Stress-Strain Curves as a Method for Thin-Film Complete Mechanical Characterization: Application to Nanometric CrN/Cr Multilayer Coatings, *Applied Physics*, A 77, 419-426.
- [10] Casals, O., 2008. Micromechanical Analysis of Indentation Experiments in Metallic Single Crystals and Isotropic Polycrystals, Department of Materials Science and Metallurgical Engineering, PhD Thesis, Universitat Politecnica de Catalunya, Barcelona, Spain.
- [11] **Fischer-Cripps, A.C.,** 2000. Introduction to Contact Mechanics, Mechanical Engineering Series, Springer, NewYork.
- [12] Oliver, W., and Pharr, G., 2004. Measurement of Hardness and Elastic Modulus by Instrumented Indentation: Advances in Understanding and Refinements to Methodology, *Journal of Materials Research*, 19 (1), 3-20.
- [13] Tabor, D., 1970. The Hardness of Solids, *Review of Physics in Technology*, V.1, no.3, 175.

- [14] Blau P.J., and Lawn B.R., 1985. Microindentation Techniques in Materials Science and Engineering, ASTM Special Technical Publication, Philadelphia.
- [15] Zeng K., Söderlund E., Giannakopoulos A.E., and Rowcliffe D.J., 1996. Controlled Indentation: A General Approach to Determine Mechanical Properties of Brittle Materials, Acta Materialia, 44, 3, 1127-1141.
- [16] Tabor D., 1951. The Hardness of Metals, Oxford University Press, Oxford
- [17] Brotzen F.R., 1994. Mechanical Testing of Thin Films, *International Materials Reviews*, **39**, **1**, 24-45.
- [18] Durst K., Backes B., Goken M., 2005. Indentation Size Effect in Metallic Materials: Correcting for the Size of the Plastic Zone, *Acta Materialia* 52, 1093–1097.
- [19] **url-3** <<u>http://www.nanoindentation.cornell.edu/Phenomena/geometry_pheno</u> mena .htm#ise_phenomena> 22.08.2010 tarihinde alınmıştır.
- [20] Liu, Y., Ngan, A.H.W., 2001. Depth Dependance of Hardness In Copper Single Crystals Measured By Nanoindentation, *Scripta Materialia*, 44, 237-241
- [21] Atar, E., 2004. ZrN Kaplamalara Değişik Oranlarda Hf Elementi İlavesi ile üretilen Yeni (Zr,Hf)N Kaplamaların Mekanik ve Aşınma Özelliklerinin İncelenmesi, ITU, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora Tezi, Istanbul
- [22] Tho, K.K., Swaddiwudhipong, S., Hua, J., and Liu, Z.S., 2006. Numerical Simulation of Indentation With Size Effect, *Material Science and Engineering*, A 421, 268-275
- [23] Zong, Z., Lou, J., Adewoye, O.O., Elmustafa, A.A., Hammad, F., and Soboyejo, W.O., 2006. Indentation Size Effects in The Nano- and Micro-Hardness of FCC Single Crystal Metals, *Materials Science and Engineering*, A 434, 178-187.
- [24] Sproul, W.D., 1994. Multilayer, Multicomponent and Multiphase Physical Vapor Deposition Coatings For Enhanced Performance, *Journal of* Vacuum Science and Technology, A12(4),1595-1601.
- [25] Chen, W., Li M., Zhang, T., Cheng, Y.-T., and Cheng, C.-M., 2007. Influence of Indenter Tip Roundness on Hardness Behavior in Nanoindentation, *Materials Science and Engineering*, A 445-446, 323-327.
- [26] Giannakopoulos, A.E., Larsson, P-L, and Vestergaard, R., 1994. Analysis of Vickers Indentation, *International Journal of Solids and Structures*, 31, 19, 2679-2708.
- [27] Giannakopoulos, A.E., and Suresh, S., 1999. Determination of Elastoplastic Properties by Instrumented Indentation, *Scripta Materialia*, 40, 10, 1191-1198.

