KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

TEK KRİSTAL METALİK MALZEMELERDE DİSLOKASYON YAPILARININ ETMEN TABANLI BENZETİMİ

UÇAK Y.MÜH. ALTUĞ UZUNALİ

KOCAELİ 2012

KOCAELİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

TEK KRİSTAL METALİK MALZEMELERDE DİSLOKASYON YAPILARININ ETMEN TABANLI BENZETİMİ

UÇAK Y.MÜH. ALTUĞ UZUNALİ

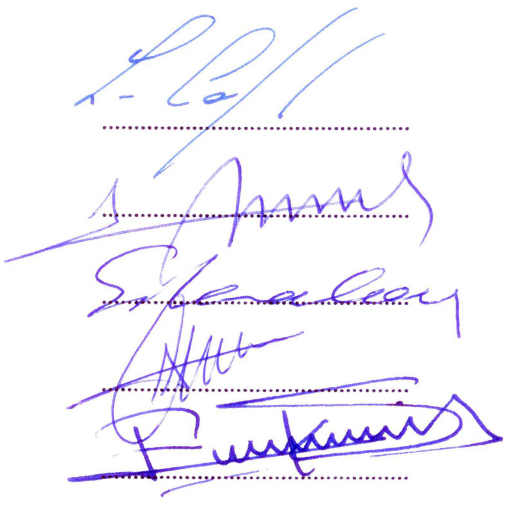
Prof.Dr. Levon ÇAPAN
Danışman, Kocaeli Üniv.

Prof.Dr. Vahdet UÇAR
Jüri Üyesi, Sakarya Üniv.

Doç.Dr. Sedat KARABAY
Jüri Üyesi, Kocaeli Üniv.

Doç.Dr. Armağan ARICI
Jüri Üyesi, Kocaeli Üniv.

Yrd.Doç.Dr. Erdal KARADENİZ
Jüri Üyesi, Sakarya Üniv.



Tezin Savunulduğu Tarih: 08.06.2012

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Etmen tabanlı benzetim yaklaşımı özellikle sosyoloji ve biyoloji alanlarındaki problemlerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kuramsal olarak bu yaklaşımın, çok sayıda ve birbirleri ile etkileşimde bulunan varlıklardan oluşan öz örgütlü ve karmaşık sistemlerin bilgisayar benzetiminde kullanılması mümkündür. Bu bağlamda öz örgütlü dislokasyon hareketi ve desen oluşumunun etmen tabanlı modelleme ve benzetim yoluyla incelenmesi için bir çerçeve geliştirilmiştir.

Geliştirilen etmen tabanlı model, dislokasyonların 2 boyutlu hareketini Newtoncu bir bakış açısıyla ele alan ve birbirleri ile etkileşimlerini belirleyen dislokasyon dinamiğine dayandırılmıştır. Elde edilen sonuçlar kullanılan yaklaşımın, problemin ayrıntılı ve biçimsel bir şekilde incelenmesine olanak sağladığını göstermektedir. Buradan hareketle, geliştirilen modelin dislokasyon hareketlerinin ve desen oluşumunun daha ayrıntılı incelenebileceği 3 boyutlu haline genişletilmesi gelecek çalışmalar için planlanabilir.

Modele ait yazılımın kaynak koduna http://code.google.com/p/defectsim/ adresinden erişilebilir. Yapılan bu çalışmanın etmen tabanlı bakış açısını farklı mühendislik alanlarına uygulamak isteyen araştırmacılara katkıda bulunmasını dilerim.

Bana bu konuda çalışma olanağı veren tez danışmanım Sayın Prof. Dr. Levon ÇAPAN'a (Kocaeli Ünv. Müh. Fak.), tez izleme komitesinin değerli üyeleri Sayın Doç. Dr. Sedat KARABAY'a (Kocaeli Ünv. Müh. Fak.), Sayın Yrd. Doç. Dr. Erdal KARADENİZ'e (Sakarya Ünv. Müh. Fak.), katkılarından ve yönlendirmelerinden dolayı Sayın Prof. Dr. Oğuz DİKENELLİ'ye (Ege Ünv. Müh. Fak.) ve büyük bir sabırla bana destek olan aileme teşekkürlerimi sunarım.

Haziran - 2012 Altuğ Uzunali

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR.....i
İÇİNDEKİLER.....ii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....iv
TABLOLAR DİZİNİ.....viii
SİMGELER DİZİNİ VE KISALTMALAR.....ix
ÖZET.....xi
ABSTRACT.....xii
GİRİŞ.....1
1. KRİSTAL MALZEMELERDE DİSLOKASYONLAR.....8
1.1. Tarihsel Bakış.....8
1.2. Kristal Kusurları ve Dislokasyonlar.....9
1.2.1. Dislokasyonlar.....10
1.2.1.1. Kristal kafesler.....14
1.3. Dislokasyonların Kollektif Davranışı ve Desen Oluşumu.....15
1.3.1. Dislokasyonların diğer kusurlarla etkileşimi.....16
1.3.2. Kalıcı kayma bantları yapıları 17
1.3.3. K.K.B.'deki dislokasyon mekanizmaları 19
1.4. Dislokasyon Desenlerinin Modellenmesi.....20
1.4.1. Klasik Modeller.....21
1.4.2. Devingen Modeller 22
1.4.3. Bilgisayar Benzetimleri 22
2. DİSLOKASYON DİNAMİĞİ 25
2.1. Kenar Dislokasyonunun Gerilme Alanı.....25
2.2. Dislokasyon Dinamiği 27
2.2.1. Uzak mesafeli etkileşim 28
2.2.1.1. Hareket denklemi.....30
2.2.1.2. Isıl etkilerle hareket.....31
2.2.2. Yakın mesafeli etkileşim.....32
2.2.2.1. Durma (Immobilization).....32
2.2.2.2. Yok olma (Annihilation).....32
2.2.2.3. Kitlenme (Locking) 32
2.2.2.4. Çift kutuplu (Dipole) oluşumu.....35
2.2.2.5. Çoğalma (Multiplication).....36
3. DİSLOKASYON DESEN OLUŞUMUNUN ETMEN TABANLI BENZETİMİ. 40
3.1. Etmen Tabanlı Modelleme ve Benzetim.....40
3.1.1. Etmen.....40
3.1.2. Etmen mimarileri.....41
3.1.3. Etmen davranışının modellenmesi.....42
3.1.4. Çevre.....43
3.1.4.1. Çevrenin modellenmesi.....44
3.1.5. Etkileşimler 46
3.1.6. Zamanın modellenmesi.....48
3.1.6.1. Bir etmenin davranış zamanının modellenmesi.....48
3.1.6.2. Çevrenin dinamiğinin modellenmesi.....49

3.2. Modelleme ve Benzetim Araçları....49
3.2.1. Swarm....49
3.2.2. Repast Symphony....50
3.2.3. Mason....50
3.2.4. NetLogo....51
3.3. Dislokasyon Desen Modeline Genel Bakış....51
3.3.1. Etmen modelleri....53
3.3.2. Çevre modeli....56
3.3.3. Bileşenler arası arayüzler....57
3.3.3.1. Dislokasyon etmeni ve çevre....57
3.3.3.2. Çevre ve benzetim motoru....58
4. DİSLOKASYON DESEN MODELİNİN GERÇEKLENMESİ....59
4.1. D.D.M.'nin Gerçeklenmesi....59
4.1.1. Bakış açılarının oluşturulması....60
4.1.2. Etmen, kaynak ve çevrenin gerçeklenmesi....61
4.1.2.1. Etmenler....62
4.1.2.2. Kaynaklar....65
4.1.2.3. Çevre....65
4.1.3. Çevreden etmenlere gelen bilgiler....65
4.1.3.1. Malzeme....66
4.1.3.2. Dış gerilmenin hesaplanması....66
4.1.3.3. Komşu listesinin oluşturulması....68
4.1.3.4. Sıcaklık....69
4.1.4. Deneysel çerçeveler....69
4.2. Modelin Doğrulanması Ve Geçerlenmesi....73
4.2.1. Modelin doğrulanması....73
4.2.2. Modelin geçerlenmesi....75
4.2.2.1. Birinci seviye geçerleme....75
4.2.2.2. İkinci seviye geçerleme....79
4.2.2.3. Üçüncü seviye geçerleme....84
5. DİSLOKASYON DESEN MODELİNİN UYGULANMASI....91
5.1. Dislokasyon Duvarlarının Oluşumuna Gerilmenin Etkisi....91
5.2. Dislokasyon Duvarlarının Oluşumuna Sıcaklığın Etkisi....108
5.3. Dislokasyon Hücrelerinin Oluşumuna Gerilmenin Ve Sıcaklığın Etkisi....114
5.4. Yok Olma Mesafesinin Etkisi....119
5.5. Dislokasyon Birikimlerinin Oluşumu....119
6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER....125
KAYNAKLAR....129
KİŞİSEL YAYIN VE ESERLER....133
ÖZGEÇMİŞ....135

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Bir kenar dislokasyonunun geometrisi.....10
Şekil 1.2. Vida dislokasyonunun geometrisi.....11
Şekil 1.3. Dislokasyonların kayma gerilmesi altında hareketi, a) kenar dislokasyonu, b) vida dislokasyonu.....12
Şekil 1.4. Bir kenar dislokasyonunun ayrıntılı hareketi.....12
Şekil 1.5. Burgers vektörünün tanımlanması, a) dislokasyon olmayan kafes düzlemi, b) dislokasyon bulunan kafes düzlemi.....13
Şekil 1.6. Dislokasyon düğümü.....13
Şekil 1.7. En yaygın kafes yapılarına ait birim hücreler. (a) Basit Kübik, (b) Hacim Merkezli Kübik (H.M.K.), (c) Yüzey Merkezli Kübik (Y.M.K.).....14
Şekil 1.8. Y.M.K. kristal yapısının {111}<110> kayma sistemi.....15
Şekil 1.9. Çeşitli çalışmalarda gözlenen bazı dislokasyon desenleri 16
Şekil 1.10. K.K.B. oluşumunun şematik gösterimi.....18
Şekil 1.11. Tekrarlı yükleme sonucunda bakırda oluşan K.K.B.....18
Şekil 1.12. İdeal gerilme - gerinme eğrisi.....19
Şekil 2.1. Kristal içinde kenar dislokasyonunun yarattığı esnek bozulmayı temsil eden izotropik silindir 25
Şekil 2.2. Kenar dislokasyonunun çevresinde oluşan üç yöndeki esnek gerilme alanı 26
Şekil 2.3. Doğrusal esneklik kuramına göre dislokasyonun çekirdek bölgesinde oluşan süreksizlik.....27
Şekil 2.4. Kenar dislokasyonu üzerindeki kuvvetler.....28
Şekil 2.5. İki kenar dislokasyonu arasındaki Peach-Koehler kuvveti.....30
Şekil 2.6. Lomer-Cottrell engelinin oluşumu.....33
Şekil 2.7. Birbirine dik Burgers vektörlerine sahip iki kenar dislokasyonunun kesişimi.....34
Şekil 2.8. Birbirine paralel Burgers vektörlerine sahip iki kenar dislokasyonunun kesişimi.....35
Şekil 2.9. Tek sonlu Frank-Read kaynağı, a) CEF düzleminde parçalı olarak uzanan dislokasyon b) kayma adımının oluşumu.....37
Şekil 2.10. Frank-Read kaynağında bir dislokasyonun hareketinin gösterimi.....38
Şekil 2.11. Bir silikon kristalinde Frank-Read kaynağı 38
Şekil 2.12. Bir kenar dislokasyonunun tırmanması için mekanik ve kimyasal kuvvetler.....39
Şekil 3.1. Bir etmenin temel yapısı 40
Şekil 3.2. Üç aşamalı bir süreç olarak etmen.....42
Şekil 3.3. Etmenin çevre ile etkileşimi.....44
Şekil 3.4. Ayrıklaştırılmış ortam örnekleri.....45
Şekil 3.5. Sürekli yaklaşım uygulama örneği.....46
Şekil 3.6. Çok etmenli etkileşim.....47
Şekil 3.7. Çok ölçekli modelleme yaklaşımı 52
Şekil 3.8. Dislokasyon desen modeli genel görünüş diyagramı.....52
Şekil 3.9. Dislokasyon etmenine ait tepkisel mimari.....53
Şekil 4.1. Repast Symphony aracı kullanıcı arayüzü.....59

Şekil 4.2. Benzetimde kullanılan kayma düzlemi ve kenar dislokasyonları 60
Şekil 4.3. Y.M.K. malzemelerde kayma sistemleri ve kartezyen koordinat sistemine göre yerleşimi.....61
Şekil 4.4. Periyodik sınır koşulları.....61
Şekil 4.5. Sınıf diyagramı.....63
Şekil 4.6. Dislokasyon etmeninin durum diyagramı.....63
Şekil 4.7. Dislokasyon etmeninin davranış diyagramı.....64
Şekil 4.8. Eksenel yükleme için kayma düzlemi ve kayma doğrultusundan oluşan kayma sistemi.....67
Şekil 4.9. Uzak mesafeli elastik kuvvet hesabı için kullanılan algılama yarıçapı....68
Şekil 4.10. Minimum imge kuralının uygulanması.....69
Şekil 4.11. İki dislokasyonun uzak mesafeli etkileşiminin birim testlerinde kullanılan tipik biçimlenmeler 73
Şekil 4.12. Çok sayıda dislokasyonun uzak mesafeli kuvvet birim testinde kullanılan dislokasyon dağılımı ve test dislokasyonu.....74
Şekil 4.13. Uygulanan tekrarlı dış gerilme ve çözümlenmiş kayma gerilmesi birim test sonucu.....74
Şekil 4.14. Uygulanan artımlı dış gerilme ve çözümlenmiş kayma gerilmesi birim test sonucu.....75
Şekil 4.15. [110] ve [101] kayma doğrultularında tek dislokasyonun hareket testi için kullanılan iki yerleşim.....76
Şekil 4.16. [110] kayma doğrultusunda elde edilen x/y eksenlerindeki kayma mesafesi, dislokasyonun kayma hızı ve dislokasyonun üzerindeki net gerilme.....77
Şekil 4.17. [101] kayma doğrultusunda elde edilen x/y eksenlerindeki kayma mesafesi, dislokasyonun kayma hızı ve dislokasyonun üzerindeki net gerilme.....77
Şekil 4.18. Sıcaklığın dislokasyon hızları üzerindeki etkisi.....78
Şekil 4.19. İki dislokasyonun hareket testi için kullanılan iki farklı yerleşim.....79
Şekil 4.20. Birbirlerini iterek uzaklaşan iki dislokasyonun konum, hız, açı ve net gerilme değerleri.....80
Şekil 4.21. Birbirlerini çekerek yaklaşan iki dislokasyonun konum, hız, açı ve net gerilme değerleri.....81
Şekil 4.22. Yok olma mesafesi testi için kullanılan yerleşim.....81
Şekil 4.23. Çift kutuplu mesafesi testi için kullanılan yerleşim.....82
Şekil 4.24. Çift kutuplu durumu oluşturan iki dislokasyona ait mesafe, çift kutupluluk, hız ve net gerilme değerleri.....83
Şekil 4.25. Dislokasyon duvarlarının oluşumu, dislokasyonların başlangıçtaki ve 4000 benzetim adımı sonucundaki konumları 85
Şekil 4.26. Tek kristal bakırda tekrarlı yükleme ile elde edilen dislokasyon duvarlarına ilişkin deneysel çalışmalar.....85
Şekil 4.27. Bakırın tekrarlı yüklenmesi sonucunda oluşan dislokasyon duvarlarına ait bilgisayar benzetimi 86
Şekil 4.28. Dislokasyon hücrelerinin oluşum testinde başlangıçtaki ve 10000 benzetim adımı sonucu oluşan dislokasyon dağılımı.....87
Şekil 4.29. 10000 benzetim adımı sonucu oluşan dislokasyon dağılımının büyütülmüş hali.....87
Şekil 4.30. Oda sıcaklığında 180 MPa sabit yükleme sonucu elde edilen hücre yapısı. 88
Şekil 4.31. Başlangıç durumundaki hız dağılımı.....88

Şekil 4.32. 10000 benzetim adımı sonundaki hız dağılımı.....88
Şekil 4.33. Noktasal engel tarafından dislokasyonların durdurulması ve birikme oluşumu.....89
Şekil 5.1. $\dot{N}_n$=0 durumunda bakır ve alüminyum tek kristallerinde uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon duvarları.....92
Şekil 5.2. $\dot{N}_n$=0 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni.....93
Şekil 5.3. $\dot{N}_n$=0 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların kayma hızlarının dağılımı.....94
Şekil 5.4. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda bakır ve alüminyum tek kristallerinde uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon duvarları.....96
Şekil 5.5. Bakırda $\dot{N}_n$=2/10 durumunda ve 150 MPa dış gerilme altında 4000 benzetim adımı boyunca dislokasyon duvarlarının evrilmesi.....97
Şekil 5.6. Alüminyumda $\dot{N}_n$=2/10 durumunda ve 150 MPa dış gerilme altında 4000 benzetim adımı boyunca dislokasyon duvarlarının evrilmesi.....98
Şekil 5.7. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni.....99
Şekil 5.8. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların kayma hızlarının dağılımı.....100
Şekil 5.9. Bakırda gevşeme sonucunda hızların düşmesi.....101
Şekil 5.10. Alüminyumda gevşeme sonucunda hızların düşmesi.....101
Şekil 5.11. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....102
Şekil 5.12. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....102
Şekil 5.13. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....103
Şekil 5.14. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....103
Şekil 5.15. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....104
Şekil 5.16. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....104
Şekil 5.17. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 ve 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....105
Şekil 5.18. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 ve 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi.....105
Şekil 5.19. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 ve 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi 106
Şekil 5.20. Bakır için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak ortalama kayma hızının zamanla değişimi.....106
Şekil 5.21. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum kayma hızının zamanla değişimi.....107
Şekil 5.22. Bakır için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum net gerilmenin zamanla değişimi.....107
Şekil 5.23. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum net gerilmenin zamanla değişimi.....108

