

## Cu Elementinin Mekanik Özelliklerine Tek Eksenli Çekme Zorlanmasının Etkisi: Moleküler Dinamik Yöntemi

Sefa KAZANÇ<sup>1</sup>, Canan Aksu CANBAY<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi, Eğitim Fakültesi, Fırat Üniversitesi, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>2</sup> Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Fırat Üniversitesi, 23119, Elazığ/TÜRKİYE

<sup>1</sup> skazanc@firat.edu.tr, <sup>2\*</sup> caksu@firat.edu.tr

(Geliş/Received: 23/01/2021;

Kabul/Accepted: 22/04/2021)

**Öz:** Bu çalışmada sıcaklığın, atom sayısının ve tek eksenli zorlanmanın Cu model sisteminin gerilme davranışı üzerine etkileri moleküler dinamik yöntemi kullanılarak incelendi. Atomlar arasındaki etkileşmelerin belirlenmesinde çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) kullanıldı. Zorlanma işlemi esnasında bölgesel atomik yapıların değişimleri Honeycutt ve Andersen tarafından tasarlanan genel komşu analiz (Common Neighbor Analysis-CNA) yöntemi ile belirlendi. Sıcaklığın, atom sayısının ve zorlanma oranının model Cu elementinin gerilme davranışları üzerinde etkili olduğu, kritik yüklenme değerinin sıcaklık artışı ile azaldığı, zorlanma oranının ve atom sayısının artışı ile arttığı gözlemlendi.

**Anahtar kelimeler:** Zorlanma oranı, moleküler dinamik benzetimi, gömülmüş atom metodu, zor-zorlanma.

### The Effect of Uniaxial Tensile Strain on the Mechanical Properties of Cu Element: Molecular Dynamics Method

**Abstract:** In this study, the effects of temperature, number of atoms and uniaxial strain on the stress behavior of the Cu model system were investigated using molecular dynamics method. The Embedded Atom Method (GAM), which includes many body interactions, was used to determine the interactions between atoms. During the strain process, the changes of the regional atomic structures were determined by the Common Neighbor Analysis-CNA method designed by Honeycutt and Andersen. It was observed that temperature, atomic number and strain rate had an effect on the stress behavior of model Cu element, critical loading value decreased with increasing temperature and increased with increasing strain rate and atomic number.

**Keywords:** Strain rate, molecular dynamics simulation, embedded atom method, stress-strain.

#### 1. Giriş

Dış zorun ve sıcaklığın etkisi altında katıların davranışlarının bilinmesi oldukça önemlidir bu nedenle maddelerin mekanik özelliklerinin karakterizasyonu malzeme biliminin önemli çalışma alanlarından biridir. Özellikle yüksek zorlanma şartlarında malzemelerin mikro yapısal gelişimlerinin tespit edilmesi etkili kullanılmaları açısından gereklidir. Literatürde farklı sıcaklık ve zorlanma oranlarında element ve alaşımların gerilme davranışları üzerine yapılmış hem deneysel hem de teorik birçok çalışma bulunmaktadır [1-4]. Cu elementinin özellikleri üzerine birçok çalışma yapılmıştır, ayrıca elastik sabitleri, oda sıcaklığında çatlak yayılımı, gözenekli yapılara değişik sıcaklıklarda mekanik deformasyonun etkisi, ince filmlerde yorulma gibi Cu elementinin birçok özelliği üzerine çalışmalar yapılmıştır [5].

Maddelerin atomik boyutta yapısal ve termodinamik özelliklerinin anlaşılmasında bilgisayar benzetimleri önemli bir rol oynamaktadır bunun yanı sıra atomik benzetim yöntemleri kullanılarak nano seviyede katıların mekanik özelliklerinin incelenmesi nano teknolojinin gelişmesiyle birlikte ilgi çeken araştırmalar arasına girmiştir [5]. Son yıllarda klasik Moleküler Dinamik (MD) benzetim yöntemi ile katı maddelerin mekanik davranışları ve deformasyon mekanizmalarını incelemek için teorik olarak birçok çalışma yapılmakla birlikte yoğunluk fonksiyonu teorisine dayalı ilk prensip metodu (first principle) kullanılarak yapılan çalışmalarda mevcuttur, fakat bu metodu kullanarak atom veya molekül sistemlerini modellemek için düşük parçacık sayısına ve çok sayıda işlemci içeren bilgisayarlara ihtiyaç vardır. MD benzetimi konum ve momentum uzayı olarak bilinen faz uzayında sonlu bir zaman aralığından atomların yörüngelerini üretir. Bu yörüngelerden yararlanarak atomik sistemin fiziksel ve termodinamik birçok özelliği hesaplanmaktadır [6-10]. Modellenen sistem için atomlar arasındaki etkileşmeleri ifade eden potansiyel enerji fonksiyonunun seçimi elde edilecek sonuçların deneysel değerlerle uyum içerisinde olması açısından son derece önemlidir [11-13]. Literatürde farklı element ve alaşım sistemlerinin

\* Sorumlu yazar: [caksu@firat.edu.tr](mailto:caksu@firat.edu.tr). Yazarların ORCID Numarası: <sup>1</sup> 0000-0002-5151-4576, <sup>2</sup> 0000-0002-8896-8571

modellenmesi için çok sayıda potansiyel fonksiyonu bulunmakla birlikte çok cisim etkileşmelerini içeren GAM ile yapılan çalışmaların sayısı bir hayli fazladır [14-17].

Bu çalışmada tek eksenli gerilme zorlanmasına maruz kalan hacimsel (bulk) Cu model sisteminin mekanik tepkisi MD benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Çalışmalarda LAMMPS açık kaynak kodlu moleküler dinamik benzetim programı kullanıldı [18]. Atomlar arası etkileşmeler Zhou tarafından geliştirilen GAM ile belirlendi. Elde edilen benzetim sonuçlarından model Cu sisteminin gerilme davranışına zorlanma oranının, atom sayısının ve sıcaklığın etkili olduğu belirlendi. Kritik zorlanma değerinin atom sayısı ve zorlanma oranı artarken arttığı, sıcaklık azalırken azaldığı tespit edildi. Ayrıca model sistemin poisson oranı ve Young modülü gibi mekanik özelliklerinin değişimleri de incelendi. Zorlanma sonucu oluşan yapıların analizi için CNA metodu kullanıldı.