- [28] Doerner, M.F., Nix, W.D., 1986. A Method for Interpreting the Data From Depth-Sensing Indentation Instruments, *Journal of Materials Research*, 1(4), 601-609.
- [29] Oliver, W.C., and Pharr, G.M., 2004. Measurement of Hardness and Elastic Modulus by Instrumented Indentation: Advances in Understanding and Refinements to Methodology, *Journal of Materials Research*, 19, no.1, 3-20
- [30] Poon, B., Rittel, D., and Ravichandran, G., 2008. An Analysis of Nanoindentation in Elasto-Plastic Solids, *International Journal of Solids and Structures*, 45, 6399-6415.
- [31] Tuck, J.R., Korsunsky, A.M., Bull, S.J., and Davidson, R.I., 2001. On the Application of the Work of Indentation Approach to Depth Sensing Indentation Experiments in Coated Systems, *Surface Coatings Technology*, 137, 217-224.
- [32] Tuck, J.R., Korsunsky, A.M., Bhat, D.G., and Bull, S.J., 2001. Indentation Hardness Evaluation of Cathodic Arc Deposited Thin Hard Coatings, *Surface and Coatings Technology*, 139, 63-74.
- [33] **Zhou, L., and Yao, Y.,** 2007. Single Crystal Bulk Material Micro/Nano Indentation Hardness Testing by Nanoindentation Instrument and AFM, *Materials Science and Engineering: A*, **460-461**, 95-100
- [34] Yang, B., and Vehoff, H., 2007. Dependence of Nanohardness upon indetation size and grain size- A local examination of the interaction between dislocations and grain boundaries, *Acta Materialia*, 55, 3, 849-856.
- [35] Salome-Meca Programi Dökümantasyon Dosyaları, Mesh-Geometry Help/ Pyton Command, SalomeMeca Software Help Menu.
- [36] Moaveni, S., 1999. Finite Elements Analysis Theory and Application With ANSYS, Princeton-Hall, NewJersey.
- [37] Desroches, X., 2010. Fonctions de Forme et Points d'Intégration des Eléments Finis, <http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r3/r3.01.01. pdf> 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [38] Johnson, K., 1985. Contact Mechanics, Cambridge University Press, NewYork.
- [39] Asaro, R.J., and Lubarda, V.A., 2006. Mechanics Of Solids and Materials, Cambridge University Press, New York.
- [40] **De Soza, T.,** 2010. Opérateur DEFI_CONTACT, http://www.code-aster.org /V2/doc/default//man_u/u4/u4.44.11.pdf> 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [41] Lamarche, S., 2003. Modélisation du contact, <http://www.code-aster.org/V2/ doc/default//man_u/u2/u2.04.04.pdf > 10.11.2009 tarihinde alınmıştır.
- [42] **Abbas, M.,** 2009. Formulation Discrète du Contact-Frottement, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r5/r5.03.50.pdf 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.

- [43] Abbas, M., 2009. Elements de Contact Derives d'Une Formulation Hybride Continue, <http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r5/r5.03.52.pdf> 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [44] Boresi, A.P., and Schmidt, R.J., 2003. Advanced Mechanics of Materials, JohnWileys and Sons, NewJersey.
- [45] **De Soza, T.,** 2009. Contact de Deux Sphères, <<u>http://www.code-aster.org/V2</u> /doc/default//man_v/v6/v6.04.104.pdf> 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [46] Sellenet, N., 2009. PERF005-Contact de Hertz Entre Deux Demisphères, http://www.codeaster.org/V2/doc/default//man_v/v1/v1.01.246.pdf 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [47] Proix, J., Lorentz, E., and Mialon, P., 2008. Intégration des Relations de Comportement Elasto-Plastique de Von Mises, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r5/r5.03.02.pdf> 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [48] Casals, O., Očenášek, J., and Alcalá, J., 2007. Crystal plasticity Finite Element Simulations of Pyramidal Indentation in Copper Single Crystals, Acta Materialia, 55, 55-68
- [49] Bouvier, S., and Needleman, A., 2006. Effect of the Number and Orientation of Active Slip Systems on Plane Strain Single Crystal Indentation, *Modelling and Simulation in Material Science and Engineering*, 14, No.7, 1105-1125.
- [50] Yang, F., Peng, L., and Okazaki, K., 2006. Effect of the Indenter Size on The Indentation of Aluminum, *Material Characterization*, **57**, 321-325
- [51] **Proix, J.,** 2009. Comportements Elastoviscoplastique Mono et Polycristallins, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r5/r5.03.11.pdf, 10.09.2010 tarihinde alınmıştır.
- [52] Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F., and Hutchinson, J.W., 1994. Strain Gradient Plasticity Theory and Experiments, Acta Metallurgica et Materialia, 42, 2, 474-487
- [53] Haque, M.A., and Saif, M.T.A., 2003. Strain Gradient Effect in Nanoscale Thin Films, *Acta Materialia*, **51**, 3053 -3061
- [54] Tho, K.K., Swaddiwudhipong, S., Hua, J., and Liu, Z.S., 2006. Numerical Simulation of Indentation with Size Effect, *Materials Science and Engineering A*, 421, 268-275.
- [55] Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J-L., Forest, S., 2010. Nonlinear Mechanics of Materials, pp.17-37, Springer, NewYork
- [56] Ovaert, T.C., Kim, B.R., Wang, J., 2003. Multi-parameter models of the viscoelastic/ plastic mechanical properties of coatings via combined nanoindentation and non-linear finite element modeling, *Progress in Organic Coatings*, 47, 312-323.