Şekil 5.24. Bakırda $\dot{N}_n$=0, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları.....109
Şekil 5.25. Bakırda $\dot{N}_n$=2/10, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları.....110
Şekil 5.26. Alüminyumda $\dot{N}_n$=0, 300°K ve 450°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları.....111
Şekil 5.27. Alüminyumda $\dot{N}_n$=2/10, 300°K ve 450°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları.....112
Şekil 5.28. Bakırda $\dot{N}_n$=0 ve $\dot{N}_n$=2/10 durumlarında 150 MPa dış gerilmede 300°K, 450°K ve 600°K sıcaklıklarda oluşan gerilme alanının σ_{xy} bileşeni.....113
Şekil 5.29. Alüminyumda $\dot{N}_n$=0 ve $\dot{N}_n$=2/10 durumlarında 150 MPa dış gerilmede 300°K, 400°K ve 450°K sıcaklıklarda oluşan gerilme alanının σ_{xy} bileşeni 114
Şekil 5.30. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucunda dislokasyon yapıları.....116
Şekil 5.31. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucundaki dislokasyonların gerilme alanının σ_{xy} bileşeni.....117
Şekil 5.32. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucundaki dislokasyonların kayma hızları dağılımı.....118
Şekil 5.33. 100 MPa tekrarlı yükleme altında bakırda ve alüminyumda 40b, 60b ve 130b yok olma mesafesi değerleri ile oluşan dislokasyon dağılımları...120
Şekil 5.34. Bakırda, 200 engelle ve $1{,}0\text{x}10^6$ GPa/s yükleme hızıyla elde edilen dislokasyon birikimlerinin büyütülmüş dağılımı.....121
Şekil 5.35. Bakırda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların konumları.....122
Şekil 5.36. Alüminyumda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların konumları.....123
Şekil 5.37. Bakırda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni.....124
Şekil 5.38. Alüminyumda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni.....124

TABLOLAR DİZİNİ

Tablo 1.1. H.M.K. ve Y.M.K. kristal yapılarının birincil, ikincil ve diğer kayma sistemleri.....15
Tablo 4.1. Repast benzetim motorunda metotların çizelgelemesinde kullanılan parametreler.....62
Tablo 4.2. Benzetimde kullanılan Cu ve Al malzemelerine ait sabit parametreler…66
Tablo 4.3. Y.M.K. malzemelerde temel kayma sistemleri.....66
Tablo 4.4. Isıl etki testinde kullanılan sıcaklık değerleri ve ergime sıcaklığına oranları.....78
Tablo 4.5. Yok olma mesafesi girdi ve çıktı değerlerine ait test sonuçları.....82
Tablo 5.1. $\dot{N}_n$=0 durumunda, 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeler ile oluşan dislokasyon sayıları.....95
Tablo 5.2. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda, 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeler ile oluşan dislokasyon sayıları.....95

SİMGELER DİZİNİ VE KISALTMALAR

σ	: Gerilme (MPa)
τ	: Kayma gerilmesi (MPa)
F	: Kuvvet (N)
v	: Hız (m/s)
T	: Sıcaklık (°K)
μ	: Kayma modülü (GPa)
ν	: Poisson oranı
d	: Mesafe
r	: Kutupsal koordinatlarda mesafe (nm)
$\vec{b}$	: Burgers vektörü
B	: Sönümlenme katsayısı (Pa s)
N	: Dislokasyon ve engel sayısı
$\dot{N}$	: Dislokasyon çoğalma hızı (adet/adım)
P	: Özellik kümesi
M	: Zihinsel özellik kümesi
S	: Durum kümesi
SA	: Etmen durum kümesi
SE	: Varlık durum kümesi
A	: Etmen kümesi
E	: Varlık kümesi
RU	: Alt varlık kümesi
AM	: Etmen modeli
V	: Değişken
DÇ	: Deneysel çerçeve
G	: Girdi kümesi
Ç	: Çıktı kümesi

Alt indisler

ij	: i ve j arasında
dış	: Dışarıdan
i	: i. eleman
a	: Yok olan
d	: Çift kutuplu
m	: Hareketli
n	: Çoğalan
t	: Toplam
net	: Net gerilme
xy	: xy bileşeni
xx	: xx bileşeni
zz	: zz bileşeni
RMS	: Ortalama karekök

DDM : Dislokasyon Desen Modeli
dis : Dislokasyon etmeni
eng : Engel etmeni

Kısaltmalar

D.D. : Dislokasyon Dinamiği
D.D.M. : Dislokasyon Desen Modeli
E.T.M.B. : Etmen Tabanlı Modelleme ve Benzetim
H.M.K. : Hacim Merkezli Kübik
K.K.B. : Kalıcı Kayma Bantları
U.M.L. : Unified Modelling Language (Birleşik Modelleme Dili)
Y.M.K. : Yüzey Merkezli Kübik

TEK KRİSTAL METALİK MALZEMELERDE DİSLOKASYON YAPILARININ ETMEN TABANLI BENZETİMİ

ÖZET

Bu çalışmada, tek kristal metalik malzemelerde plastik deformasyon altında dislokasyonların hareketleri ve etkileşimleri sonucunda beliren öz örgütlü desen oluşumunun incelenmesi için etmen tabanlı modelleme ve benzetim yaklaşımı ile bir çerçeve oluşturulmuştur. Dislokasyon Desen Modeli adı verilen çerçeve, dislokasyonların 2 boyutlu hareketini Newtoncu bir bakış açısıyla ele alan ve birbirleri ile etkileşimlerini belirleyen dislokasyon dinamiğine dayandırılmıştır. Bir elektronik laboratuvar olarak bu çerçevenin kullanımı bakır ve alüminyum tek kristal malzemelerinde çeşitli yükleme tiplerinin ve değerlerinin, kayma sistemlerinin ve sıcaklığın desen oluşumuna etkisinin incelenmesi ile sergilenmiştir.

Anahtar kelimeler: Etmen tabanlı benzetim, öz örgütlü dislokasyon desenleri, yoğruk biçim değiştirme

AGENT BASED SIMULATION OF DISLOCATION STRUCTURES IN SINGLE CRYSTALS

ABSTRACT

In this study, a framework based on agent based modelling, has been developed in order to examine self-organized dislocation patterns which emerge from the motion of dislocations and their mutual interactions under plastic deformation in single crystals. This framework, named Dislocation Patterning Model, is based on dislocation dynamics which utilizes 2D Newtonian view of motion of dislocations and takes their mutual interactions into account. As an electronic laboratory, the usage of the framework has been demonstrated by investigation of dislocation patterning in copper and aluminum single crystals with several loading types and amounts, slip systems and temperature.

Keywords: Agent based simulation, self-organized dislocation patterns, plastic deformation

GİRİŞ

Metallerin yoğruk biçim değiştirmesine bağlı üretim yöntemleri sanayide önemli bir yer tutmaktadır. Yoğruk şekil verme yöntemleri ile üretilen parçaların en önemli uygulama alanları aşağıdaki şekilde sıralanabilir [1] :

- Otomotiv, takım tezgahları gibi çeşitli endüstriler için üretilen sayısız parçalar (örneğin otomotiv kaportaları, krank milleri)
- Bağlama elemanları (vida, somun,cıvata, perçin vb.)
- El takımları (kerpeten, çekiç, tornavida vb.) ve tıp aletleri (örneğin pansuman makası)
- Her çeşit metal kutular
- Tünel, maden ve taş ocaklarında kullanılan yapı elemanları (tavan ve duvar elemanları, maden direkleri)
- İnşaat sektöründe, örneğin kapı ve pencerelerde kullanılan donatımlar

Yoğruk şekil verme yöntemlerine ek olarak sürünme, aşınma, kırılma vb. olaylarda yoğruk biçim değişiminin varlığı, atomik ölçekte fiziksel olarak neler olduğunun anlaşılması ve bunların makro ölçekte malzeme özelliklerine etkisinin araştırılması, bilim adamlarını uzun zamandır meşgul etmektedir. Dislokasyonlar, kollektif hareketleriyle yoğruk biçim değişiminin baş aktörleri olarak gösterilmekte ve kristal yapıların kalıcı şekil değiştirmelerine yönelik tartışmaların odak noktasında bulunmaktadırlar. Bu önemli konumlarından dolayı, dislokasyonlar yoluyla yoğruk biçim değişiminin modellenmesine yönelik kuramsal, devingen ve bilgisayar benzetimi yaklaşımları önemli yer tutmaktadır.

Kristal yapı içerisindeki çizgisel kusurlar olarak dislokasyon fikri ilk olarak 19. yy. sonlarında yapılan gözlemler sonucunda ortaya atılmış, daha sonrasında gelişen teknolojinin yardımıyla Frank 1952 yılında elektron mikroskopu deneylerinde

dislokasyonların varlığını ispatlamıştır [1]. Günümüzün modern teknolojileri sayesinde nano ölçekte nano indentasyon ve çekme deneyleri sonucu oluşan dislokasyonların çeşitli yöntemlerle gözlenmesi mümkündür [2, 3]. Bir çizgisel kristal kusuru olan dislokasyonlar, yük altında hareket ederek birbirleriyle ve diğer kusurlarla etkileşime girmekte ve yoğruk biçim değiştirmede aktif bir rol oynamaktadırlar. Dislokasyonların bu kollektif davranışı öz örgütlü bir şekilde gerçekleşerek çeşitli desenlerin oluşmasına neden olmakta ve dolayısıyla malzemenin makro ölçekteki özelliklerine etki etmektedir. Belirli şartlar altında metalik malzeme içerisinde çok sayıda dislokasyon oluşumu, bu dislokasyonların birbirleriyle ve diğer unsurlarla etkileşimleri, doğrusal olmayan oldukça karmaşık bir sistemdir. Bu karmaşık sistemin modellenmesinde karşılaşılan zorlukların çözümünde izlenen yaklaşımların uygulanabilirlik sınırları bulunmaktadır. Dislokasyonların ilk keşfinden bu yana bu konuda yapılmış olan çok sayıdaki araştırmaya rağmen halen tüm davranış mekanizmaları tam olarak anlaşılabilmiş değildir [4,5,6]. Çalışmaların yetersiz kalmasına neden olan zorluklar aşağıda sıralanmıştır [4].

- Zorlukların başında yoğruk biçim değiştirmenin yüksek miktarda yitirgen ve geri döndürülemez bir süreç olması gelmektedir. Sistemi dengenin dışına iten süreç yeni biçimlenmelerin oluşumuna neden olmaktadır. Ek bir zorluk ise sistem üzerinde yapılan işin yaklaşık % 90'ının ısıya dönüşmesidir.

- Doğrusal dışılıklar, çeşitli uzay-zamansal dislokasyon yapılarında temel rolü oynamaktadırlar. Dislokasyonlar birbirleri ile etkileşime girerken aynı zamanda kristal yapısı ile de etkileşimde bulunmaktadır. Doğrusal olmayan bu süreç, başlangıç şartlarına bağlı olarak önceden kestirilemeyen uzay-zamansal desenlerin oluşumuna neden olmaktadır.

- Isıl dislokasyon süreçlerinin özellikle dislokasyon hızları üzerine etkileri çeşitli deneysel çalışmalarda ortaya konmuştur. Yüksek sıcaklığın yoğrukluk üzerinde önemli etkileri olmasına rağmen, modellenmesinde zorluklar bulunmaktadır.

- Özellikle yüksek gerinme değerlerinde, genel olarak yoğruk biçim değiştirme eşit dağılımlı değildir. Bu durum çeşitli uzunluk ölçeklerinde gerinme yoğun bölgelerin oluşması şeklinde gözlenir. İlgili uzunluk ölçekleri çok küçük

olduğundan basit uzaysal ortalama doğru ortalamayı temsil etmez. Çok sayıda bağlantılı olayı içeren kollektif davranışın temelinde bulunan mikrodan mezoya ve makro ölçeklere geçiş boyunca bu zaman ve uzunluk ölçekleri evrilmektedir. Bu nedenle uzunluk ve zaman ölçeklerinin kademeleri üzerinde ortalamanın hesaplanmasında zorluklar bulunmaktadır.

- Sıradüzensel yapı içerisinde farklı ölçekteki oluşum elemanlarının birleştirilmesinde teknik zorluklar bulunmaktadır.

Dislokasyonların kristal yapı içerisinde kollektif hareketi karmaşık bir sistemdir ve karmaşık sistemlere ait olan temel özelliklerin büyük bir bölümünü içermektedir. Bu özellikler şu şekilde sıralanabilir:

- Doğrusal dışılık : Dislokasyonların kristal yapı içinde birbirleri ile olan etkileşimleri doğrusal değildir [4].

- Belirme : Yerel düzeyde dislokasyonların hareketi ve birbirleri ile olan etkileşimleri toplu düzeyde desenlerin belirmesine neden olur. Desenler mikroyapı ve dolayısıyla malzemenin genel özellikleri üzerinde etkili olurlar [7].

- Geri bildirim : Uygulanan dış yükleme sonucu dislokasyonların malzeme içinde çoğalması pozitif geri bildirim oluşturmaktadır. Bu, zaman içerisinde malzemenin yoğruk biçim değiştirmesine, devamında da hasara uğramasına neden olmaktadır. Pozitif geri bildirim esnek bölgede malzemenin soğuması ile karşılanır [8].

- Sıradüzensel yapı : Dislokasyonların tekil hareketleri sonucu ortaya çıkan duvar ve hücre gibi yapıların kendilerine özgü davranışları bulunmaktadır. Bu, dislokasyonların toplu hareketini başlatmakta ve çığ benzeri çoğalmalara neden olmaktadır [9].

- Açıklık : Yükleme altında bulunan malzeme termodinamik olarak açık bir sistemdir. Dislokasyonların hareketi sonucu ortaya çıkan ısı kristale, oradan da çevreye doğru akar [4].

- Devingen yapılar : Yükleme tipine, miktarına ve hızına bağlı olarak dislokasyonlar tarafından oluşturulan yapılar uzaysal ve zamansal olarak

değişkenlik göstermektedirler [4]. Örnek olarak, belli bir yüklemeye sonucunda oluşan uzaysal yapı, zaman içinde yüklemenin arttırılması ile farklı bir çekim noktasına doğru hareket ederek dengeye ulaşmaktadır.

- Kademeli hasar : Pozitif geri bildirim; malzemenin kademeli olarak şekil değiştirmesine ve en sonunda hasar görmesine neden olmaktadır. Denge dışı gerilmeler sonucu oluşan kusurlar, bunların pozitif geri bildirim ile artmakta ve kırılmaya neden olan ön yapılarının birleşmesiyle yoğruk biçim değiştirme veya yorulma olayı oluşmaktadır [8].

- Sınırların belirlenmesi : Problemi analiz etmekteki sınırların belirlenmesinde zorluklar bulunmaktadır. Her ölçekte uygulanabilecek kuramlar birbirinden farklıdır ve bu kuramların sınırları gözlemci tarafından belirlenmektedir.

Karmaşık sistemlerin incelenmesinde çeşitli uygulamalar bulunmaktadır. Bunlardan bazıları ekolojik ve biyolojik sistemlerden esinlenilerek, düşünme ve karar verme yeteneğinden yoksun canlı ve cansız sistemlerin sanki bu yeteneklere sahipmiş gibi modellenmesiyle oluşturulmuştur. Bu fikir kök hücrelerin çoğalmasının modellenmesinde [10], parçacıkların hareket modelinde [11], akışkanlar mekaniğinde girdap yöntemlerinin birleştirilmesinde [12], tane büyümesine ilişkin eğitim malzemelerinin hazırlanmasında [13] ve dislokasyonların hareketinin hücresel otomata ile modellenmesinde [14, 15] kullanılmıştır.

Etmen Tabanlı Modelleme ve Benzetimi (E.T.M.B.) bir bilgisayarlı benzetim yöntemidir. Yapay zeka ile birlikte bilgisayar bilimlerinde olgunlaştırılan etmen kavramının fiziksel, biyolojik, ekonomik ve sosyal alanlarda, çok sayıda bileşenin birbiri ile etkileşimde bulunduğu sistemlerin modellenmesine uyumlulaştırılmasıdır. E.T.M.B.'de temel fikir karmaşık sistemlerin, bütünü göremeyen otonom elemanlarla (etmen) tanımlanması ve aralarındaki ilişkilerin kurallarla oluşturulmasıdır. Biyolojik sistemlerden esinlenilerek oluşturulan etmenler sanal dünyada sanki algılama, karar verme ve eylem yapma yeteneklerine sahipmiş gibi davranarak hareket etmekte, birbirleriyle ve çevreleriyle etkileşimde bulunmaktadırlar. Bu şekilde karmaşık ve öz örgütlü sistemlerin modellenmesi ve bilgisayar ile benzetiminde, genel matematiksel kuramların geliştirilmesine destek olacak şekilde E.T.M.B. umut vaat eden bir yaklaşım olarak ortaya çıkmaktadır [16].