## 2. Materyal ve Metot

$N$  atomdan meydana gelen parçacıklar topluluğunun Lagrange veya Hamiltonyen fonksiyonlarından belirlenen hareket denklemlerinin bir sayısal algoritma ile çözümü klasik MD yönteminin temelini oluşturmaktadır. Parrinello ve Rahman tarafından ileri sürülen ve hesaplama hücresi için Lagrange fonksiyonu aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir;

$$L_{PR}(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N, \mathbf{h}, \dot{\mathbf{h}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{s}}_i^T \mathbf{G} \dot{\mathbf{s}}_i) - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(|\mathbf{h} \mathbf{s}_{ij}|) + \frac{1}{2} M \text{Tr}(\dot{\mathbf{h}}^T \dot{\mathbf{h}}) - P_{ext} V \quad (1)$$

burada;  $s_i$ ,  $i$  atomunun skalalandırılmış koordinatı,  $\mathbf{h}$  MD hücre eksenlerini,  $\mathbf{G}$ , metrik tensörü,  $P_{ext}$  sisteme uygulanan dış basıncı ve ifade etmektedir. Sistemin hareket denklemleri ise aşağıda verilmiştir.

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i - \mathbf{G}^{-1} \dot{\mathbf{G}} \dot{\mathbf{s}}_i \quad (2)$$

$$\ddot{\mathbf{h}} = M^{-1} (\mathbf{\Pi} - \mathbf{I} P_{ext}) \sigma \quad (3)$$

burada;  $\mathbf{\Pi}$ , mikroskobik zor tensörü (virial zoru olarak da adlandırılmaktadır) temsil eder ve;

$$\mathbf{\Pi} = V^{-1} \left[ \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{F_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \right] \quad (4)$$

şeklinde ifade edilmektedir [19, 20].

Bu çalışmada model hacimsel (bulk) Cu sistemin atomları başlangıç konumları olarak fcc örgü noktalarına yerleştirildi. Periyodik sınır şartları [100], [010] ve [001] doğrultuları boyunca uygulandı. Atomlara ilk hızları Maxwell-Boltzman hız dağılımına uyularak rasgele atandı. Hareket denklemlerinin sayısal çözümü için Verlet algoritmasının hız formu kullanıldı. İntegrasyon adım aralığı 1 fs olarak belirlendi. Çalışma boyunca gerilme testleri uygulanmadan önce model sistemin kararlı yapıda olabilmesi için hesaplama hücresi 50000 MD adımı dengeletildi. Potansiyelin kesilim mesafesi  $r_c = 2a_{Cu}$  olarak belirlendi.

### 2.1 Potansiyel enerji fonksiyonu

Cu atomları arasındaki etkileşmeler çok cisim etkileşmelerini içeren Gömülmüş Atom Metodu (GAM) tarafından belirlendi. Gömülmüş Atom Metodunda (GAM)  $N$  atom içeren bir hesaplama hücresinde sistemin toplam enerji ifadesi [21, 22];

$$E_T = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \phi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (5)$$

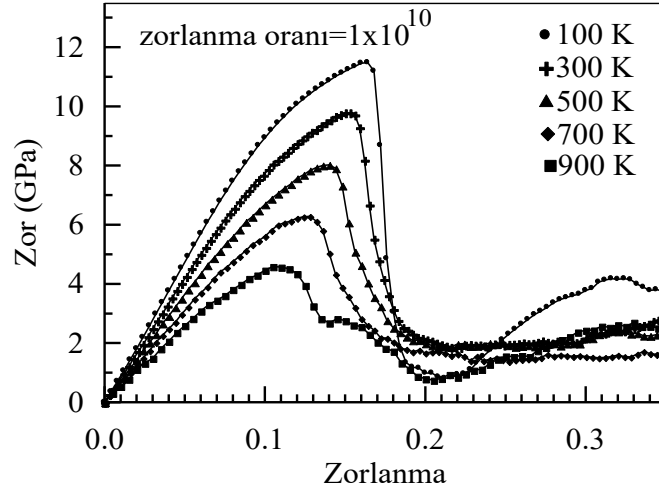
şeklinde verilmektedir. Fonksiyonda, atomlar arasındaki ikili etkileşmeleri içeren ilk terim itici etkileşmeleri ve gömme fonksiyonu olan ikinci terim ise çekici etkileşmeleri ifade etmektedir. İkili etkileşme potansiyeli ve gömme fonksiyonunun farklı sistemler için farklı türde tanımlanması sebebiyle GAM'ın farklı türleri bulunmaktadır [23,

24]. Bu çalışmada kullanılan Potansiyel fonksiyonunun detayları ve Cu elementi için parametrelerin değerleri literatürden bulunabilir [25].

MD hücresi içerisinde fcc, hcp, bcc gibi sıkı paket yapıların belirlenmesi benzetim çalışmalarında oldukça önemlidir. Birçok sayısal analiz yöntemi katı fazdaki bu yapıların belirlenmesi amacıyla geliştirilmiştir. Bu yöntemlerin temel hedefi her bir parçacığa bir yapısal tür atamaktır. Ayrıca bu yöntemler yerel bir yapıyı idealleştirilmiş bir yapıyla eşleştirerek, ne kadar yakın olduklarını belirlemeye çalışır. MD benzetim çalışmalarında yapı karakterizasyon yöntemleri olarak merkez simetri parametre analizi (centrosymmetry parametre analysis), genel yakın komşu analizi (common neighbor analysis), bağ-yönelim analizi (bond-order analysis), bağ açısı analizi (bond-angle analysis), Honeycutt-Andersen, Voronoi analizi oldukça sık kullanılmaktadır [26, 27].