- [57] Forest, S., Amestoy, M., Cantournet, S., Damamme, G., Kruch, S., Maurel, V., and Ryckelynck, D., 2008. Mecanique des Milieux Continus, Ecole des Mines de Paris Direction Des Etudes, Paris
- [58] Hollister, S.J., (n.d). Biosolid Mechanics: Modeling and Applications Section 3: The Concept of Deformation and Strain Lecture Notes, http://www.engin.umich.edu/class/bme456/ch3strain/bme456straind ef.htm> 21.10.2010 tarihinde alınmıştır.
- [59] **Bargellini, R.,** 2009. Modélisation élasto(visco)plastique avec écrouissage isotrope en grandes déformations, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_r/r5/r5.03.21.pdf> 10.10.2010 tarihinde alınmıştır.
- [60] Timoshenko, S. P. and Goodier, J. N., 1987. Theory of Elasticity, pp. 69, 3rd ed., McGraw Hill, New York
- [61] Lemaitre, J., and Chaboche, J.-L., 1990. Mechanics of Solid Materials, pp.121-160 Cambridge University Press, NewYork
- [62] Lemaitre, J., 2001. Handbook of Material Behaviour Models, Academic Press, London
- [63] Lefebvre, J-P., 2009. Operateur DEFI_MATERIAUX, http://www.code-aster. org/V2/doc/ default//man_u/u4/u4.43.01.pdf, internet adresinden 14 Eylül 2010 tarihinde alınmıştır.
- [64] **url-4** < *http://www.caelinux.org/wiki/index.php/Image:Kw_sigma_eps_steel. png*> 22.08.2010 tarihinde alınmıştır.
- [65] **url-5**<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Indices_miller_direction_exemples.png > 22.08.2010 tarihinde alınmıştır.
- [66] **url-6** < http://en.wikipedia.org/wiki/File:Miller_Indices_Cubes.svg> 22.08. 2010 tarihinde alınmıştır.
- [67] Taylor, G.I., 1934. The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals: Part I—theoretical, *Proceedings of the Royal Society of London*, A145, 362–387.
- [68] Ashby, M.F., 1970. The Deformation of Plastically Non-homogeneous Alloys, *Philosophical Magazine*, **21**, 399–424.
- [69] Huang, Y., Zhang, F., Hwang, K.C., Nix, W.D., Pharr, G.M., and Feng, G., 2006. A Model of Size Effects in Nano-Indentation, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54, 1668–1686.
- [70] Nix, W.D., and Gao, H., 1998. Indentation Size Effects in Crystalline Materials: A Law for Strain Gradient Plasticity, *Journal of Mechanics* and Physics of Solids, 46, 411–425.
- [71] Durst, K., Backes, B., Franke, O., and Goken, M., 2006. Indentation Size Effect in Metallic Materials: Modeling Strength from Pop-in to Macroscopic Hardness Using Geometrically Necessary Dislocations, *Acta Materialia*, 54, 2547–2555.
- [72] Proix, J.-M., 2010. Traction sur un agrégat à 10 grains en acier bainitique, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_v/v6/v6.04.194.pdf 01.10.2010 tarihinde alınmıştır.

- [73] **Proix, J.-M.,** 2010. Comparaison MONOCRISTAL et POLYCRISTAL, http://www.code-aster.org/V2/doc/default//man_v/v6/v6.04.171.pdf 01.10.2010 tarihinde alınmıştır.
- [74] **McGuire, M**., 2008. Stainless Steels For Design Engineers, pp.71, ASM International Materials Park, Ohio

ÖZGEÇMİŞ

Ad Soyad: Kamil Armağan GÜL

Doğum Yeri ve Tarihi: İstanbul 1984

Lisans Universite: Metalurji ve Malzeme Mühendisliği - İstanbul Teknik Üniversitesi- Tarih: 2003-2007