Dislokasyonların sayıları ve karmaşıklığı göz önüne alındığında pratik olarak tüm sistemi ele almak olanaklı değildir. Yapılan basitleştirmeler ve soyutlamalar ile modeller ve benzetimler karmaşık sistemlerin toplu davranışını anlamak için önemli bir araçtır. Dislokasyonların kollektif davranışları ve desen oluşumunun modellenmesinde çeşitli bilgisayar benzetim yaklaşımları kullanılmasına rağmen etmen yaklaşımının kullanıldığı bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu bağlamda E.T.M.B.'nin diğer yaklaşımlardan farkları şunlardır:

- Genelde benzetimdeki etmenlerin gözlenen gerçek sistemde birer karşılıkları olduğundan modelleme ve benzetim sonuçlarının gerçek sistemle ilişkilendirilmesi daha kolay olmaktadır.

- Sistemi oluşturan bileşenlerin kendi aralarında ve çevreleri ile olan doğrusal olmayan etkileşimleri kurallar yoluyla etmenler üzerinden tanımlanmaktadır.

- Bileşenler belirli bir sıradüzen içinde yer alıyorlarsa her bir seviyedeki farklı etmenlerin ve aralarındaki sıradüzen ilişkilerinin tanımlanması yoluyla bu sistemlerin modellenmesi gerçekleştirilebilmektedir.

- Yazılım mühendisliğinden gelen pratiklerle oluşturulan sistem analiz yaklaşımı (etmen, çevre ve etkileşimlerin yapısal ve davranışsal modellenmesi) ve nesneye dayalı tasarım (object oriented design) özelliği sistem bileşenlerinin ve ilişkilerinin daha kolay ve sistematik bir şekilde ortaya çıkarılmasını sağlamaktadır.

- Modellerin biçimsel olarak yazılması sistematik yaklaşımı güçlendirmekle beraber onların diğer modelcilerle paylaşımını da kolaylaştırmaktadır.

Bu çalışma kapsamında, dislokasyonların kollektif davranışı ve desen oluşumunun modellenmesi için geliştirilen dislokasyon dinamiği, E.T.M.B. yaklaşımı ile yeniden yorumlanmıştır. Geliştirilen bilgisayar benzetimi ile, bakır ve alüminyum tek kristal malzemeler içinde yer alan dislokasyonlar birer etmen olarak tanımlanarak, 2 boyutlu bir ortamda, oluşumları, kristal içerisindeki hareketleri, diğer kusurlarla etkileşimleri sonucunda beliren öz örgütlü desenlerin oluşumu zamana bağlı ve kural tabanlı olarak modellenmiştir. Çevresel ve etkileşime ait değişkenlerin ve diğer varlıklarının desen oluşumuna etkisi incelenerek yaklaşımın uygulanabilirliği sınanmıştır.

Model, Repast Symphony adlı, hazır bir etmen tabanlı benzetim çerçeve yazılımı ile Java programlama dilinde kodlanarak, bir elektronik laboratuvar geliştirilmiştir. Zamana bağlı olarak etmenlerin etkileşiminin benzetimi ve 2 boyutlu hareketleri grafiksel olarak gerçekleştirilmiştir. Geçerleme amaçlı seviyelendirilmiş bir yöntem kullanılarak yazında bulunan diğer modelleme yaklaşımlarının ve deneysel çalışmaların sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

Geliştirilen dislokasyon davranış modelleme yaklaşımının;

- Bir çok faktörün katılımı ile çok yönlü etkileşim sağlanarak karmaşık yoğruk davranışın modellenmesinde,
- Bir sanal laboratuvar olarak mezo seviyede değişik modellerin farklı parametrelerle çalıştırılarak yoğruk biçim değiştirme mekanizmalarının daha iyi anlaşılmasında,
- Çok işlemcili paralel hesaplama teknikleriyle 3 boyutlu ve büyük ölçekli yapıların (milyonlarca etmen) plastik davranışının modellemesinde,
- Çoklu ölçek modellemelerinde diğer modelleme yaklaşımlarıyla bir uyum içerisinde mezo ölçekteki modellemelerde,
- Temel yoğruk davranış mekanizmaların öğretiminde bir eğitim destek aracı olarak

kullanılabileceği değerlendirilmektedir.

Birinci bölümde dislokasyonların araştırılmasının tarihçesi, genel dislokasyon bilgileri, dislokasyon desenleri için geliştirilen modeller ve bilgisayar benzetimleri konusunda bilgi verilmiştir.

İkinci bölümde dislokasyonların kristal içerisinde hareketini Newtoncu bakış açısıyla ele alan ve dislokasyonlar arası etkileşimi tanımlayan dislokasyon dinamiği konusunda bilgi verilmiştir.

Üçüncü bölümde E.T.M.B. konusunda bilgi verilerek bu yaklaşımın, dislokasyon dinamiği metodolojisi yardımıyla desen oluşumunun modellenmesinde kullanımı anlatılmıştır. Öncelikle Çoklu Etmen Sistemleri'ni (Ç.E.S.) oluşturan temel ilke ve

kavramlar tanımlanarak bunların dislokasyon desen oluşumu modelinde kullanımı biçimsel olarak verilmiştir.

Dördüncü bölümde geliştirilen Dislokasyon Desen Modeli'nin Repast benzetim aracı kullanılarak gerçeklenmesi, doğrulama ve geçerlemesi anlatılmıştır.

Beşinci bölümde geliştirilen modelin bazı problemler yoluyla sınanması ele alınmıştır. Bu kapsamda yükleme ve sıcaklık çevresel değişkenleri, yok olma mesafesi ve diğer etmen olarak engellerin dislokasyon desenlerine etkileri incelenmiş ve elde edilen sonuçlar verilmiştir.

1. KRİSTAL MALZEMELERDE DİSLOKASYONLAR

Dislokasyonlar kristal metallerde yoğruk şekil değiştirmenin en önemli taşıyıcıları olarak kabul edilmektedirler. Metallerde mekanik davranışın temel kavramlarının anlaşılmasında dislokasyonların oluşum ve yayılma mekanizmaları büyük yer tutmaktadır. Yoğruk davranıştan sorumlu olduklarından dislokasyon davranışlarının incelenmesi malzemelerin mekanik özelliklerinin daha iyi anlaşılmasını ve kontrol edilebilmesini sağlayacaktır. Bu bölümde dislokasyonların araştırılmasının tarihçesi, genel dislokasyon bilgileri, dislokasyon desenleri ve geliştirilen modeller ve bilgisayar benzetimleri konusunda bilgi verilmiştir.

1.1. Tarihsel Bakış

1905 yılında Volterra'nın kristallerde dislokasyon teorisi çalışmalarının ardından dislokasyonların kristal yoğrukluğun en önemli mekanizmasını oluşturduğu fikri 1934 yılında Orowan, Polanyi ve Taylor tarafından aynı zamanda ortaya konulmuştur [17].

Dislokasyonlar malzemenin serbest yüzeyine ulaştıklarında bu bölgedeki kimyasal ve mekanik özelliklerini değiştirmektedirler. Bu bölgeler dağlandığında dağlama noktaları oluşmaktadır. 1850'lerde bu noktalar gerçek nedenleri anlaşılmadan sıkça gözlenmişler ve kristalografi alanındaki bilgi birikimini arttırmışlardır. Bu gözlemler ve birikim 19. yy.'ın sonlarında dağlama noktaları ile kristalografik bozukluklar arasındaki bağın kurulmasını sağlamıştır.

1920'lere gelindiğinde bir kafes kusurunun kristal yoğrukluğuna ve pekleşmeye neden olduğunu açıklayan hiçbir model bulunamamıştır. Diğer bir tutarsızlık atomların yer değiştirmesi için gerekli kuramsal gerilmenin deneysel olarak gözlenenden çok büyük olmasıdır.

Taylor, kusursuz kristalin çok büyük gerilmelere dayanabileceği kabulüyle başlayarak kristallerin gözlenen zayıflığının yerel gerilme konsantrasyonlarından kaynakladığı fikri üzerinde çalışmıştır. 1934 yılında yayınlanan makalesinde

dislokasyonu birim kayma olarak tanımlamış ve hareketi için düşük gerilme değerleri gerektiğini ortaya koymuştur. Çoklu dislokasyonlara ait gerilme alanlarının etkileşimiyle artan gerilmenin gerinme pekleşmesini açıkladığını göstermiştir.

Orowan'ın başlangıç noktası mekanik yerine termodinamik olmuştur. Orowan kristal maddelerdeki kaymanın, kayma düzleminin komşuluğundaki ani dalgalanmaların sonucu olduğundan başlayarak, bu dalgalamaları oluşturacak kadar yüksek gerilme konsantrasyonlarından özel bir takım kafes kusurlarının sorumlu olduğunu düşünmüştür.

Polanyi'nin aynı yıl yayınladığı çalışmasındaki vurgusu kayma için gerekli olan gerilme konsantrasyonlarından küçük çatlakların sorumlu olduğudur. Taylor'unkine benzer olarak yapmış olduğu hesaplamada bir dislokasyonu hareket ettirmek için gereken gerilmenin düşük olduğunu belirtmiştir [18].

1934 yılındaki bu dönüm noktasından sonra ilerlemeler çok hızlı bir şekilde ardı ardına gelmiştir. 1952 yılında Frank ilk defa dislokasyonların varlığını elektron mikroskobunu kullanarak göstermiştir [1]. Dislokasyonların çoğalması, birbirleriyle olan etkileşimleri, mekanik özellikler ve yeniden kristalleşme üzerindeki etkileri üzerine kuramlar önerilmiştir. Son yıllarda deney ekipmanlarında ve bilgisayar hesaplama gücündeki başdöndürücü gelişmeler yardımıyla dislokasyonların kristal yapı içerisindeki hareketleri hakkında bilgiler de büyük ilerleme kaydetmiştir. Günümüzün modern teknolojileri sayesinde nano ölçekte nano indentasyon ve çekme deneyleri sonucu oluşan dislokasyonların çeşitli yöntemlerle gözlenmesi mümkündür [2, 3].

1.2. Kristal Kusurları ve Dislokasyonlar

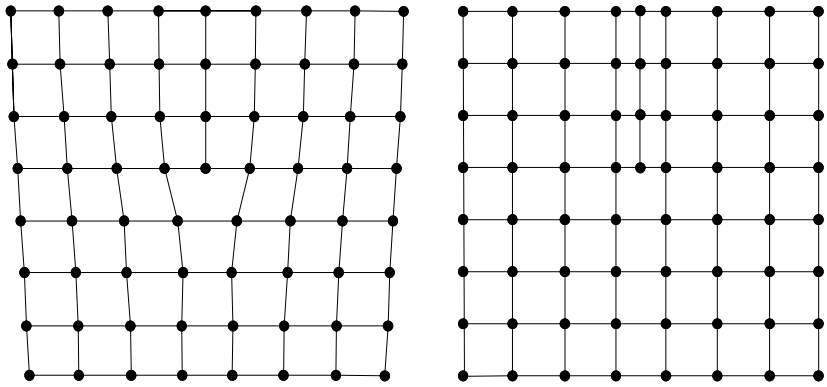
Tüm kristaller kusurlar içerirler. Kristal yapısındaki atomların dizilimini yerel olarak bozan bu kusurlar genellikle boyutlarına göre sınıflandırılırlar. Bunlar aşağıdaki gibi sıralanabilirler:

- Noktasal (sıfır boyutlu) kusurlar (Boşluklar, arayer ve katışkı atomları)
- Çizgisel (tek boyutlu) kusurlar (Dislokasyonlar)

- Yüzeysel (iki boyutlu) kusurlar (Tane sınırları)
- Hacimsel (üç boyutlu) kusurlar (Çökeltiler)

1.2.1. Dislokasyonlar

Dislokasyonlar kristallerde bulunan çizgisel kusurlardır. Basit olarak kenar ve vida dislokasyonları olmak üzere iki tipe ayrılırlar.



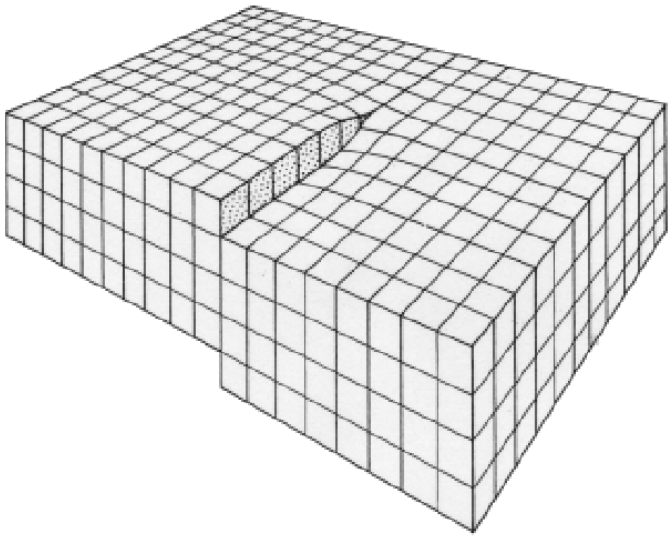
(a) (b)

Şekil 1.1. Bir kenar dislokasyonunun geometrisi

Şekil 1.1a'da bir kenar dislokasyonu gösterilmiştir. Burada dislokasyon kağıda dik yönde atomik yerleşimin düzenli olduğu bir basit kübik kafes içinde bulunmaktadır. Şekil 1.1b'de gösterildiği gibi bir kenar dislokasyonu kusursuz kristal içerisine ek olarak atomlardan oluşan bir yarı düzlemin yerleştirilmesi olarak düşünülebilir. Yerleştirme sonrasında kafesin büyük miktarda çarpıldığı yer kenar dislokasyonudur.

Şekil 1.2'de diğer bir tip olan vida dislokasyonu gösterilmektedir. Bir vida dislokasyonu, kristalin yöneldiği yöne paralel doğrultuda olan dislokasyondur. Bu dislokasyon türünde kafes düzlemi kendisine dik olan dislokasyon çizgisi etrafında spiral şeklini alır.

Kristallerde dislokasyonların hareketi ve etkileşimleri yoğruk biçim değişimine neden olur. Tek kristallere gerilme uygulandığında eğer gerilme yeterince yüksekse yoğruk biçim değişimi oluşur. Ancak, bir kusursuz kristal için kuramsal kayma gerilmesi gerçekte olduğundan bir kaç kez daha yüksektir. Taylor, Orowan ve Polanyi gerçekte oluşan gerilme değerinin düşüklüğünü dislokasyonlara bağlamışlardır.

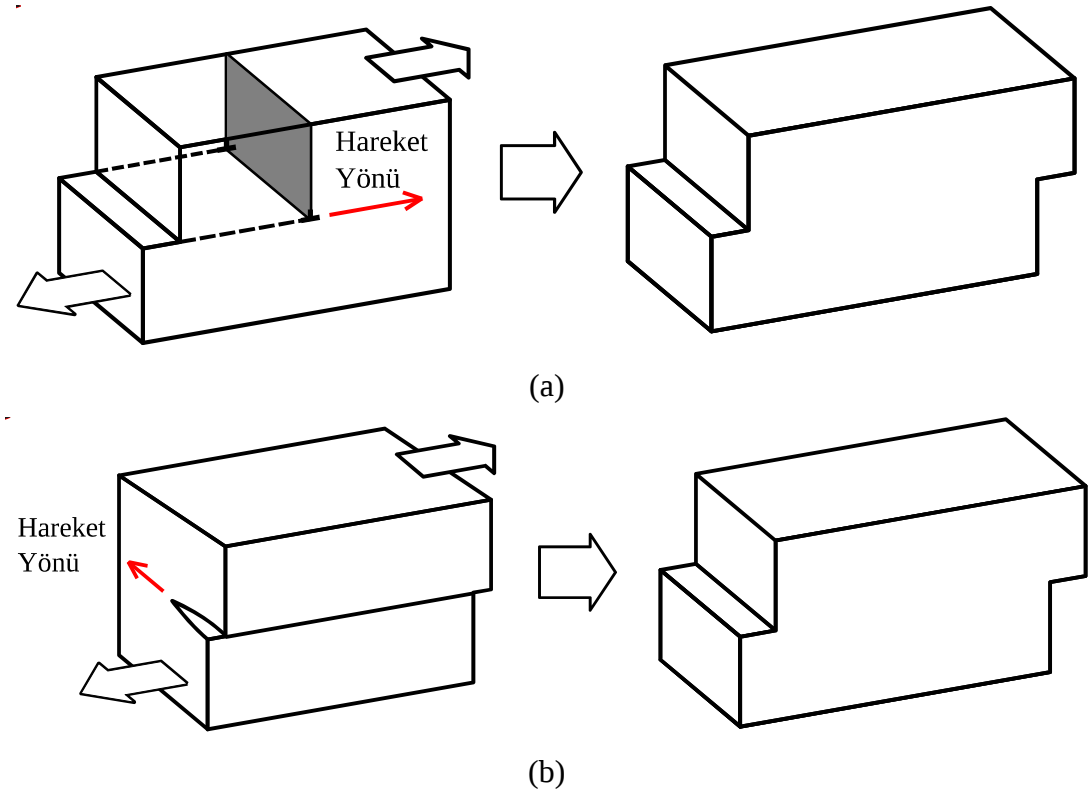


Şekil 1.2. Vida dislokasyonunun geometrisi

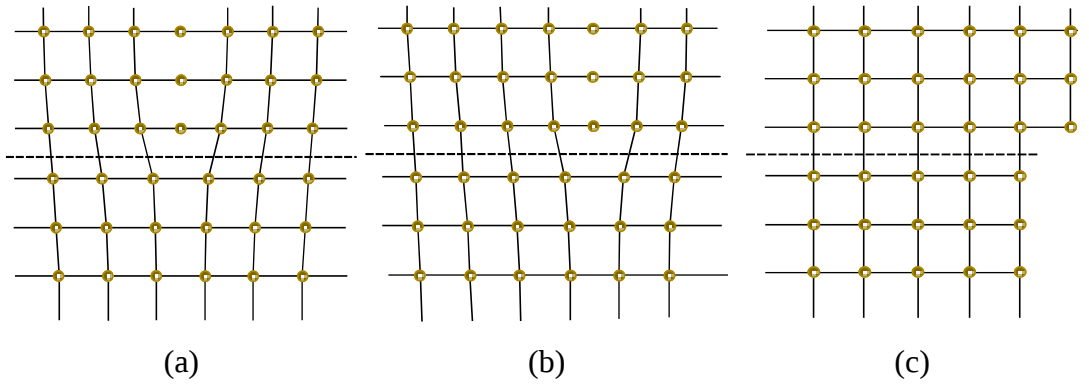
Şekil 1.3'de dislokasyonların kayma gerilmesi altında hareketleri gösterilmiştir. Kenar dislokasyonları kayma gerilmesine paralel hareket ederken vida dislokasyonları kayma gerilmesine dik olarak hareket etmektedir.