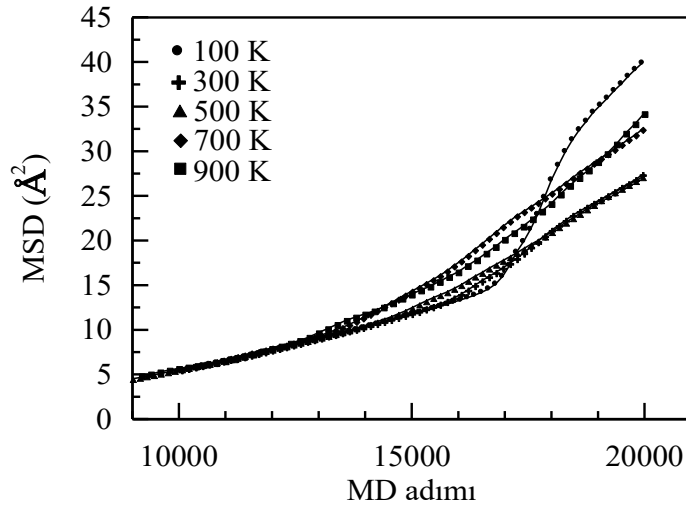
### 3. Bulgular

Bu çalışmada [100] yönünde uygulanan tek eksenli gerilme zorunun farklı sıcaklık, zorlanma oranı ve atom sayısına bağlı olarak bulk Cu model sisteminin gerilme davranışlarına etkisi MD yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. 32000 atom benzetim çalışmasının başlangıcında fcc örgü noktalarına yerleştirildi ve model sistem farklı şartlarda çekme işlemleri uygulanmadan önce 50000 MD adımı dengeletildi. Şekil 1'de 5 farklı sıcaklık değerinde hacimsel Cu sistemine [100] doğrultusu boyunca uygulanan gerilme zoru için elde edilen zor-zorlanma eğrisi verilmiştir. Her sıcaklık değeri için zorlanma oranı  $\epsilon=1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  olarak alınmıştır. Şekil 1 deki zor-zorlanma grafiğinden her sıcaklık değeri için düşük zorlanmalarda ( $\epsilon < 0,09$ ) doğrusal değişimin meydana geldiği bölge görülmektedir. Bu bölge elastik deformasyon bölgesi olarak bilinir. Zorlanma kritik bir değere ulaştığında zorda aniden bir düşüş meydana gelmektedir. Zor-zorlanma grafiğindeki bu ani azalma model sistemde meydana gelen plastik deformasyonun bir göstergesidir. Bununla birlikte zorun ulaştığı bu maksimum değer, homojen dislokasyon çekirdeklenmesi için gerekli akma zoru olarak bilinmektedir [28]. Önemli materyal özelliklerinden olan akma zoru, geri çevrilemeyen plastik deformasyonun başlangıcıyla ilişkili bir zor seviyesidir [29]. Model hacimsel Cu sistemi için akma zoru 100K, 300K, 500K, 700K ve 900K sıcaklık değerleri için sırasıyla 11,48 GPa, 9,8 GPa, 8,08 GPa, 6,28 GPa ve 4,58 GPa olarak belirlenmiştir. Sıcaklığın yükselmesiyle akma zorunun azaldığı açıkça görülmektedir. Yüksek sıcaklık değerlerinde atomik yapı yüksek entropiye sahiptir. Atomlar denge konumları etrafında sıcaklığa bağlı olarak büyük genliklerle titreşirler. Düşük sıcaklık değerleriyle karşılaştırıldığında yüksek sıcaklıklarda yeterli kinetik enerjiyi kazanan çok sayıda atom aktivasyon enerji engelini aşar. Elastik bölgenin ötesinde zor, akma noktasına ulaştıktan sonra aniden düşer ve böylece model sistemde plastik deformasyon meydana gelir. Bununla birlikte elde edilen sonuçlardan termal sürecin Cu elementinin uzamasında aktif bir rol oynadığı söylenebilir [30, 31]. Akma zorunun 100 K sıcaklığında 11,48 GPa olan değeri Cu elementinin deneysel akma zoru değeri olan 0,069 GPa değerinden oldukça düşük değerde tespit edilmiştir. Benzetim çalışmaları sonucu elde edilen akma zoru değerinin deneysel değerden farklı çıkmasında en büyük etken benzetim çalışmalarında kullanılan Cu model sisteminde deformasyon sürecini destekleyen herhangi bir kusur, dislokasyon, boşluk ve safsızlık bulunmaması gösterilebilir [31]. Akma zoru değerinin üzerinde bir zorlanma malzemeye uygulandığında plastik şekil değişimi başlamış olur ve kayma mekanizması devreye girer. Başka bir ifadeyle dislokasyonlar hareket etmeye başlar ve plastik şekil değiştirme meydana gelmiş olur. Ortam sıcaklığının plastik şekil değişim mekanizması üzerinde önemli bir etkisi vardır. Maddeye uygulanan kuvvet altında elastik şekil değiştirmesinin bir ölçüsü olarak bilinen Young modülünün yüksek değerleri o maddenin elastik özelliğinin azaldığını göstermektedir. Şekil 1 de zor zorlanma grafiğinde elastik deformasyonun meydana geldiği doğrusal bölgenin regresyon analizi sonucu Young modülü 100 K, 300 K, 500 K, 700 K ve 900 K sıcaklık değerleri için sırasıyla 95,14 GPa, 82,86 GPa, 71,03 GPa, 59,97 GPa ve 48,54 GPa olarak belirlenmiştir. Deneysel olarak Cu için Young modülü 130 GPa değerindedir [32]. Bununla birlikte Young modülünün değeri artan sıcaklıkla azalmaktadır [33]. Genellikle bu azalma erime sıcaklığı değerinin yarısına kadar hemen doğrusal olarak değişmekte ve bu noktadan sonra azalma artmaktadır. Erime sıcaklığında atomlar arası çekim kuvveti olmadığından, Young modülü değeri sıfıra yaklaşır [34]. Modelleme çalışması erime sıcaklığından düşük sıcaklık değerlerinde yapıldığından bu azalmanın doğrusal bir şekilde değiştiği görülmektedir.