Şekil 1.4'de bir kenar dislokasyonunun ayrıntılı hareketi gösterilmiştir. Kenar dislokasyonu kağıda diktir ve atomik yerleşim bu doğrultuda düzenlidir. Kenar dislokasyonuna yakın bölgede yapı oldukça çarpılmışken uzakta atomik yerleşim kusursuz kristale yaklaşmaktadır. Uygulanan bir kayma gerilmesi altında, dislokasyona yakın bölgede A ve C atomları arasında bağ oluşur, B ve C atomları arasındaki bağ ise kopar (Şekil 1.4 (a) ve (b)). Bu yolla kenar dislokasyonu bir kafes boşluğu kadar hareket eder. Dislokasyon kristal sınırına ulaştığında Şekil 1.4 (c)'de gösterildiği gibi orada bir basamak oluşur ve kristal plastik şekil değişimine uğrar.

Burgers vektörü bir dislokasyonu karakterize etmek için kullanılır. Şekil 1.5 (a)'da içinde dislokasyon bulunmayan bir kafes düzlemi gösterilmiştir. *A* noktasından başlayan kapalı döngü yine *A* noktasında sona ermektedir. Şekil 1.5 (b)'de ise bir kenar dislokasyonunun kapalı döngüsü gösterilmiştir. Kenar dislokasyonu kağıda diktir ve ek yarı düzlemdeki atomlar kenar dislokasyonunun üzerindedir.

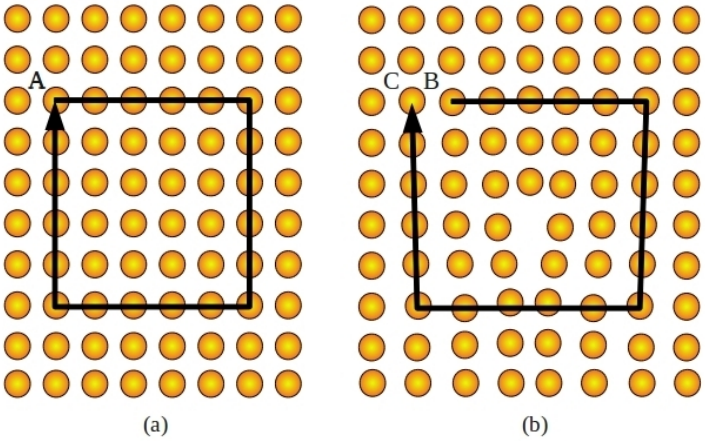


Şekil 1.3. Dislokasyonların kayma gerilmesi altında hareketi, a) kenar dislokasyonu, b) vida dislokasyonu



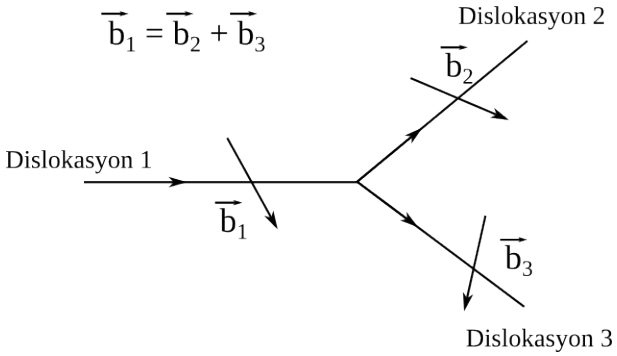
Şekil 1.4. Bir kenar dislokasyonunun ayrıntılı hareketi

Dislokasyonu çevreleyen kapalı döngü Burgers devresi olarak adlandırılmaktadır. Bu kenar dislokasyonunun yönü kağıttan dışa olarak kabul edilirse Burgers devresi saat ibrelerinin tersi yönündedir. Eğer bu devre atom sıralı olarak kusursuz bir kristale taşınırsa aynı şekilde kapanmaz. Bu devreyi kapatmak için *B*'den *C*'ye olan vektör, $\vec{b}$ ile gösterilen Burgers vektörüdür. Bir kenar dislokasyonunun Burgers vektörü kendisine dikken vida dislokasyonununki kendisine paraleldir.



Şekil 1.5. Burgers vektörünün tanımlanması, a) dislokasyon olmayan kafes düzlemi, b) dislokasyon bulunan kafes düzlemi

Burgers vektörü dislokasyon çizgisi boyunca sabittir. Dislokasyon çizgileri tek kristalin veya tanelerin sınırında sonlanabilir, ancak içerde sonlanmaz. Bu çizgiler bir kristal içerisinde ya döngüler oluşturabilirler ya da üç veya daha fazla dislokasyon çizgisinin buluştuğu dislokasyon düğümlerinde sonlanırlar.



Şekil 1.6. Dislokasyon düğümü

Şekil 1.6'da 1 no'lu dislokasyonun 2 ve 3 no'lu dislokasyonlara ayrıldığı düğüm gösterilmiştir. Burada Burgers vektörlerinin korunumu verilmiştir. Genel olarak *n* adet dislokasyonun buluştuğu bir düğümde tüm dislokasyonlar düğüme doğru ise Denklem (1.1) eşitliği elde edilir. Burada $\vec{b}_i$ *i*'inci dislokasyonun Burgers vektörüdür.

$$\sum_{i=1}^{n} \vec{b}_i = 0 \tag{1.1}$$

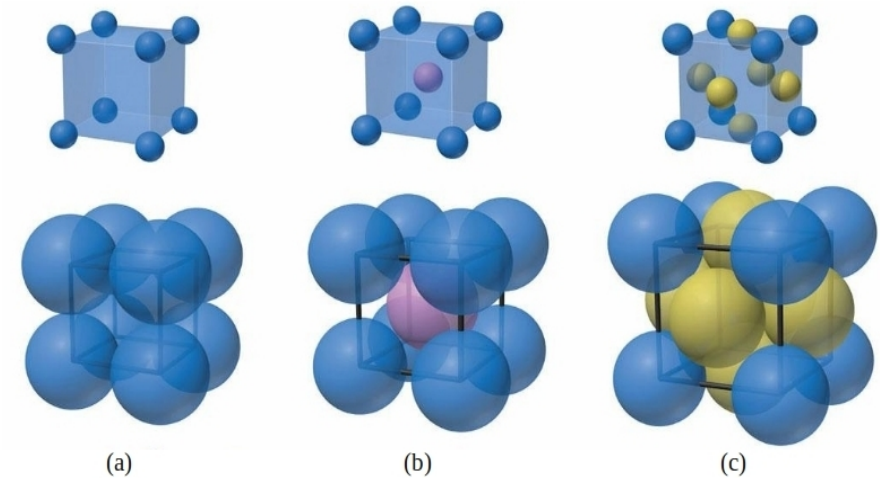
Yukarıda belirtildiği gibi bir kenar dislokasyonu, uygulanan gerilmenin etkisiyle

Burgers vektörünü ve kendisini içeren bir düzlemde hareket edebilir. Şekil 1.4'deki kesikli çizgi atomların ek yarı düzlemine dik olan bu düzlemin yerleşimini göstermektedir. Dislokasyonu ve onun Burgers vektörünü içeren düzlem dislokasyonun kayma düzlemidir ve bu kayma düzlemindeki harekete de kayma adı verilir.

1.2.1.1. Kristal kafesler

Kafes yapılar içindeki atomların düzeni dislokasyon hareketinin meydana geldiği kayma düzlemlerini belirler. Şekil 1.7'de gösterilen Y.M.K. ve H.M.K. kafes yapıları bir çok metal malzemede görülmektedir. Bu yapıların doğası birbirinden farklı olduğundan kayma düzlemleri de farklılık göstermektedir.

Çok fazla sayıda kayma sistemine sahip olduklarından dolayı Y.M.K. malzemeler genel olarak sünektirler. Hemen hemen tüm dislokasyon hareketleri {111} düzlemlerinde sınırlandırılmıştır. Her bir düzlemde dislokasyonlar üç farklı Burgers vektörüne sahip olabilirler. Sonuç olarak Y.M.K. malzemelerde 12 adet kayma sistemi oluşur.

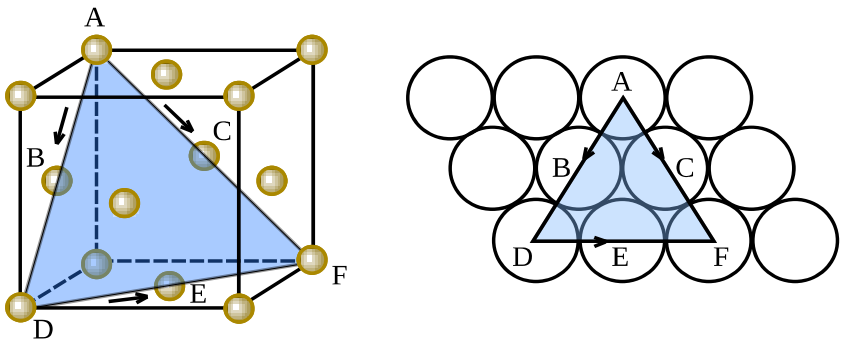


Şekil 1.7. En yaygın kafes yapılarına ait birim hücreler. (a) Basit Kübik, (b) Hacim Merkezli Kübik (H.M.K.), (c) Yüzey Merkezli Kübik (Y.M.K.)

H.M.K. yapılar sıkı paket olmadıkları için daha karmaşıktırlar. Tablo 1.1'de H.M.K. ve Y.M.K. kristallerindeki kayma sistemleri verilmiştir. Şekil 1.8'de Y.M.K. yapılarına ait birincil kayma sistemi gösterilmiştir.

Tablo 1.1. H.M.K. ve Y.M.K. kristal yapılarının birincil, ikincil ve diğer kayma sistemleri

Kristal Yapı	Birincil Kayma Sistemi	İkincil Kayma Sistemi	Diğer Kayma Sistemi
H.M.K.	{110}<$\bar{1}$11>	{211}<$\bar{1}$11>	{321}<$\bar{1}$11>
Y.M.K.	{111}<1$\bar{1}$0>		



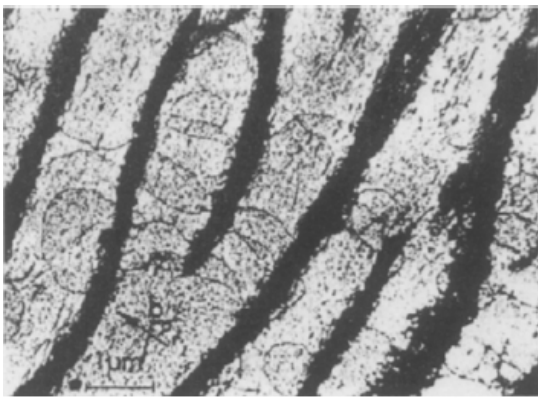
Şekil 1.8. Y.M.K. kristal yapısının {111}<110> kayma sistemi

1.3. Dislokasyonların Kollektif Davranışı ve Desen Oluşumu

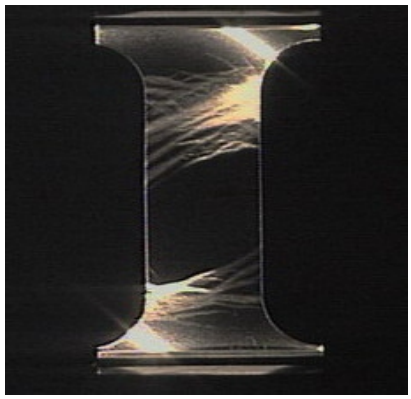
Yoğruk biçim değiştirmenin, doğrusal dışılıkların temel rolü oynadıkları yüksek miktarda yitirgen, geri döndürülemez ve denge dışı bir süreç olduğu bilinmektedir [4]. Süreklilik kabulü ile birlikte biçim değişiminin düşük seviyelerinde, değişimin düzgün dağılımlı olması beklenir. Ancak biçim değişiminin şartlarına ve malzeme seçimine bağlı olarak 2 ve 3 boyutlu duvar, damar, labirent ya da hücre tipindeki desenler gözlenmiştir [19,20]. Bu desenler dislokasyonların mikroskopik seviyedeki kollektif davranışı nedeniyle oluşmaktadır. Bunlar ilişkili zaman ve uzunluk ölçekleri temel alınarak sınıflandırılabilirler. Şekil 1.9'da çeşitli çalışmalarda gözlenen bazı dislokasyon desenleri verilmiştir.

Örnek olarak, çoklu kayma koşullarında Y.M.K. metallerde gözlenen hücre yapıları ve tekrarlı biçim değiştirmede uzun zaman ölçeklerinde gözlenen Kalıcı Kayma Bantları (K.K.B.) verilebilir. Diğer taraftan tek eksenli çekme deneylerinde gözlenen ve Lüders bantları olarak adlandırılan yayılmacı (propagative) bantların bir tipi kısa zaman ölçeği ile karakterize edilmektedir. Burada tek bir bant, sabit gerilme seviyesinde sanki yalnız bir dalga gibi numune boyunca yayılmaktadır. Bu olay kısa zaman ölçeğinde de oluşan bir desenin yayılabildiğini gösteren bir örnektir. Diğer bir karmaşık uzay-zamansal desen, belirli gerinme hızları ve sıcaklıklardaki seyreltik

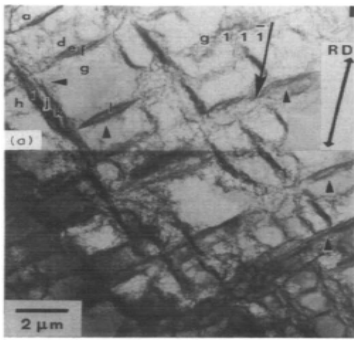
metalik alaşımların çekme deneylerinde görülmektedir. Bu olay Portevin-Le Chatelier etkisi olarak bilinmektedir. Portevin-Le Chatelier etkisinde tekdüze biçim değiştirme modu kararsız olur ve sonucunda uzaysal ve zamansal olarak düzgün dağılımlı olmayan bir duruma yol açar. Zamansal etki kendini gerilme-gerinme eğrilerindeki tırtık biçiminde gösterir ve ilişkili yerel biçim değiştirme bantları çıplak gözle görülür [4].



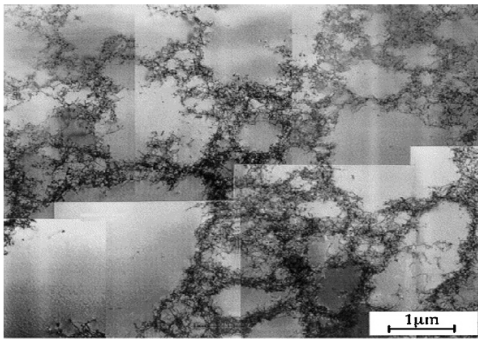
(a) Kalıcı Kayma Bantları [19]



(b) Lüders bantları



(c) Haddeleme sonrası saf nikelde oluşan labirent şeklinde desen [14]



(d) Biçim değiştirmiş bakırda oluşan hücresel desen [20]

Şekil 1.9. Çeşitli çalışmalarda gözlenen bazı dislokasyon desenleri

1.3.1. Dislokasyonların diğer kusurlarla etkileşimi

Dislokasyonlarla noktasal kusurlar arasındaki etkileşimler plastik davranışın anlaşılması bakımından önemli konulardan biridir. Dislokasyonların kayma hareketi özellikle katışkı atomları ya da dislokasyon ormanları ile engellendiğinde yüksek sıcaklıklarda boşluklarla olan etkileşim sonucu tırmanma hareketi oluşur. Bu etkileşim aynı zamanda faz dönüşümlerinde de önemli bir rol oynar [21].

Dislokasyonlar ile noktasal kusurlar arasındaki etkileşimler aşağıda verilmiştir [22]:

1. Birinci derece boyut etkileşimleri
2. İkinci derece boyut etkileşimleri
3. Tekdüze olmama etkileşimi
4. Elektriksel etkileşimler
5. Kimyasal etkileşimler
6. Snoek sıralaması
7. Kusurların titreşim modları ile ilgili etkileşimler

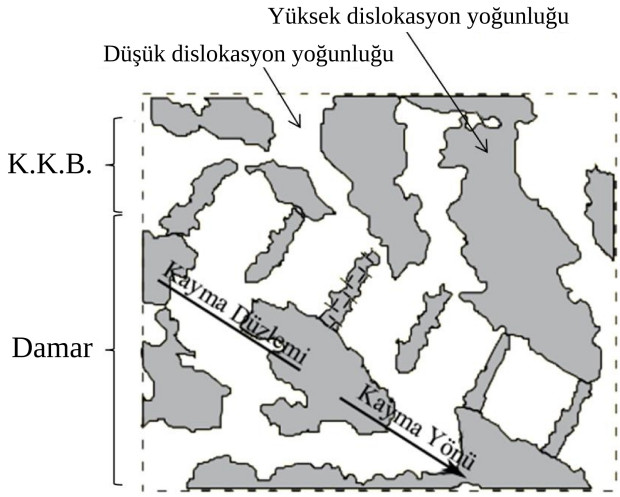
1.3.2. Kalıcı kayma bantları yapıları

Y.M.K. ve H.M.K. metal ve onların bazı alaşımlarının çevrimsel biçim değiştirme sırasında oluşan dislokasyon düzenlerinde en ilginç dizilimler, düşük ve orta seviye sıcaklıklarda ve düşük plastik gerinme genlikleriyle düşük çevrimli yorulmada bulunmuştur. Artan plastik gerinme genliğiyle, tek kaymaya göre yerleştirilmiş Y.M.K. tek kristalleri (Cu, Ni, Ag) başlangıç rastgele mikroyapıdan ortaya çıkan iki tip organize yapı göstermektedir: matris yapısı ve Kalıcı Kayma Bantları (Persistent Slip Bands) (K.K.B.). K.K.B. oluşumu şematik olarak Şekil 1.10'da ve tekrarlı biçim değiştirme sonucunda bakırda oluşan K.K.B. ise Şekil 1.11'de gösterilmiştir.

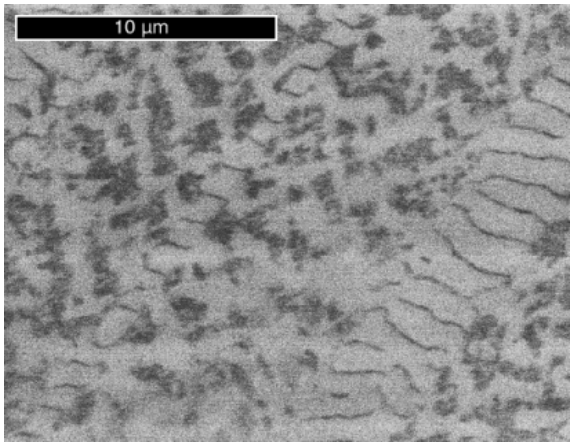
Genel olarak K.K.B. desenlerinde kenar ve vida dislokasyonları karışmadan bulunmaktadırlar. Kenar dislokasyonları yoğun çift kutuplu dizilimler şeklinde örgütlenmektedir. Bunlar vida dislokasyonlarına göre daha zor bir şekilde karşılıklı olarak birbirlerini yok etmekte ve bu nedenle daha yüksek ortalama yoğunlukta bulunmaktadırlar.

Yoğun çift kutuplu dizilimler vida dislokasyonlarının dolaştığı boş kanalları sınırlandırarak plastik gerinme hızının bir bölümünü taşımaktadırlar. Bir yarım çevrim boyunca kenar dislokasyonların ortalama gidimi (mean free path) ortalama ayrıklığı aştığında Şekil 1.11'de görülen matris yapı oluşur. Sonrasında aşma gerilmeleri (passing stress) uygulanan gerilmeden daha küçük olan kararlı çift

kutuplular oluşabilir. Bu yapı kalın çift kutuplu damarların düzensiz diziliminden ve tipik genişliği 1 μm civarında olan kanallardan oluşmaktadır. Bu oluşum Şekil 1.12'de verilen gerilme-gerinme eğrisinin ilk aşamasında (A) gözlenmektedir [7].



Şekil 1.10. K.K.B. oluşumunun şematik gösterimi [7]

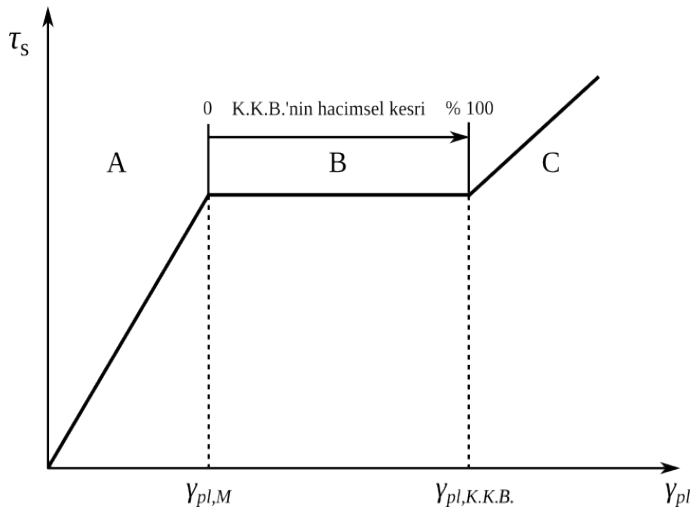


Şekil 1.11. Tekrarlı yükleme sonucunda bakırda oluşan K.K.B. [7]

Plastik gerinme genliği arttırıldığında zaman içinde matris yapısından K.K.B.'ın bulunduğu yapıya bir geçiş oluşur. Bu bantlar aktif kayma düzlemine paralel, 1-2 μm kalınlığında ve tüm kristal boyunca bulunan ince tabakalardır. K.K.B. ismi, yüzey parlatma yoluyla yok edildikleri halde çevrime devam edildiğinde aynı yerde tekrar görüldükleri için verilmiştir. Şekil 1.12'de gösterilen B bölgesindeki doyma düzlüğü boyunca matris yapısının bölgesel kararsızlaşmasıyla K.K.B. oluşmaktadır. Plastik

gerinme genliği arttırıldıkça, zorlanan plastik gerinme hızını karşılamak için sabit doyma gerilmesi altında matris yapı içinde yeni K.K.B. çekirdeklenmektedir.

K.K.B. etkin olduğunda oluşan çevrimsel gerilmenin doyması mikroyapısal dinamik kararlı duruma ulaşıldığını göstermektedir ya da K.K.B. yüksek çevrim sayıları boyunca yapılarında belirgin bir değişiklik olmadan işlevselliklerini devam ettirebilmektedirler.



Şekil 1.12. İdeal gerilme - gerinme eğrisi [7]

Plastik gerinme genliği 10^{-2} değerine ulaştığında deney örneği tamamen K.K.B. ile dolmaktadır. Bu değerin ötesinde K.K.B. zorlanan plastik gerinmeyi karşılayamaz ve karasız duruma geçerler. Şekil 1.12'deki eğrinin üçüncü aşamasında (C) ikincil kayma sistemleri etkinleşerek hücre yapılarının oluşumuna neden olurlar [7]. Sadece bir etkin Burgers vektörü ve sabit karakteristik gerilme altında düzenli yapıyla ilişkili dinamik kararlı durumun varlığı, K.K.B.'nin modellenmesini çekici kılmaktadır.

1.3.3. K.K.B.'deki dislokasyon mekanizmaları

K.K.B. üzerinde yapılan deneysel çalışmalar dislokasyon mekanizmalarının anlaşılmasına yardımcı olan kesin sonuçlar ortaya koymuştur. Doyma aşaması boyunca genel desen hemen hemen değişmemekte ve çift kutuplu dizilimlerindeki kenar ve vida dislokasyonlarının yoğunlukları çoğalma ve yok etme arasındaki dengenin sonucu olarak sabit kalmaktadır. Vida dislokasyonları duvarlardan yayılan halkalarla çoğalmakta ve karşılıklı olarak geçişli kayma (cross slip) ile yok olmaktadırlar. K.K.B.'nin dinamiği ile ilgili olan çalışmalarda vida dislokasyonlarının

yok olması kritik yok olma mesafesi (critical annihilation distance), y_s ile gösterilir. Kayma düzlemleri y_s'den daha küçük olan vida dislokasyonları birbirlerini geçişli kayma ile yok ederler. Bu uzunluk ölçeği halihazırda var olan ve dislokasyonların elastik kuramına dayanan geçişli kayma modelleri ile tahmin edilememektedir. Ancak atomik ölçekte yapılan benzetim çalışmaları ile bu konuya çözüm aranmaktadır [7].

Kenar dislokasyonlar vida dislokasyonlarının hareketi nedeniyle duvarlarda birikirler ve yoğunlukları sonsuza kadar artamayacağından gerilme etkisiyle oluşan yıkım mekanizmasına ek olarak bir yok olma mekanizmasının bulunduğu ileri sürülmüştür. Tırmanmanın etkin olmadığı düşük sıcaklıklarda bile yeterli yüksekliğe sahip çift kutupluların nokta kusurlarına ayrışması mümkündür. Bu sürecin tamamen mekanik ve sıcaklıktan bağımsız bir şekilde olduğu ileri sürülmüştür. Elastik etkileşim gerilmesi kristalin kuramsal limitiyle karşılaştırılabilir duruma geldiğinde çift kutuplunun ayrıştığı düşünülmektedir. Kenar dislokasyonlar için kritik yok olma mesafesi, y_e bakır için oda sıcaklığında 1,5-2 nm'dir. Ancak kenar çift kutupluların yok olma mekanizması henüz tam olarak anlaşılamamıştır [7].

1.4. Dislokasyon Desenlerinin Modellenmesi

Dislokasyon desen oluşumu, yoğruk akış sırasında dislokasyonların örgütlü mikroyapısının kendiliğinden belirmesi ve evrilmesi sürecidir. Bu tarz kollektif etkiye neden olan dislokasyon dinamiğinin ve karşılıklı etkileşimlerin anlaşılması dislokasyon kuramındaki en temel problemlerden biridir. Bu tekdüze olmayan örgütlü yapıları tanımlamak için çok sayıda model önerilmesine rağmen, bu öz örgütlü olayın tam olarak anlaşılması sağlanamamıştır.

Dış gerilmenin etkisi altında güçlü bir şekilde etkileşime giren dislokasyon yerleşimlerinin evrilmesini modellemek çoklu cisim (many-body) problemidir. Dislokasyonlar arası uzak mesafeli etkileşim ve yüksek serbestlik derecesi problemin kuramsal incelemesini oldukça zorlaştırmaktadır. Dislokasyon desenlerinin ve buna bağlı yoğunlukların uzaysal ve zamansal evrilmesinin incelenmesi uygun bir yaklaşım olarak görülmektedir [23]. Bu bağlamda aşağıda bugüne kadar geliştirilmiş klasik ve devingen modeller kısaca verilmiştir.

1.4.1. Klasik Modeller

Düşük enerjili dislokasyon yapıları (L.E.D.S.) Kulhman-Wilsdorf tarafından önerilmiştir [24]. Bu modelde, verilen bir yoğunluk biçimlenmesinin dislokasyonların birim uzunluğu başına toplam elastik enerjisini en aza indirecek şekilde dizildiği ilkesi kabul edilmiştir. Termodinamik benzerlik üzerine kurulan bu yaklaşımın iki şartı bulunmaktadır. Birincisi, elastik enerjideki yerel değişim hızlarını etkin bir şekilde azaltmak için, dislokasyonların uygulanan net kuvvet doğrultusunda hareket etmesini sağlayacak şekilde sıcaklığın yeterince yüksek olmasıdır. İkincisi, dislokasyonların tamamen yok olmasını önlemek için dislokasyon yoğunluğunu yerel olarak sabitleyecek bir kısıt bulunmasıdır.

L.E.D.S. yaklaşımının statik tanımlaması, modele dinamik tanımlamanın da katılmasıyla Holt tarafından iyileştirilmiştir [25]. Model dislokasyon desen oluşumu ve faz sınırı ayrıştırması arasındaki benzerliği temel almıştır. Aynı Burgers vektörüne sahip olan sonsuz uzunlukta, paralel ve kristal içinde rastgele dağılmış vida dislokasyonlarından oluşan 2 boyutlu bir sistem oluşturulmuştur. Bu dağılım uygulanan dış gerilmenin olmadığı durumda, sadece elastik eşli etkileşimlerin etkisi altında gelişmeye izin vermektedir. Birbirini yok etme ve dislokasyonların çoğalması bulunmamakta ve dislokasyon yoğunluğu sabit olarak alınmaktadır.

Statik veya enerjetik yaklaşımların ötesine geçen kinematik ve istatistiksel bir model ilk olarak Kock tarafından önerilmiştir [23]. Hücre yapısının oluşumuna neden olan olayların sıralamasını tanımlamaktadır. Başlangıç noktası, sabit yoğunluklu noktasal engeller arasından ilerleyen dislokasyonların hareketinin 2 boyutlu benzetimleridir. Hareket boyunca, bir hareketli dislokasyon kayma direncindeki dalgalanmalar ile karşılaşır.

Mughrabi tarafından önerilen birleşik model [19] tam olarak dislokasyon desen oluşumuna yönelik değildir. Bununla birlikte, dislokasyon desen oluşumu ile ilişkili uzak mesafeli iç gerilmeler için olası bir çıkış noktasını vurgulamaktadır. Mikroyapının sürekli ortam tanımıyla, şekil değiştiren malzeme katı (dislokasyon zengin bölgeler) ve yumuşak yoğruk (kanallar ve hücre içleri) fazlardan oluşan iki fazlı bir malzeme gibi görülebilir. Arayüzlerdeki gerinim sürekliliği isteri zorunlu olarak ek uyumluluk gerilmelerini içerir.

1.4.2. Devingen Modeller

Walgraef ve Aifantis tarafından geliştirilen tepki-yayınım modelinde toplam yoğunluk tekrarlı gerilme şartlarına maruz kalan hareketli ve hareketsiz olmak üzere iki gruba ayrılmıştır [23].

Kratochvil modelinde, tepki-yayınım modeline benzer olmakla birlikte dislokasyon mekanizmalarının daha ayrıntılı tanımlanmasıyla çift kutuplu desen oluşumu tekrar incelenmiştir [23].

Essmann ve Differt tarafından geliştirilen iki boyutlu model, K.K.B.'nin duvar bileşeninin özelliklerinin anlaşılması için tekil ve çift kutuplu dislokasyonların beraber evrimini içermektedir. Modelin geliştirilmesi, gerilme altındaki ve hareketli dislokasyonlarla olan etkileşimlerine yok etme özelliklerinin eklenmesine ve çift kutuplu dislokasyonların kararlılığına dayandırılmıştır [23].

Häner tarafından olasılıklı dislokasyon dinamiği geliştirilmiştir. Modelde, rastgele dağılıma sahip dislokasyonlar tarafından oluşturulan gerilme alanı dikkate alınmıştır. Bu istatistiksel mekanikteki dalgalanma yayınım kuramına benzer bir ilişkiyle dalgalanan gerinme hızı ile birleştirilmiştir [23].

Groma'nın ortalama alan yaklaşımında tekli kayma sistemlerinde dislokasyon desen oluşumu doğrusallaştırılmış ortalama alan denklemleriyle incelenmektedir [23].

1.4.3. Bilgisayar Benzetimleri

Kuramsal modellerin yanısıra dislokasyon desen oluşumunu incelemek üzere bilgisayar benzetim teknikleri geliştirilmiştir. Genel olarak dislokasyon dinamiği modellerinin büyük bir bölümü, dislokasyon hareketini bir dislokasyon ile gerilme arasındaki doğrudan etkileşimi Peach-Koehler denklemi ile hesaplayan Newtoncu bir modeldir. Bilgisayar benzetimi için uygun olan bu tarz ilk model, Lepinoux ve Kubin tarafından önerilmiştir [26]. Bu modelde paralel düz dislokasyonlar hücresel otomata (Cellular Automata) ile ele alınmıştır. Uzak mesafeli dislokasyon etkileşimi ile birlikte oluşum, yok etme ve dislokasyon hareketleri için kurallar tanımlanmıştır. Tekrarlı dış gerilmenin uygulanması ile periyodik kümelenmeler tespit edilmiştir.

Hücresel otomatada (C.A.) ana fikir, 1940'larda J. Neumann ve St. Ulam tarafından geliştirilen Neumann makinasına kadar gitmektedir. Neumann makinesi bir ızgara üzerinde bulunan hücrelerden oluşmaktadır. Bu ayrıklaştırılmış uzayda, her hücre bir ayrık durum değişkeni ile karakterize edilir. Dinamik ayrık zaman adımlarında oluşur ve komşu hücrelerin durumlarına bağlı olabilir [27].

C.A. mikroskopik yaklaşımda kullanılmasına rağmen karmaşık uygulamalarda bazı eksiklikleri bulunmaktadır. Bunlar şu şekilde sıralanabilir [27]:

- Uzay, zaman ve durum değişkenlerinin ayrıklığı, makroskopik dinamiğin mikroskopik etkileşimlerden elde edilmesini zorlaştırmaktadır.

- Birbirine uzak olan hücreler arasındaki etkileşimi tanımlamak zordur. Bir çok durumda yakın komşu etkileşimleri veya ortalama alan etkileşimleri dikkate alınmaktadır.