Şekil 1.  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için 5 farklı sıcaklık değerinde elde edilmiş zor-zorlanma eğrisi.

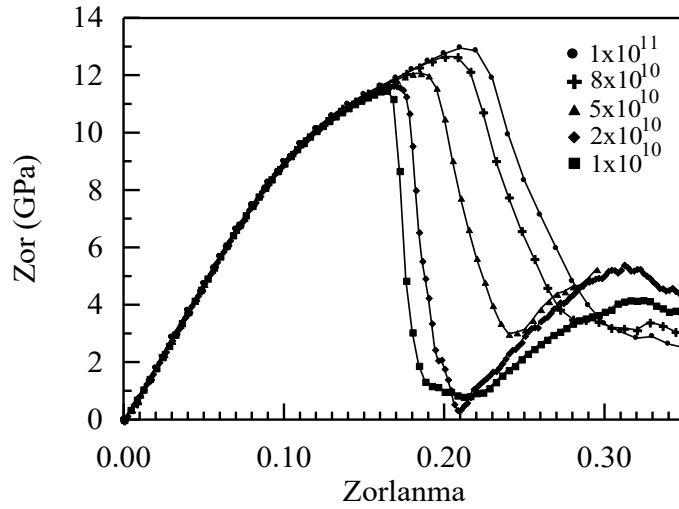
Yapısal bir değişim atomların kısa mesafeli yer değiştirmelerini gerektirmekte ve dönüşümün meydana geldiği bölgedeki atomlar daha fazla hareketli olmaktadır. Bundan dolayı model sistem içindeki atomların ortalama yer değiştirmesi artacaktır. Bu değişim kare ortalama yerdeğiştirme (mean square displacement-MSD) bağıntısı kullanılarak incelenebilir [35]. Şekil 2'de  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma değeri için 5 farklı sıcaklık değerinde elde edilen MSD verilmiştir. Sisteme zorlanma uygulanmaya başladıktan sonra elde edilen MSD grafiğinde model sistemin bulunduğu farklı sıcaklık değerlerinde uygulanan aynı zorlanma değeri için sıcaklığın artmasıyla kinetik enerjileri artan atomların MSD değerlerinin daha erken MD adımlarında meydana geldiği görülmektedir. Şekil 2 de farklı sıcaklık değerlerinde Cu sistemine uygulanan aynı zorlanma oranı için zorlanmanın artmasıyla, sıcaklık artışına bağlı olarak MSD de daha önce bir artışın meydana geldiği görülmektedir. MSD eğrilerinde görülen artışlar akma noktalarına karşılık gelmektedir. Plastik deformasyonun başlamasıyla atomların ortalama yer değiştirmelerinde de artma meydana geldiği söylenebilir.



Şekil 2.  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için 5 farklı sıcaklık değerinde elde edilmiş MSD değişimi.

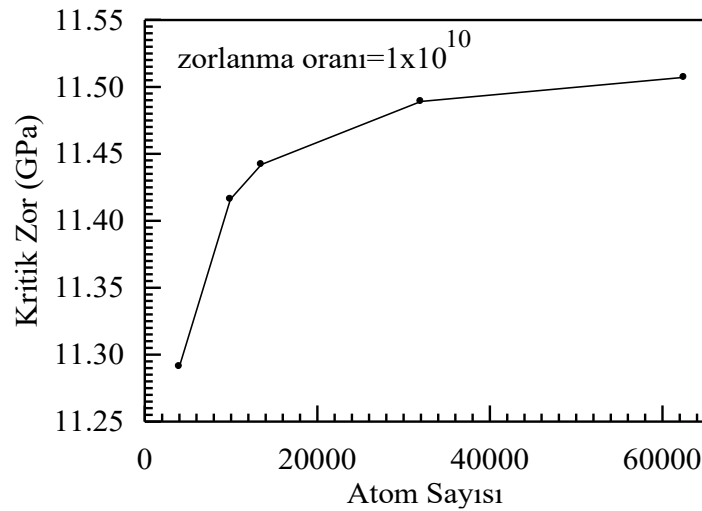
Şekil 3'de hacimsel Cu model sisteminin 100 K sıcaklık değerinde  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $8 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  ve  $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranları için elde edilen zor-zorlanma eğrileri görülmektedir. Bu çalışmada kullanılan zorlanma oranları deneysel değerlerle karşılaştırıldığında oldukça yüksektir. Çünkü MD nin zaman ölçeği atomik hareketlilik tarafından belirlendiği için çok kısa bir süre benzetim yapılabilir. Kısa zaman ölçeğinin bir sonucu olarak mevcut zamanda uygun bir deformasyon için yüksek bir zorlanma oranı gereklidir [31]. Bütün zorlanma oranları için zor değerinin, zorlanmanın 0,08 değerine kadar doğrusal olarak arttığı Şekil 3'den açıkça görülmektedir. Bu değer altında zor-zorlanma eğrisi uygulanan bütün zorlanma oranları için tamamen örtüşür. Bu plastik deformasyonun meydana gelmediği elastik bölge için model sistemin elastik özelliklerinin zorlanma

oranına bağlı olmadığı söylenebilir. Ayrıca Young modülünün zorlanma oranına bağlı olmaması, tek kristallerde aynı kristalografik yönlerde oluşan elastik deformasyon esnasında bağların aynı gerilme değerleri için aynı atomlararası kuvvete ihtiyaç duymasından kaynaklandığını göstermektedir. Benzer şekilde farklı zorlanma oranlarında olsa bile aynı kristal doğrultularında ikizlenmelerin çekirdeklenmesi için aynı zor gereklidir. Bu nedenle de Young modülünün zorlanma oranından bağımsız olduğu söylenebilir [36]. Zor-zorlanma grafiğinde elastik deformasyonun meydana geldiği doğrusal bölgenin regresyon analizi sonucu Young modülü 96.2 GPa olarak belirlenmiştir. Bununla birlikte model Cu sistemi için zorun ulaştığı maksimum değer olan akma zoru  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ,  $8 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  ve  $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranları için sırasıyla 11,48 GPa, 11,64 GPa, 12,07 GPa, 12,64 GPa ve 12,95 GPa olarak belirlenmiştir. Zorlanma oranının artmasıyla akma zor değerinin arttığı açıkça görülmektedir. Zorlanma oranının artmasıyla model sistemin plastik deformasyona uğraması için daha yüksek zorlara ihtiyaç duyulduğu söylenebilir.