- Mikroskopik elemanların özellikleri uzayda yerleri sabit olan hücrelere atanmıştır. Örneğin, hareket eden bir elemanın benzetimi yapılırken, hareket doğrudan elemanın kendi hareketi olarak tanımlanmaz. Bunun yerine, ardışık hücreler işgal edilirken bu amaçla kullanılan bir durum değişkeni geçiş süresi boyunca dolu olur ve sonra eski boş durumuna geri döner.

Dislokasyon dinamiği benzetimlerinde dislokasyonun sürekli hareketi Güllüoğlu ve Amadeo tarafından gerçekleştirilmiştir. Güllüoğlu bir tavlama deneyinde, dislokasyonların elastik etkileşiminin kesilmesinin yapay dislokasyon duvar oluşumuna neden olduğunu göstermiştir [28]. Hesaplama zamanını azaltmak ve dislokasyon duvarlarının işaretlerini tespit etmek için sonlu küme üzerindeki etkileşim için özel bir teknik uygulanmıştır. Amadeo ve Ghoniem sabit veya tekrarlı gerilme uygulanmasıyla başlangıç olarak rastgele dislokasyon dağılımından başlayarak duvar ve hücre biçimleri elde etmişlerdir [29].

Bross ve Sangi [14,15] yaptıkları çalışmalarda desen oluşumunda uzak ve yakın mesafeli dislokasyon etkileşimlerini modellemişler ve bu etkileşimlerin makroskopik ölçekte pekleşmeden sorumlu olduğunu belirtmişlerdir. Dislokasyonların birbirlerine kuvvet uygulamaları uzak etkileşim olarak modellenirken, yakın etkileşimde dislokasyonlarının birleşme ve yok etme özellikleri modellenmiştir [30,31].

Miguel ve arkadaşları [32,33] tarafından sürünme deformasyonuna tabi tutulan buz kristalleri üzerinde yapılan akustik yayılım deneyleri sonucunda dislokasyonların çığ benzeri yeniden yapılanmaları gözlemlenmiştir. Dislokasyonlar ölçekten bağımsız (tüm mikroyapıya dağılmış) kesikli bir şekilde hareket etmektedirler. Buna göre dislokasyonlar hızlı kollektif yeniden yapılanmalarla yavaşça gelişen bir görünüm oluşturmaktadırlar. Bu yeniden yapılanmalar göreceli olarak dislokasyonların küçük bir oranını oluşturmakta ve net plastik cevabın kesikli davranışına neden olmaktadırlar. Ayrıca bu çalışmalarda kesikli çığ büyüklüklerinin üs yasası dağılımına uygun olduğu ve bu sonuçlara dayanılarak yoğruk biçim değişiminin buzun yanısıra diğer malzemeler için de kararsız kritik olaya bağlı olarak tanımlanabileceği belirtilmiştir.

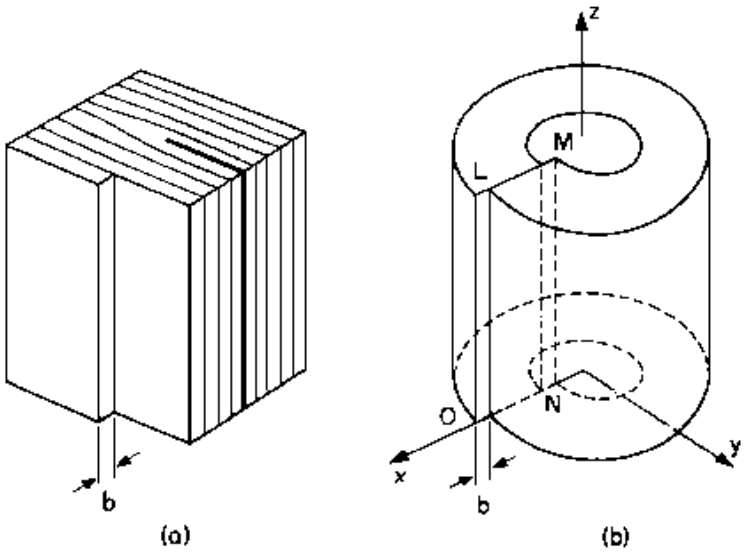
Dislokasyonlar gerilme altında bir engelle karşılaşıncaya kadar kolayca hareket ederler. Bu engeller çökelti, boşluk ve tane sınırı gibi diğer kristal kusurlarıdır. Hareket eden dislokasyon ve yerel engeller arasındaki etkileşim mikroyapı bağlantılı pekleşmeyi doğurmaktadır. Statik ($T = 0° K$) ve dinamik ($T > 0° K$) şartlar altında dislokasyon-engel etkileşiminin atomik ölçekteki karakteristikleri Y.M.K. ve H.M.K. malzemelerde incelenmiştir [5].

2. DİSLOKASYON DİNAMİĞİ

Bu bölümde dislokasyonların kristal içerisinde hareketini Newtoncu bakış açısıyla ele alan ve dislokasyonlar arası etkileşimi tanımlayan dislokasyon dinamiği konusu incelenmiştir.

2.1. Kenar Dislokasyonunun Gerilme Alanı

Sonsuz uzunluktaki bir düz dislokasyonun çevresindeki esnek bozulma esnek malzemeye ait bir silindirin terimleri ile ifade edilebilir.



Şekil 2.1. Kristal içinde kenar dislokasyonunun yarattığı esnek bozulmayı temsil eden izotropik silindir [34]

Şekil 2.1'deki kenar dislokasyonu göz önüne alındığında esnek gerinme alanı, yarık yüzeylerinin *x* ekseni doğrultusunda *b* kadar yer değiştirmesiyle hesaplanabilir. *z* ekseni doğrultusundaki yer değişimi ve gerinmeler sıfırdır. Gerilmeler aşağıdaki gibi elde edilir [34].

$$\sigma_{xx} = -Dy\frac{(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} \tag{2.1}$$

$$\sigma_{yy} = Dy\frac{(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \tag{2.2}$$

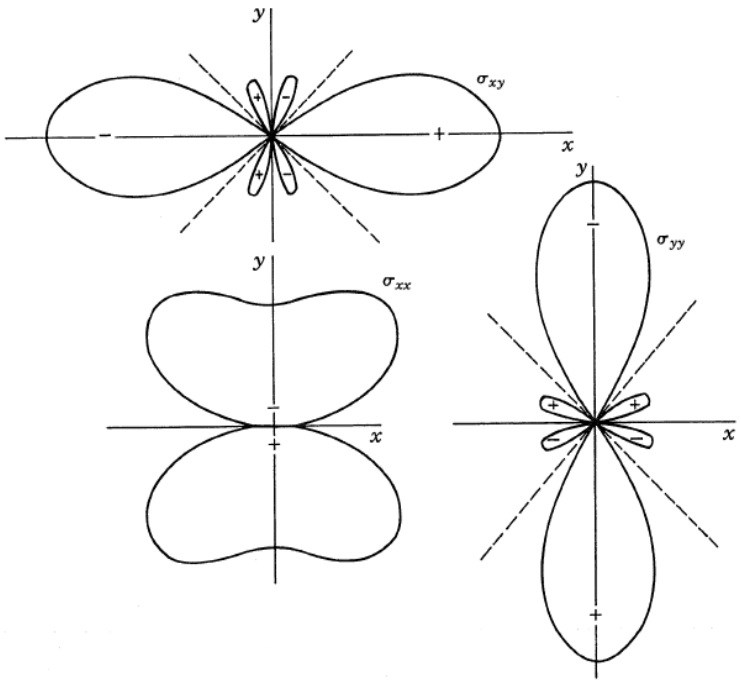
$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = Dx\frac{(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \tag{2.3}$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \tag{2.4}$$

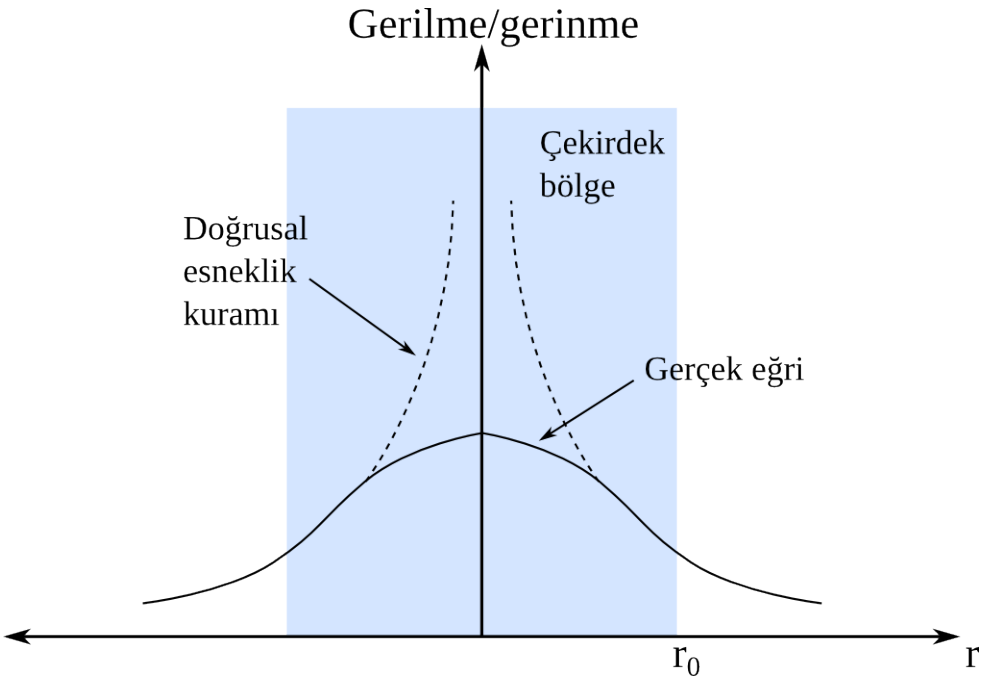
$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0 \tag{2.5}$$

Burada $D = \mu b / 2\pi(1 - \nu)$, μ kayma modülü ve ν Poisson oranıdır.

En büyük normal gerilme kayma vektörüne paralel olan σ_{xx}'tir. Kayma düzlemi $y = 0$ olduğundan, maksimum basma gerilmesi (negatif σ_{xx}) hemen kayma düzleminin üstünde ve maksimum çekme gerilmesi (pozitif σ_{xx}) kayma düzleminin hemen altındadır. Oluşan gerilme alanı Şekil 2.2'de gösterilmiştir.



Şekil 2.2. Kenar dislokasyonunun çevresinde oluşan üç yöndeki esnek gerilme alanı

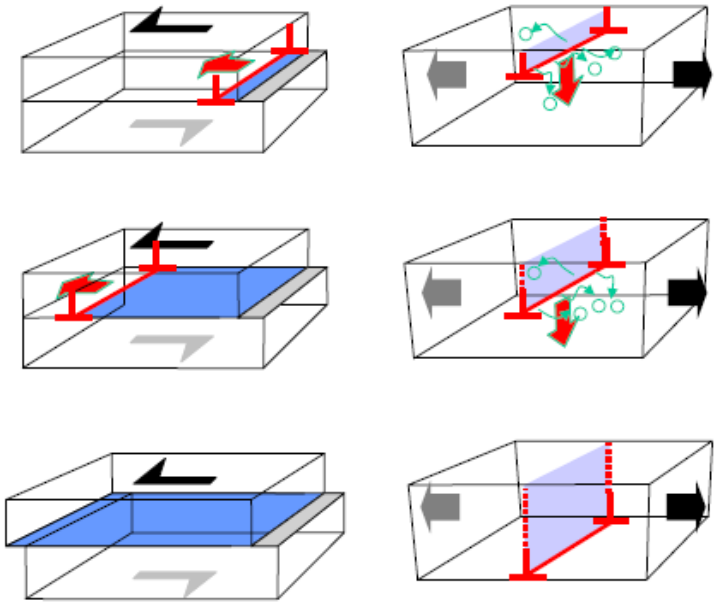


Şekil 2.3. Doğrusal esneklik kuramına göre dislokasyonun çekirdek bölgesinde oluşan süreksizlik

Denklem (2.1) - (2.5) ile verilen gerilme alanı silindirin merkezine doğru gittikçe sonsuza doğru gitmektedir. Dolayısıyla doğrusal esneklik kuramıyla elde edilen gerilme alanı dislokasyon çekirdeğinden belli bir uzaklığa (r_0) kadar geçerlidir. Bu durum Şekil 2.3'te gösterilmiştir.

2.2. Dislokasyon Dinamiği

Moleküler dinamik yaklaşımı parçacık hareketlerinin incelenmesinde başarılı bir şekilde uygulanmaktadır. Bu metodoloji çeşitli araştırmacılar tarafından dislokasyon problemine uyumlulaştırılmış ve Dislokasyon Dinamiği (D.D.) olarak adlandırılmıştır [32, 29]. Bu çerçeve içerisinde dislokasyonların kuvvet etkisi altında hareket eden ve birbirleriyle etkileşimde bulunan birim elemanlar oldukları kabul edilmektedir. Böylece kusurlar üzerindeki kuvvetlerin fonksiyonuna bağlı olarak dislokasyon dağılımının mezo ölçekte uzay zamansal gelişiminin incelenmesi mümkün olmaktadır. D.D. çerçevesi iki ana başlık altında toplanmaktadır. Birinci başlık, dislokasyonlar üzerine etki eden uzak mesafeli kuvvetleri ele almaktadır. İkincisi ise doğrusal olmayan olayların yer aldığı dislokasyon çekirdeği seviyesinde oluşan yakın mesafeli etkileşimleri açıklamaktadır.



Şekil 2.4. Kenar dislokasyonu üzerindeki kuvvetler

2.2.1. Uzak mesafeli etkileşim

Şekil 2.4'te bir kenar dislokasyonuna etkiyen kuvvetler sonucunda kayma ve tırmanma hareketleri gösterilmiştir. Bu uzak mesafeli kuvvetleri üç ana bileşene ayırmak mümkündür:

- Dislokasyonlar arası etkileşimler
- Dislokasyonlar ile dış gerilme etkileşimi
- Dislokasyonlar ile kristal yapı arasındaki etkileşimler

Bir dislokasyonun kristal içerisindeki varlığı bir şekil değişimi bölgesi oluşturmaktadır. Bu bölge iki bölüme ayrılabilir. Bunlardan birincisi dislokasyonun merkezine yakın ve yoğruk biçim değişiminin etkin olduğu bölge, diğeri ise doğrusal esneklik kuramının uygulanabileceği elastik bölgedir. Eğer dislokasyonun merkezi sıkıştırılamaz olarak kabul edilirse bir kenar dislokasyon tarafından oluşturulan gerilme bölgesi elastik olarak ele alınabilir [35]. Bu durumda biharmonik denklemin bir çözümü tarafından karşılanan düzlem biçim değiştirme denklemleri kullanılabilir.

$$\nabla^4 \chi = 0 \tag{2.6}$$

Silindirik koordinatlarda esnek gerilme alanı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\sigma_{rr}=\frac{1}{r}\frac{\partial \chi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \chi}{\partial \theta^2} \tag{2.7}$$

$$\sigma_{rr}=\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} \tag{2.8}$$

$$\sigma_{r\theta}=-\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \chi}{\partial \theta}\right) \tag{2.9}$$

Yukarıdaki denklemlerin çözümü için aşağıdaki fonksiyonlar kullanılabilir ve *r* için kısmi diferansiyel denklemler çözülür.

$$\chi=R(r)\Theta(\theta) \tag{2.10}$$

Bu yolla bir pozitif kenar dislokasyonu için aşağıdaki çözüm elde edilir.

$$\chi=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}r\ln r\sin\theta \tag{2.11}$$

Burada, μ kayma modülü, ν Poisson oranı, b Burgers vektörü şiddeti ve θ *ij* doğrultusu ile Burgers vektörü arasındaki açıdır. Bu durumda silindirik koordinatlarda esnek gerilme alanı Denklem (2.12) ile hesaplanır:

$$\|\sigma_{ij}\|=\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)r_{ij}}\begin{pmatrix}-\sin\theta & \cos\theta & 0\\ \cos\theta & -\sin\theta & 0\\ 0 & 0 & -2\nu\sin\theta\end{pmatrix} \tag{2.12}$$

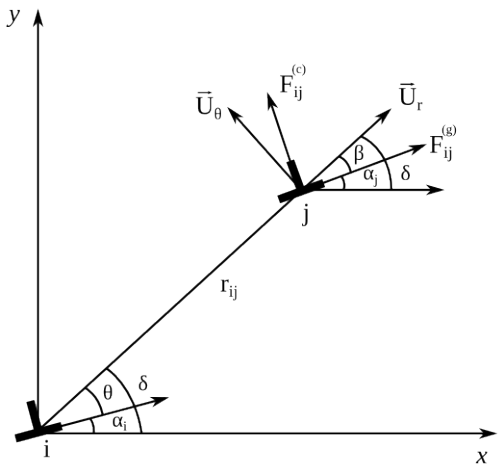
i dislokasyonu üzerinde *j* dislokasyonu tarafından oluşturulan kuvvet Peach-Koehler denklemi ile hesaplanır:

$$\vec{F}_{ij}=(\vec{b}\,\overline{\sigma_{ij}})\times\vec{L}_j \tag{2.13}$$

Şekil 2.5'te gösterildiği gibi, *z* yönünde *i* ve *j* dislokasyonları birbirine paralel olduğu için kuvvetler *(r, θ)* düzleminde düşünülebilir. Bu durumda referans düzlemde *j* dislokasyonuna etki eden kuvvetler şu şekilde hesaplanır:

$$\vec{F}_{ij}(r,\theta)=\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)r_{ij}}\begin{pmatrix}\cos\theta\cos(2\beta)\\ \sin\theta+\sin(2\beta)\cos\theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}F_{ij}^{g}\\ F_{ij}^{c}\end{pmatrix} \tag{2.14}$$

Burada F_{ij}^{g} kayma, F_{ij}^{c} tırmanma bileşenlerini temsil etmektedir. Tırmanma bileşeni yüksek sıcaklıklarda aktive olur ve noktasal kusurların yayınımı ile ilişkilidir.