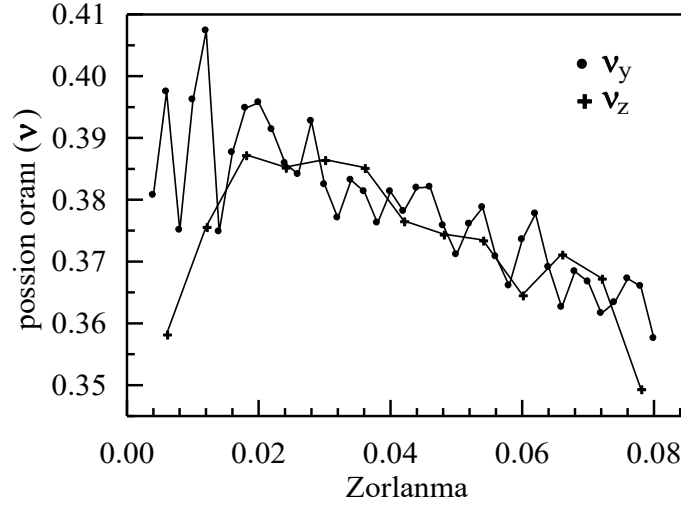
Şekil 3. 100 K sıcaklık değeri için 5 farklı zorlanma oranı için zor-zorlanma eğrisi.

Maddelerin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin atom sayısına bağlılık göstermesi beklenen bir durumdur [31]. Bundan dolayı modellenecek sistemde kullanılacak atom sayısı sistemin mekanik özelliklerinin değerlendirilmesinde önemli bir faktördür. Parçacık sayısının kritik akma zoru üzerindeki etkisini belirlemek için çalışmada 4000, 9912, 13500, 32000 ve 62500 atom içeren MD hücresi kullanılmıştır. Şekil 4 te Cu model sistemi  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için atom sayısı ile kritik zorun (akma zoru) değişimi görülmektedir. Parçacık sayısının artması ile kritik zor değerinde de bir artış meydana gelmektedir. 9912 parçacık sayısından sonra kritik zordaki artış değerinin azaldığı görülmektedir. Parçacık sayısının artmasının atomlar arasındaki bağlanmanın daha güçlü olmasına ve böylece plastik deformasyon için gerekli olan zor değerinin artmasına sebep olduğu söylenebilir.



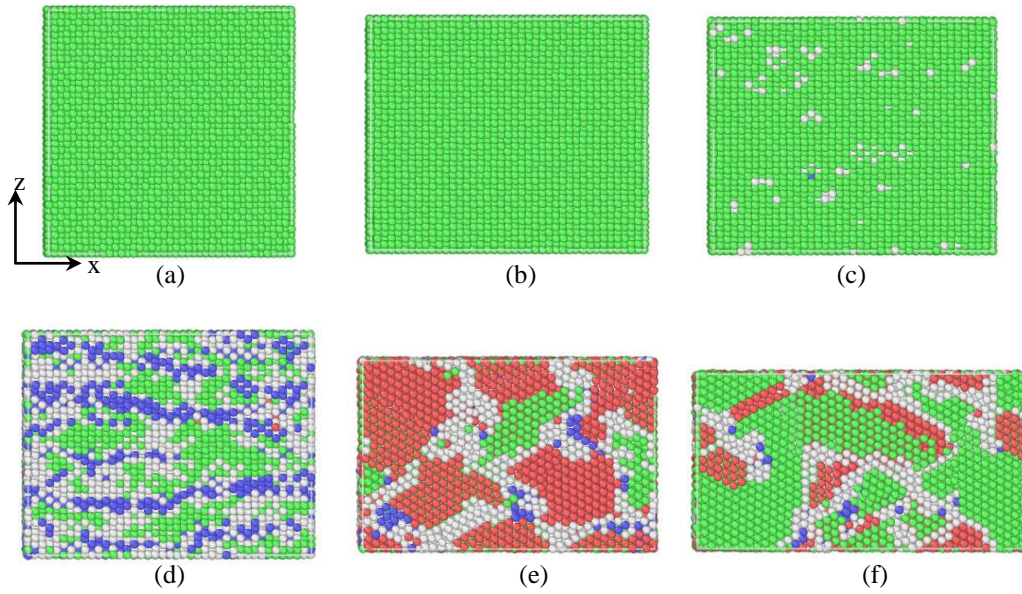
**Şekil 4.** 100 K sıcaklık ve  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için atom sayısına bağlı olarak kritik zor değerinin değişimi.

Maddelerin deformasyonunu belirleyen önemli bir parametre de poisson oranı ( $\nu$ ) dır. Bir maddeye elastik bölge sınırları içinde çekme ve sıkıştırma şeklinde bir zor uygulandığında atomların birbirine yaklaşacak veya uzaklaşacağından hacimde bir değişiklik meydana gelecektir. Zorlanma yönüne dik yöndeki doğrultularda meydana gelen değişim poisson oranı ile hesaplanır. Eğer malzemeye x yönünde bir gerilme uygulanırsa y ve z yönlerindeki poisson oranı  $\nu_y = -\epsilon_y / \epsilon_x$  ve  $\nu_z = -\epsilon_z / \epsilon_x$  olarak hesaplanır. Burada  $\epsilon_x$ ,  $\epsilon_y$  ve  $\epsilon_z$  sırasıyla x, y ve z yönlerindeki zorlanmaları göstermektedir. Poisson oranı bütün metaller için hemen hemen 0,28 ile 0,34 arasında değer almaktadır [37]. Malzeme plastik deformasyona maruz kaldıktan sonra birim hücrede bir sıkışma veya genişleme meydana gelmediğinden dolayı hacim sabit kalmaktadır ve bu durumda poisson oranı 0,5 değerini alır. Şekil 5 te Cu model sistemine elastik sınırları içinde uygulanan zorlanmaya karşı y ve z yönlerinde hesaplanan poisson oranının değişimi görülmektedir. Bu değişimin ortalama değerleri alındığında y ve z yönlerindeki poisson oranları  $\nu_y = 0,378$  ve  $\nu_z = 0,376$  olarak belirlenmiştir. Deneysel olarak Cu için poisson oranı 0,34 değerindedir. Hesaplamalardan elde edilen değer ile MD benzetim çalışmasından elde edilen değerlerin birbiriyle uyum içerisinde olduğu söylenebilir.

**Şekil 5.** 100 K sıcaklık ve  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için zorlanma ile poisson oranının değişimi.

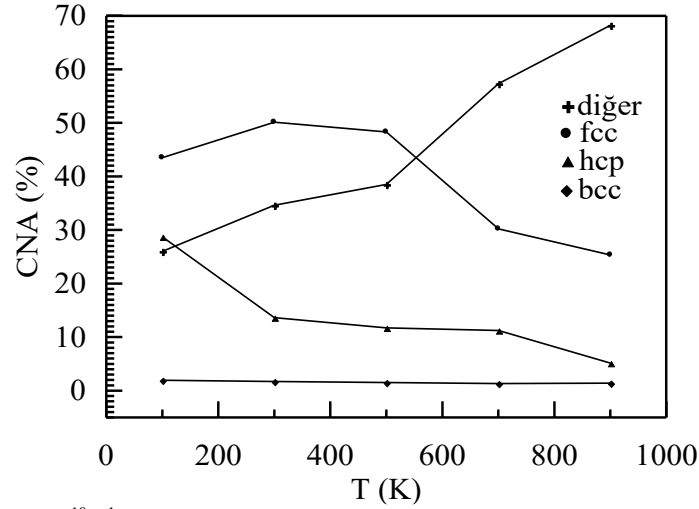
Deneysel olarak özellikle yüksek zorlanma değerlerinde malzemenin mikro yapısal gelişimini anlamak oldukça zorken, MD benzetim yöntemi farklı yüklenme durumlarında malzemenin mikro yapısal gelişimi açıklamak için oldukça kullanışlı bir tekniktir [38]. Bu çalışmada, çekme işlemi esnasında model sistemdeki atomların etrafında oluşan fcc, hcp, bcc gibi bölgesel yapıların yüzdesini belirlemek için Honeycutt ve Andersen tarafından önerilen ortak komşu analizi (common neighbor analysis-CNA) olarak bilinen topolojik analiz yöntemi kullanıldı. CNA analizi kristal yapıların yığılma kusurları, tane sınırları, deformasyon ve değişik fazlar gibi yapısal gelişimleri belirlemek için kullanılan yararlı bir karakterizasyon tekniğidir [39-41]. CNA algoritması, bir referans atomu etrafındaki en yakın komşuların geometrik bir analizini gerçekleştirir. Radyal dağılım fonksiyonunun ilk iki tepe noktası arasındaki minimum değeri ile seçilen atomların belirli bir mesafe içerisindeki dizilimleri tek tek analiz edilir [42]. Bu analizde model sistemdeki her bir atom, bir atom ve en yakın komşuları arasındaki bağlar tarafından belirlenen bölgesel kristal yapıya göre sınıflandırılır. Bu nedenle burada atomlar fcc, hcp, bcc ve "diğer" olmak üzere 4 sınıfa ayrılır. Bölgesel bir fcc düzenindeki atomlar fcc atomları olarak kabul edilir. Bölgesel bir hcp düzenindeki atomlar, fcc kristalinde oluşan yığılma kusuru yapılar olarak görülen hcp atomları olarak dikkate alınır. Diğer tüm yerel düzenlenmelerdeki atomlar ise "diğer" atomlar olarak adlandırılır [43]. Atomik görüntüler ve CNA analizi OVITO programı kullanılarak belirlenmiştir [44]. OVITO programına göre atomlar renklendirilmiştir. Yeşil renk fcc, kırmızı hcp, mavi bcc ve beyaz renk "diğer" olarak adlandırılan bu yapıların haricindeki bölgesel yerleşme gösteren atomları temsil etmektedir. Şekil 6 (a-f)'de 100 K sıcaklığında  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma değeri için farklı zorlanma değerlerinde CNA analizinden elde edilmiş atomik görüntüler yer almaktadır. Şekil 6 (a)'da model sistem 100 K sıcaklığında dengeye getirilmiş ve herhangi bir zorlanma uygulanmadan önce elde edilen atomik görüntüleri verilmiştir. Yeşil renkli atomlar fcc birim hücreli yapıları

göstermektedir. x eksenini doğrultusunda uygulanan zorlanma 0,1 değerine ulaştığında fcc yapının korunduğu ve x eksenini boyunca uzamanın meydana geldiği Şekil 6 (b)'de açıkça görülmektedir. Zorlanma değeri 0,16'a ulaştığında model sistemde fcc yapının %95,6 oranında olduğu, buna karşılık %0,1 bcc ve %4,4 diğer yapıların oluşmaya başladığı belirlenmiştir. Zorlanmanın 0,17 olduğu akma sınırına değerine yaklaşılmaya başlandığında model sistemdeki fcc birim hücreli yapı yüzdelinde ani bir düşüşün olduğu, buna karşılık %19,3 bcc, %0,3 hcp ve %50,2 oranında diğer yapıların meydana geldiği Şekil 6 (d) de görülmektedir. Akma sınırının aşıldığı 0,21 zorlanma değerine ulaşıldığında %23,6 fcc, %5,1 bcc, %37,4 hcp ve %33,6 diğer yapıların oluştuğu tespit edilmiştir. Şekil 6 (f)'de 0,35 zorlanma değerinde model sistemde fcc %43,5, bcc %1,9, hcp %28,7 ve diğer yapıların %26 değerinde olduğu belirlenmiştir. Bilindiği gibi Cu'da yığılma kusuru, Cu'nun düşük yığılma kusur enerjisinden dolayı kolaylıkla oluşmaktadır [43]. Akma zoru aşıldıktan sonra model sistem içerisindeki iç zorlar yığılma kusurların artmasına sebep olmuştur. hcp yüzdesindeki artışın bu durumun bir göstergesi olduğu söylenebilir.