Şekil 2.5. İki kenar dislokasyonu arasındaki Peach-Koehler kuvveti

Genel olarak yoğruk biçim değişimi dış bir kuvvetin varlığı ile oluşabilmektedir. Bu kuvvet tekdüze şekilde artan ya da tekrarlı olabilir. Dış kuvvet etkisinde bir dislokasyon üzerinde oluşan kuvvet şu şekilde hesaplanır [35]:

$$\vec{F}_{dış}=(\vec{b}_i\,\overline{\sigma_{dış}})\times\vec{L}_i \tag{2.15}$$

Dislokasyonlar üzerine etkiyen diğer bir kuvvet de sürtünme kuvvetidir. Sürtünme gerilmesi kayma düzleminde her zaman dislokasyon hareketinin tersinedir ve çeşitli faktörlerle ilişkilidir. Bu faktörler kristal kafes etkisi, çökeleklerin varlığı ve diğer dislokasyonların etkisi olarak gösterilebilir. Y.M.K. malzemeler için sürtünme kuvveti H.M.K. malzemelere göre göreceli olarak düşüktür ($10^{-5}\mu$, burada μ kayma modülüdür) [35].

2.2.1.1. Hareket denklemi

Yukarıda verilmiş olan kuvvetlerin etkisi altında her bir dislokasyonun hareket denklemi hesaplanmalıdır. Kenar dislokasyonu Burgers vektörüne paralel olarak kayma düzlemi üzerinde hareket edebilir. Bu durumda *i* dislokasyonu üzerine etkiyen toplam kuvvet Denklem (2.16) ve (2.17) ile hesaplanır [35].

$$\vec{F}_i = \sum_j m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \tag{2.16}$$

$$\vec{F}_i = \sum_j \vec{F}_{ij}^{\,iç} + \vec{F}_{dış} - \vec{F}_{sürtünme} \tag{2.17}$$

Burada dislokasyonların doğrusal kütlesinden kaynaklanan ataletsel etkiler önemsiz oldukları için $m_i = 1$ alınarak ihmal edilmiştir [35].

Dislokasyon hızları ses hızından düşük olduğunda uygulanan gerilmeyle orantılıdır. Bu durumda, akışkan içinde hareket eden bir cismin hareketine benzer biçimde (Newton ağdalı malzemesi) dislokasyonun hareketinin sönümlendiği kabul edilerek [36] Denklem (2.16)'de verilen hareket denklemi,

$$\vec{v}_i = \frac{\vec{F}_i}{B} \tag{2.18}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada, $\vec{v}_i$ kenar dislokasyonuna ait hız vektörü, B sönümlenme katsayısıdır. Sönümlenme katsayısı temel olarak fonon ağdalığı, elektron ağdalığı ve kalıntı etkilerinden oluşmaktadır.

2.2.1.2. Isıl etkilerle hareket

Dislokasyonların hareketi gerilmeye bağlı olduğu kadar sıcaklığa da çok bağlıdır. Deneysel çalışmaların çoğunluğu düşük dislokasyon hızlarının olduğu bölgelerde yapılmıştır. Düşük hızlı dislokasyon hareketinin sıcaklık ile olan bağıntısı için Arrhenius tipi model çok yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu modelde ısıl olarak etkinleştirilmiş dislokasyon hızı şu şekilde hesaplanabilir [35]:

$$\vec{v}_i = v_0 \left[e^{\left(-\frac{\Delta G_0 - \Delta G}{kT}\right)} - e^{\left(-\frac{\Delta G_0 + \Delta G}{kT}\right)} \right] \tag{2.19}$$

$$\Delta G = \Delta G_0 \left(1 - \left(1 - \frac{\tau}{\tau_0}\right)^{p\ q}\right) \tag{2.20}$$

Burada v_0 sabit hızı, k Boltzman sabitini, T °K cinsinden sıcaklığı, ΔG_0 0°K'deki toplam aktivasyon enerjisini, τ_0 0°K'deki efektif kayma gerilmesini, ΔG uygulanan işi, p ve q sabitleri belirtmektedir.

2.2.2. Yakın mesafeli etkileşim

Dislokasyon çekirdeğinden bir kaç Burgers vektörü uzaklıkta dislokasyonun etrafındaki yer değiştirme alanı doğrusal esneklik ile hassas bir şekilde tanımlanamamaktadır. Dislokasyon çekirdeği olarak adlandırılan bu bölgede doğrusal esneklik kuramı geçersiz kalmaktadır [29].

Deneysel çalışmalar dislokasyon çekirdeğinde bir çok doğrusal olmayan, karmaşık atomik yeniden yerleşimlerin varlığını göstermiştir. Bu süreçler kuvvet-biçim değişimi ilişkisinden çok olaybilimsel olarak tepkiler yoluyla açıklanabilmektedir. Bu doğrusal olmayan tepkiler birer ayrık olarak aşağıdaki gibi tanımlanabilirler.

2.2.2.1. Durma (Immobilization)

Eğer hareketli bir dislokasyon üzerindeki gerilme sürtünme gerilmesinden düşükse dislokasyon durur. Bir dislokasyon durduğunda hızı sıfır olur. Bir hareketsiz dislokasyon uzak mesafeli etkileşim ile esnek enerji oluşumuna ve dolayısıyla iç gerilme hesabına katkıda bulunur. Hareketsiz dislokasyonlar üzerlerindeki gerilme sürtünme gerilmesinden fazla olduğunda tekrar hareketli duruma geçerler.

2.2.2.2. Yok olma (Annihilation)

Eğer aynı kayma düzlemi üzerinde yer alan iki dislokasyon zıt Burgers vektörlerine sahiplerse ve kritik mesafenin altında birbirlerine yaklaşmışlarsa yok olurlar.

2.2.2.3. Kitlenme (Locking)

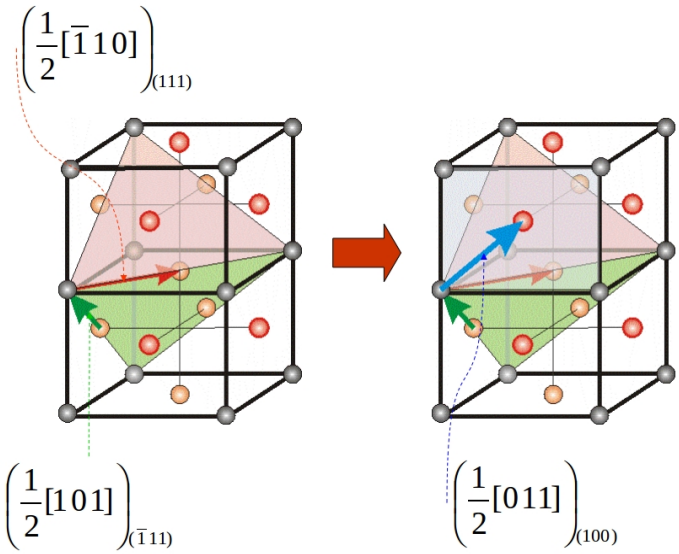
Farklı kayma düzlemlerinde etkileşimdeki iki dislokasyon kritik mesafenin altında birbirlerine yaklaşmışlarsa birbirleri ile kesişeceklerdir.

Eğer dislokasyonlar birbirlerine paralel ve zıt Burgers vektörlerine sahiplerse yok olacaklardır. Eğer Burgers vektörleri paralel değilse üç durumdan biri oluşacaktır : (a) İkisi de kilitlenir ve Lomer-Cottrell engeli oluştururlar; (b) birbirlerini uzatarak basamak oluştururlar; (c) kesişirler ve birbirlerini geçerler.

Eğer iki dislokasyondan biri üzerindeki net gerilme Denklem (2.21) ile verilen kilitlenme gerilmesinden büyükse birbirlerini geçerler [29].

$$\sigma_p = \frac{\mu b}{2\pi\lambda_d} \tag{2.21}$$

Burada, λ_d dislokasyonlar arası ayrılma mesafesidir.

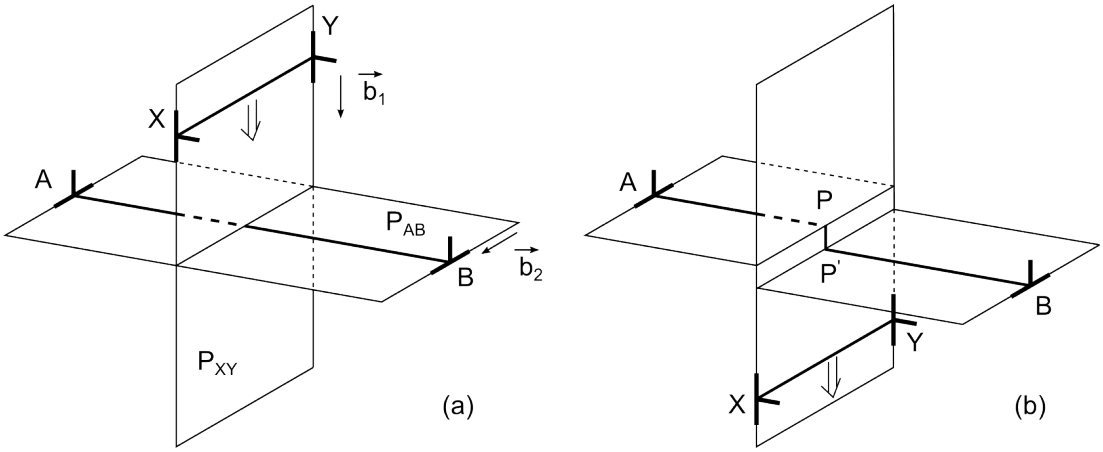


Şekil 2.6. Lomer-Cottrell engelinin oluşumu

Lomer-Cottrell engelinin oluşumunda Şekil 2.6'da gösterildiği gibi farklı kayma düzlemlerindeki iki dislokasyon birbirlerini çekerek ve kesişim hattına doğru ilerler ve burada enerjilerini azaltmak amacıyla etkileşime girip üçüncü bir dislokasyonun oluşumuna neden olurlar. Bu üçüncü dislokasyon hareketsizdir ve diğer dilsokasyonların hareketine engel oluşturur.

Dislokasyonlar belirli düzlemlerde uygulanan kayma geriliminin etkisiyle serbestçe kaymaktadırlar. Çok iyi tavlanmış kristaller bile dislokasyon ağı içerdiğinden her bir kayma düzlemi dislokasyonlar tarafından işgal edilmekte ve bir kayma düzleminde ilerleyen bir dislokasyon diğer kesişen kayma düzlemlerinde ilerleyen dislokasyonlarla kesişmektedir. Bu kesişim süreci orman dislokasyonları (forest dislocations) olarak adlandırılır. Yoğruk şekil değişimi ilerledikçe diğer kayma sistemlerinde de kayma oluşarak bir sistemin kayma düzlemi diğer sistemlerin kayma düzlemleri ile kesişir ve bunun sonucunda orman dislokasyonlarının sayısı artar. Kaymanın kolaylığı, büyük ölçüde kayan dislokasyonların orman dislokasyonları tarafından oluşturulan bariyerleri aşmalarına bağlıdır. Artan gerinim ile kristalde dislokasyon yoğunluğu arttığından kesişim süreci gerinmeye bağlı

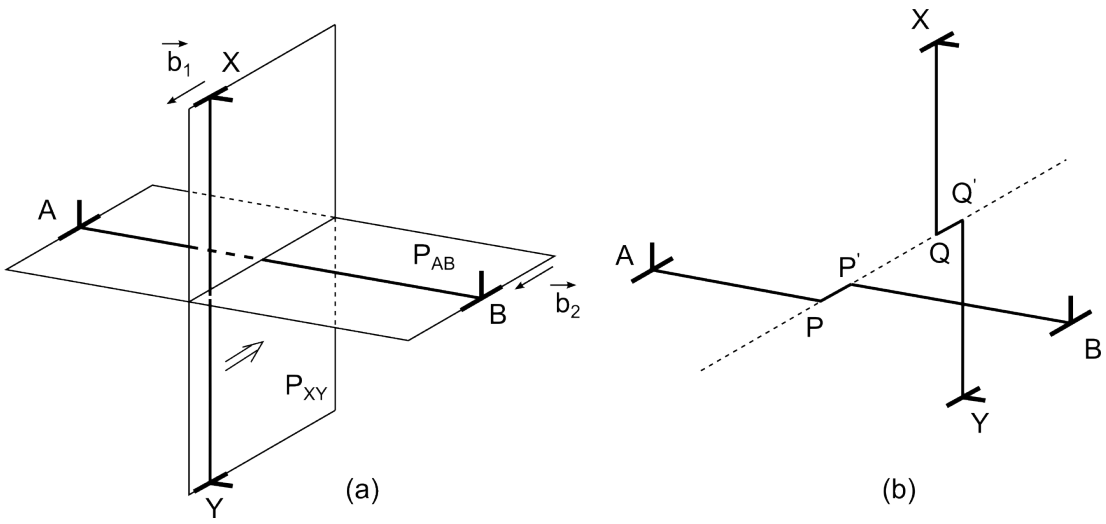
sertleşme oranını etkiler. Kesişim sürecinin temel özellikleri, dikey düzlemlerde hareket eden düz dislokasyonların kesişme geometrisi göz önüne alınarak daha kolay anlaşılabilir [34].



Şekil 2.7. Birbirine dik Burgers vektörlerine sahip iki kenar dislokasyonunun kesişimi

Burgers vektörleri birbirine dik olan iki kenar dislokasyonunun kesişimi Şekil 2.7'de verilmiştir. $\vec{b}_1$ Burgers vektörüne sahip *XY* kenar dislokasyonu P_{XY} düzleminde kaymaktadır. Bu dislokasyon P_{AB} düzlemindeki $\vec{b}_2$ Burgers vektörüne sahip *AB* dislokasyonunu keser. P_{XY} düzleminin bir tarafındaki atomlar $\vec{b}_1$ kadar yer değiştirdiğinden kesişim *AB* dislokasyonundaki $\vec{b}_1$'e paralel *PP'* basamağına neden olur. Basamak *AB* dislokasyonunun bir parçasıdır ve $\vec{b}_2$ Burgers vektörüne sahiptir. Ancak basamağın uzunluğu b_1'e eşittir. *AB* dislokasyonunun Burgers vektörü *XY*'e paraleldir ve *XY* dislokasyonunda basamak oluşmamıştır. *AB* dislokasyonunun toplam uzunluğu b_1 şiddeti kadar artmıştır. Bir dislokasyonun birim uzunluğu için enerji $\alpha G b^2$ olduğundan basamağın enerjisi, komşu dislokasyonların elastik etkileşimi ihmal edildiğinde $\alpha G b^3$'dir. Ancak ayrık olmayan bir dislokasyondaki basamak toplam dislokasyonun küçük bir uzunluğudur ve uzak mesafe elastik enerji pratik olarak yoktur ($\alpha << 1$). Bu durumda enerji çoğunlukla dislokasyonun çekirdek enerjisi ile belirlenir. $\alpha = 0{,}2$ olarak alınabilir [34].

Diğer durumları analiz etmek için şu kural kullanılabilir : İki dislokasyon kesiştiğinde her biri diğerinin Burgers vektörü uzunluğunda ve doğrultusunda bir basamak elde eder.



Şekil 2.8. Birbirine paralel Burgers vektörlerine sahip iki kenar dislokasyonunun kesişimi

Paralel Burgers vektörüne sahip iki dikey kenar dislokasyonunun kesişimi Şekil 2.8'de gösterilmiştir. Basamaklar her iki dislokasyonda da oluşmuştur. *QQ'* basamağının boyu b_2 şiddetine ve *PP'* basamağının boyu b_1 şiddetine eşittir. Kesişimin sonucu olarak enerjideki artış bir önceki kesişim tipine göre iki kat daha fazladır.

2.2.2.4. Çift kutuplu (Dipole) oluşumu

Zıt Burgers vektörüne sahip olan iki dislokasyon birbirlerine yaklaştıklarında eğer yok olma için gerekli olan kritik mesafeden uzaklarsa kararlı bir biçimlenme oluştururlar. Bu biçimlenme çift kutuplu olarak adlandırılır ve bir boşluk veya arayer tipi biçimlenme gibi varolabilir. Çift kutuplular sadece kenar dislokasyonlarından oluşurlar, çünkü vida dislokasyonları karşı kayma yoluyla kolayca yok olurlar. Çift kutuplu bir kez oluştuktan sonra iç veya dış gerilmeler değişmedikçe hareket etmez.

Çift kutuplu oluşumu için iki dislokasyonun uygun mesafede olması yeterli değildir. Çift kutuplu oluşumu için dislokasyon üzerindeki gerilme Denklem (2.22) ile verilen geçiş kayma gerilmesinden düşük olmalıdır.

$$\tau_p \simeq \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)y} \tag{2.22}$$

Burada, *y* kayma düzlemi mesafesidir.

Zıt kutuplu iki dislokasyonun kusursuz bir şekilde hizalanması gerekli değildir. Gerçekte bir çift kutupluyu oluşturan iki dislokasyon arasındaki göreceli açı ortalama 45° olmakla beraber 25° ile 65° arasında değişmektedir [29].