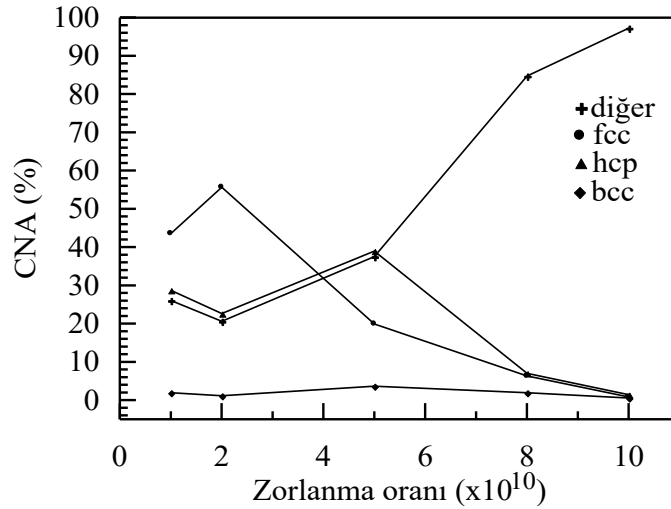
**Şekil 6.** 100 K sıcaklık ve  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için zorlanmanın, (a) 0, (b) 0,1, (c) 0,16, (d) 0,17, (e) 0,21 ve (f) 0,35 değerleri için CNA analiz sonuçları. Yeşil renk fcc, kırmızı renk hcp, mavi bcc yapıları temsil etmektedir. Beyaz renkler ise "diğer" olarak ifade edilen tanımsız yapıları göstermektedir.

Şekil 7'de  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için zorlanmanın 0,35 olduğu değerinde CNA analizinden elde edilen sıcaklığa karşı model sistem içindeki bölgesel yapıların yüzde değişimleri verilmiştir. Sıcaklığın yükselmesi "diğer" yapılarda bir artışa, bu karşılık fcc ve hcp yapıların yüzdelinde bir azalmaya sebep olmuştur. Atomların bcc yapıdaki komşuluk yüzdelinde ise tüm sıcaklık değerlerinde hemen hemen bir değişim görülmemiştir. Sıcaklığın yükselmesiyle atomlar arasındaki bağ kuvvetlerinin zayıflaması ve hareketlilikleri artan atomların uygulanan zorlanma altında bölgesel düzenli yapılarını koruyamadıkları ve bundan dolayı bir azalmanın meydana geldiği söylenebilir.



Şekil 7.  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  zorlanma oranı için farklı sıcaklıklarda elde edilen CNA analiz sonuçları.

Şekil 8’de 100 K sıcaklık değerinde zorlanma oranı ile model sistemdeki bölgesel yapıların yüzde değişimleri verilmiştir. Bu yüzde değerleri zorlanmanın  $0,35$  olduğu anda belirlenen değerlerdir. Zorlanma oranının artmasıyla “diğer” yapıların yüzdesinde bir artma ve bu karşılık fcc ve hcp yapıların yüzde değerlerinde azalma açıkça şekilden görülmektedir. bcc yapıların yüzdesinde tüm zorlanma değerleri için herhangi bir değişim görülmemektedir.



Şekil 8. 100 K sıcaklık değerinde farklı zorlanma oranlarında elde edilen CNA analiz sonuçları.

#### 4. Sonuçlar

Bu çalışmada tek eksenli gerilme zorlanmasının Cu model sisteminin gerilme davranışı ve yapısal özellikleri üzerine etkisi MD benzetim yöntemi kullanılarak incelenmeye çalışıldı. Atomlararası etkileşmelerin belirlenmesinde GAM potansiyel fonksiyonu kullanıldı. Cu’ın gerilme davranışının hem sıcaklık hem de zorlanma oranından önemli derecede etkilendiği belirlendi. Akma zoru (kritik zor) değerinin sıcaklık artışı ile azaldığı, zorlanma oranının ve atom sayısının artışı ile arttığı gözlemlendi. Young modülü, akma zorlanması, poisson oranı gibi önemli mekanik parametreler MD benzetim yöntemi ile belirlenerek deneysel değerlerle karşılaştırıldı. Ayrıca CNA yapı analiz yöntemi ile farklı sıcaklık ve zorlanma oranlarında model sistemin yapısal değişimler gösterdiği belirlendi.



**Kaynaklar**

- [1] Luu HT, Gunkelmann N. Pressure-induced phase transformations in Fe-C: Molecular Dynamics Approach. *Computational Materials Science* 2019; 162: 295-303.
- [2] Yildiz YO, Ahadib A, Kirca M. Strain rate effects on tensile and compression behavior of nano-crystalline nanoporous gold: A molecular dynamic study. *Mechanics of Materials* 2020; 143: 103338.
- [3] Wen YH, Zhang Y, Wang Q, Zheng JC, Zhu ZZ. Orientation-dependent mechanical properties of Au nanowires under uniaxial loading. *Computational Materials Science* 2010; 48: 513-519.
- [4] Tang CY, Zhang LC, Mylvaganam K. Rate dependent deformation of a silicon nanowire under uniaxial compression: Yielding, buckling and constitutive description. *Computational Materials Science* 2012; 51: 117–121.
- [5] Chang WJ. Molecular-dynamics study of mechanical properties of nanoscale copper with vacancies under static and cyclic loading. *Microelectronic Engineering* 2003; 65: 239-246.
- [6] Silva EZD, Silva AJRD, Fazzio A. How do gold nanowires break? *Phys. Rev. Lett.* 2001; 87: 256102.
- [7] Jelínek P, Pérez R, Ortega J, Flores F. First-principles simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance. *Phys. Rev. B* 2003; 68: 085403.
- [8] Nakamura A, Brandbyge M, Hansen LB, Jacobsen KW. Density functional simulation of a breaking nanowire *Phys. Rev. Lett.* 1999; 82: 1538-1541.
- [9] Silva EZ, Novaes FD, Silva AJR, Fazzio A. Theoretical study of the formation, evolution, and breaking of gold nanowires. *Phys. Rev. B* 2004; 69: 115411.
- [10] Davoodi J, Ahmadi M. Molecular Dynamics simulation of elastic properties of CuPd nanowire. *Composites: Part B* 2012; 43: 10-14.
- [11] Etesami S.A., Asadi E., Molecular dynamics for near melting temperatures simulations of metals using modified embedded-atom method. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2018, 112: 61–72.
- [12] Chamati H, et al. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100). *Surface Science* 2006; 600: 1793–1803.
- [13] Mendeleev MI, et al., Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine* 2003; 83(35): 3977–3994.
- [14] Cagin T, Dereli G, Uludogan M, Tomak M. Thermal and mechanical properties of some fcc transition metals. *Phys. Rev. B* 1999; 59(4): 3468-3472.
- [15] Zhang XJ, Chen CL. Phonon dispersion in the Fcc metals Ca, Sr and Yb. *J. Low Temp. Phys.* 2012, 169: 40-50.
- [16] Tolpin KA, Bachurin VI, Yurasova VE. Features of energy dependence of NiPd sputtering for various ion irradiation angles. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 2012; 273: 76-79.
- [17] Louail L, Maouche D, Roumili A, Hachemi A. Pressure effect on elastic constants of some transition metals. *Mat. Chem. Phys.* 2005; 91: 17-20.
- [18] <http://lammps.sandia.gov/LAMMPS> Molecular Dynamics Simulator (Erişim Tarihi:02.01.2021).
- [19] Kazanc S. The effects on the lattice dynamical properties of the temperature and pressure in random NiPd alloy. *Can. J. Phys.* 2013; 91: 833–838.
- [20] Kazanc S, Ozgen S, Adiguzel O. Pressure effects on martensitic transformation under quenching process in a molecular dynamics model of NiAl alloy. *Physica B* 2003; 334: 375-381.
- [21] Voter AF, Chen SP. Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al, and Ni3Al. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1987; 82: 175.
- [22] Finnis MW, Sinclair JE. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine*, 1984; 50: 45-55.
- [23] Cai J, Ye YY. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Phys. Rev. B* 1996; 54: 8398.
- [24] Kazanc S, Özgen S. The Changes of barrier energy in fcc-bcc phase transformation by shear stresses. *G.U. Journal of Science* 2004; 17(2): 35-42.
- [25] Wadley HNG, Zhou X, Johnson RA, Neurock M. Mechanism, models and methods of vapor deposition. *Progress in Materials Science* 2001; 46: 329-377.
- [26] Malins A, Williams SR, Eggers J, Royall CP. Identification of structure in condensed matter with the topological cluster classification. *The Journal of Chemical Physics* 2013; 139: 234506.
- [27] Stukowski A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 2012; 20: 045021.
- [28] Zhang L, Lu C, Tieu AK. Nonlinear elastic response of single crystal Cu under uniaxial loading by molecular dynamics study. *Materials Letters* 2018; 227: 236-239.
- [29] Schiotz J, Tolla FDD, Jacobsen KW. Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes. *Nature* 1998; 391: 561-563.
- [30] Jing Y, Meng Q, Zhao W. Molecular dynamics simulations of the tensile and melting behaviours of silicon nanowires. *Physica E* 2009; 41: 685-689.
- [31] Wen YH, Zhu ZZ, Zhu RZ. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: Strain rate effects. *Computational Materials Science* 2008; 41: 553-560.
- [32] Howatson AM, Lund PG, Todd JD. *Engineering Tables and Data*. London: Chapman and Hall, 1972.

- [33] Wang J, Huang QA, Yu H. Size and temperature dependence of Young's modulus of a silicon nano-plate. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008; 41: 165406.
- [34] Koh SJA, Lee HP, Lu C, Cheng QH. Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects. *Phys. Rev. B* 2005; 72: 085414.
- [35] Rahman A. Correlation in the motion of atoms in liquid Argon. *Physical Review* 1964; A405: 136.
- [36] Li L, Han M. Molecular dynamics simulations on tensile behaviors of single-crystal bcc Fe nanowire: effects of strain rates and thermal environment. *Appl. Phys. A* 2017; 123: 450.
- [37] Yang Z, Yang Q, Zhang G. Poisson's ratio and Young's modulus in single-crystal copper nanorods under uniaxial tensile loading by molecular Dynamics. *Physics Letters A* 2017; 381: 280-283.
- [38] Rawat S, Mitra N. Twinning, phase transformation and dislocation evolution in single crystal titanium under uniaxial strain conditions: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science* 2020; 172: 109325.
- [39] Bonny G, Castin N, Terentyev D. Interatomic potential for studying ageing under irradiation in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2013; 21: 085004.
- [40] Mishin Y, Mehl M, Papaconstantopoulos D, Voter A, Kress J. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations. *Phys. Rev. B* 2001; 63: 224106.
- [41] Winey J, Kubota A, Gupta Y. A thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: thermoelastic response of aluminum. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009; 17: 055004.
- [42] Bañuelos EU, Aburto CC, Arce AM. A common neighbor analysis of crystallization kinetics and excess entropy of charged spherical colloids. *The Journal of Chemical Physics* 2016; 144: 094504.
- [43] Fanga R, Wanga W, Guoa L, Zhanga K, Zhanga X, Lib H. Atomic insight into the solidification of Cu melt confined in graphene Nanoslits. *Journal of Crystal Growth* 2020; 532: 125382.
- [44] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 2010; 18(1): 015012.