2.2.2.5. Çoğalma (Multiplication)

Kaymada dislokasyon çoğalması birincil olarak Frank-Read mekanizması ile oluşmaktadır. Çoğalma ayrıca Bardeen-Herring mekanizması olarak bilinen tırmanma yoluyla da gerçekleşmektedir. Her iki mekanizma aşağıda kısaca açıklanmıştır.

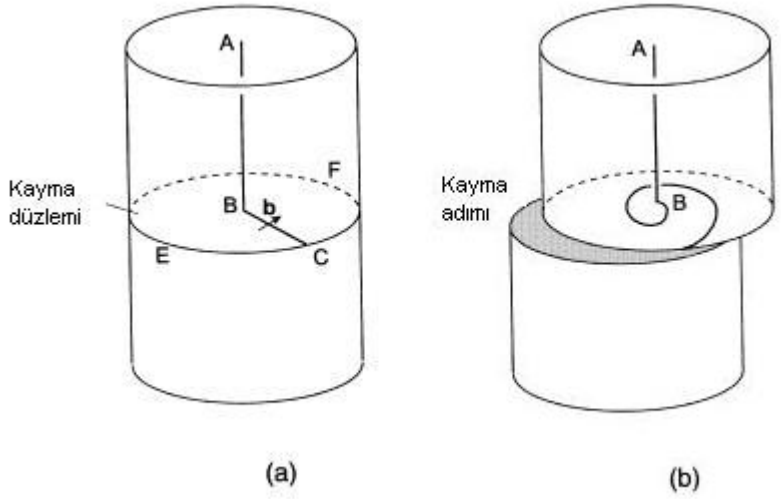
1. Frank-Read mekanizması

Frank ve Read tarafından sunulan ilk model kristal büyümesinde dislokasyonların rolünü açıklayan modele benzemektedir. Düzensiz bir dizi içerisinde bazı dislokasyonların bir bölümü kendi kayma düzlemlerinde bir bölümü de diğer bir kayma düzleminde bulunur. Bu durum Şekil 2.9a'da gösterilmiştir.

ABC kenar dislokasyonunun *BC* parçası *CEF* kayma düzleminde bulunmakta ve bu düzlemde serbestçe hareket etmektedir. *AB* parçası bu kayma düzleminde değildir ve hareketsizdir. Böylece *BC* parçası bir taraftan sabit olup sadece *B*'nin etrafında dönmektedir. Dislokasyon Şekil 2.9b'de gösterildiği gibi spiral olmaya meyillidir. Bu mekanizmada iki konu not edilmelidir:

a) Spiralin *B* etrafındaki her bir devri kayma düzlemi üzerindeki kristalin aşağıdakine göre *b* kadar yer değiştirmesine neden olmaktadır. *n* adet devir *nb* kadar yer değiştirme oluşturacağından bu süreç yeniden yaratıcıdır. Büyük bir kayma adımı kristalin yüzeyinde oluşacaktır.

b) *B* etrafındaki spiral hareketi dislokasyonun toplam uzunluğunu arttıracaktır. Bu mekanizma tek sonlu kaynaklara benzemektedir.



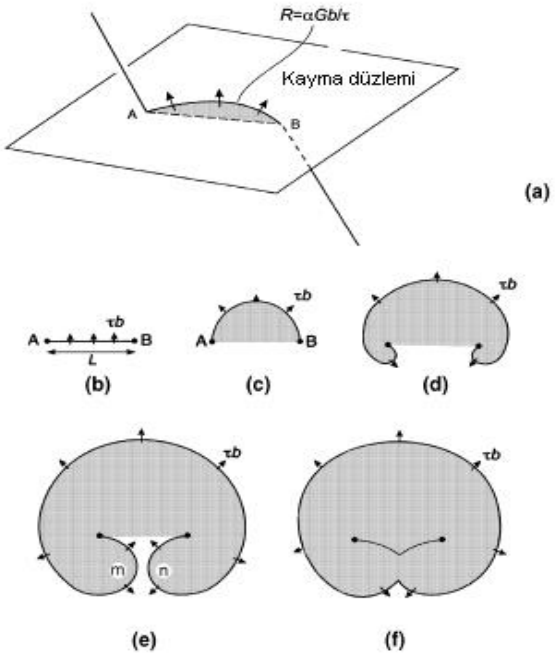
Şekil 2.9. Tek sonlu Frank-Read kaynağı, a) CEF düzleminde parçalı olarak uzanan dislokasyon b) kayma adımının oluşumu

Çok iyi bilinen Frank-Read kaynağı yukarıdaki mekanizmanın Şekil 2.10'da gösterildiği gibi iki noktadan tutulan dislokasyon çizgisine genişletilmiş halidir. Şekil 2.10a'da gösterildiği gibi *AB* parçası kayma düzlemindedir. Burgers vektörü bu düzlem üzerindedir ve her iki uç nokta bir bariyer tarafından tutulmaktadır. Bu bariyerler dislokasyon kesişimleri ya da düğümleri, birleşik basamaklar, kalıntı vb. olabilirler. Uygulanan τ kayma gerilmesi çizginin birim uzunluğuna τb kuvvetini uygular ve dislokasyon yayı oluşturmaya iter. Eğriliğin çapı R aşağıdaki denklemle uygulanan gerilmeye bağlıdır.

$$\tau_o = \frac{\alpha G b}{R} \tag{2.23}$$

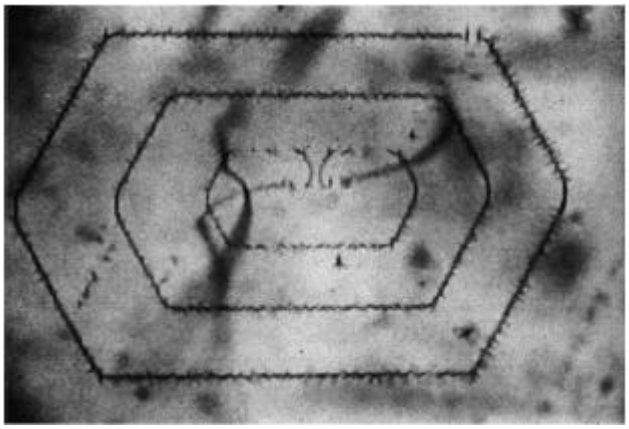
Böylece τ artarsa Şekil 2.10c'de gösterildiği gibi R de artar. Burada kayma düzlemi kağıt düzlemi ile aynıdır. *AB* parçasının uzunluğu L olarak alınırsa R, $L/2$'ye eşit olur ve α = 0,5 alınırsa Denklem (2.23) aşağıdaki gibi olur.

$$\tau_{max} = \frac{Gb}{L} \tag{2.24}$$



Şekil 2.10. Frank-Read kaynağında bir dislokasyonun hareketinin gösterimi

Çizgi bu gerilme altında genişlemeye devam ettiğinde *R* artar ve dislokasyon kararsız hale gelir. τ azaltılmazsa Denklem (2.23) karşılanmaz. Devamında oluşan olaylar Şekil 2.10d-f'de gösterilmiştir. Dislokasyon büyük bir böbrek benzeri bir yaya dönüşür ve *m* ve *n* parçaları karşılaştıklarında yok olurlar. Bu durum, *m* ve *n* parçalarının aynı gerilme altında karşıt yönlerde aynı Burgers vektörü ile ilerlemesinden kaynaklanmaktadır. Sonuç olarak dışarıda büyük bir halka oluşur ve içeride *AB* arasında süreci tekrar eden yeni bir dislokasyon oluşur.



Şekil 2.11. Bir silikon kristalinde Frank-Read kaynağı [34]

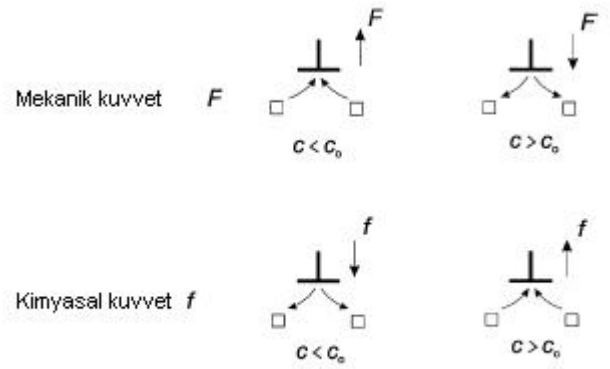
Frank-Read kaynağına çok iyi bir örnek Şekil 2.11'de gösterilmiştir. Dislokasyon her iki ucundan dislokasyon ağının diğer elemanları tarafından tutulmuştur.

2. Bardeen-Herring mekanizması

Bardeen-Herring kaynağı olarak bilinen çoğalma Frank-Read mekanizmasına benzer olarak tırmanma ile oluşabilir. Şekil 2.10'da verilen *AB* dislokasyon çizgisinin kağıt düzlemine dik Burgers vektörüne sahip bir kenar dislokasyonu olduğunu varsayalım. Yani Şekil 2.10a'da gösterilen düzlem *AB*'nin kayma düzlemi değildir. Ancak ek yarım düzlemini içermektedir. Eğer dislokasyon *A* ve *B*'de tutulursa boşlukların yüksek konsantrasyonu dislokasyonun tırmanmasına neden olacaktır. Tırmanmaya neden olan kimyasal kuvvet aşağıda verilmiştir.

$$f = \frac{bkT}{\Omega} \ln\left(\frac{c}{c_o}\right) \tag{2.25}$$

Bir kenar dislokasyonunun tırmanması için gereken mekanik ve kimyasal kuvvetler Şekil 2.12'da gösterilmiştir.



Şekil 2.12. Bir kenar dislokasyonunun tırmanması için mekanik ve kimyasal kuvvetler

3. DİSLOKASYON DESEN OLUŞUMUNUN ETMEN TABANLI BENZETİMİ

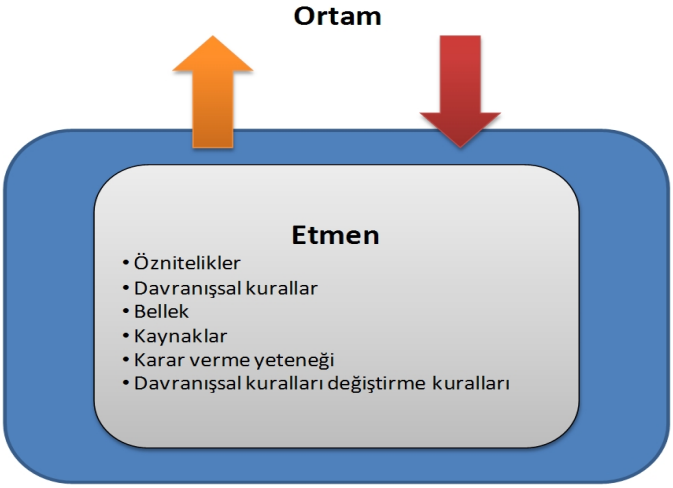
Bu bölümde Etmen Tabanlı Modelleme ve Benzetim (E.T.M.B.) konusu işlenerek bu yaklaşımın, dislokasyon dinamiği metodolojisi yardımıyla desen oluşumunun modellenmesinde kullanımı açıklanmıştır. Öncelikle Çoklu Etmen Sistemleri'ni (Ç.E.S.) oluşturan temel ilke ve kavramlar tanımlanarak bunların dislokasyon desen oluşumu modelinde kullanımı biçimsel olarak verilmiştir.

3.1. Etmen Tabanlı Modelleme ve Benzetim

Bilgisayar bilimlerinde Ç.E.S. çeşitli ilkeler ve kavramlar kümesi etrafında geliştirilmektedir. Bu kavramlar etmenler, çevre, etkileşim ve örgütlerdir. Bu kavramlar aşağıda açıklanmıştır.

3.1.1. Etmen

E.T.M.B. alanında etmenin bir çok tanımı yapılmıştır. Bunların herbiri özel bir araştırma alanına ait olduğundan etmen tanımını ve etmenlerin özelliklerini tutarlı ve kısaca belirtmek zordur.



Şekil 3.1. Bir etmenin temel yapısı [16]

Etmen tabanlı yaklaşımı bir teknolojiden çok, bir sistemi kendisini oluşturan parçaların gözünden tanımlayan bir düşünce düzeni olarak tanımlamak daha doğru olacaktır [37]. Etmenleri, varlıkların sınıflandırılmasında kullanmak ya da doğrudan bir yazılım/donanım birimi olarak tanımlamak yerine sistemi çözümlemede kullanılan bir araç olarak görmek gerekmektedir [38].

Şekil 3.1'de gösterildiği gibi, bugüne kadar yapılan çalışmalar kapsamında etmenlerin sahip olabileceği ortak özellikler aşağıdaki şekilde gruplanabilir [38].

1. Etmenler yerleşik (situated) olarak bir çevre içinde eylemlerini gerçekleştirirler.
2. Etmen davranışları belirli eğilimlere bağlı olarak gerçekleşir (bireysel amaçlar, hedefler, dürtüler vb)
3. Etmenler kendi kaynaklarına sahiptir.
4. Etmenler çevrenin sadece parçalı bir görüntüsüne sahiptir.
5. Etmenler doğrudan veya dolaylı olarak diğer etmenlerle iletişim kurarlar.
6. Yeni etmenler oluşabilir.
7. Etmenlerin özerk davranışı algılarının, çevre temsillerinin ve çevreyle ve diğer etmenlerle olan etkileşiminin bir sonucudur.

3.1.2. Etmen mimarileri

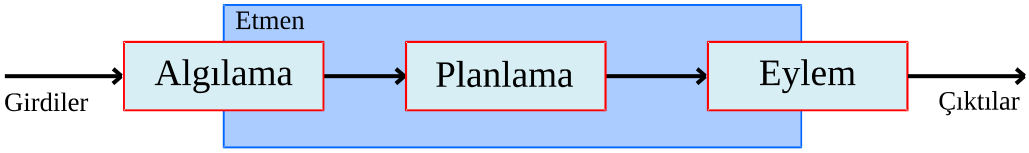
Etmen mimarisi bir etmenin iç örgütlenmesini tanımlamak için kullanılan bir terimdir. Etmen mimarilerini analiz etmek için genel olarak üç yaklaşım kullanılmaktadır [39]:

1. Sadece algı-eylem'e (ya da etki-tepki) dayanan mimarileri ele alan tepkisel (reactive) yaklaşım
2. Akli konulara dayanan bilişsel (cognitive) yaklaşım
3. Tepkisel ve bilişsel yaklaşımı bir arada kullanan melez yaklaşım

3.1.3. Etmen davranışının modellenmesi

Etmen modelinin basitleştirilmesi amacıyla algılama ve eylem arasında yer alan süreç etmenin planlama fonksiyonu olarak değerlendirilebilir. Böylece Şekil 3.2'de gösterildiği gibi bir etmen çevrimsel üç aşamalı bir süreçten oluşur [39]:

1. Algılama
2. Planlama
3. Eylem



Şekil 3.2. Üç aşamalı bir süreç olarak etmen

$s \in S$ dünyanın gerçek durumu olsun. Etmen a'nın çevrimsel davranışı (Algılama/Planlama/Eylem)

$$Davranış_a : S \rightarrow A_a \tag{3.1}$$

fonksiyonu ile temsil edilir. Burada A_a, a etmeninin olası eylemlerinin kümesini temsil eder.

$$Algılama_a : S \rightarrow P_a \tag{3.2}$$

$p_a \in P_a$ olan bir algı hesaplar.

$$Planlama_a : P_a \times S_a \rightarrow S_a \tag{3.3}$$

s_a şeklinde etmenin yeni iç durumunu hesaplar.

$$Eylem_a : P_a \times S_a \rightarrow A_a \tag{3.4}$$

a etmeninin eylemini oluşturur.

İlk olarak bir etmen, ortamın geçerli durumu s'yi kullanan *Algılama* fonksiyonu tarafından hesaplanan p_a algısını alır. Böyle bir fonksiyon çevrenin durumunu

tanımlayan (örneğin bir nesnenin koordinatları, geçerli sıcaklık vb) basit bir ham veri geri döndürebileceği gibi, ayrıca ham veriyi daha üst düzey algılara (bir nesneden uzaklık ya da yakınlık, sıcaklığın alçak ya da yüksek olması vb) çevirebileceği karmaşık işlemleri de temsil edebilir. Karmaşık ve üst düzey algı işlemleri irdeleme sürecini kolaylaştıracaktır.

İkinci olarak, *Planlama* fonksiyonu etmenin p_a'ya uygun olarak kendi iç dinamiklerinin nasıl evrimleşeceğini tanımlar. Bir etmenin planlama işlemi etmenin davranışının çekirdek bölümüdür ve mimarisini karakterize eder. Bu nedenle en çok üzerine araştırma yapılan bölümdür. Tropistik (Yönelimli) etmenler algılarla eylemleri doğrudan birleştirdikleri için planlama fonksiyonuna sahip değillerdir.

Son olarak, *Eylem* fonksiyonu, etmenin yeni iç durumuna ve geçerli algıya bağlı olarak kararını nasıl vereceğini, hangi eylemi seçeceğini temsil eder. Çoğunlukla bu eylem çevrenin değiştirilmesi ile gerçekleştirilir (örneğin s = {kapı(kapalı) $\rightarrow$ s = {kapı(açık)}). Diğer bir deyişle çevrenin doğrudan değiştirilmesi etmenin hesapladığı eylemin sonucunu gerçekleştirme yoludur.

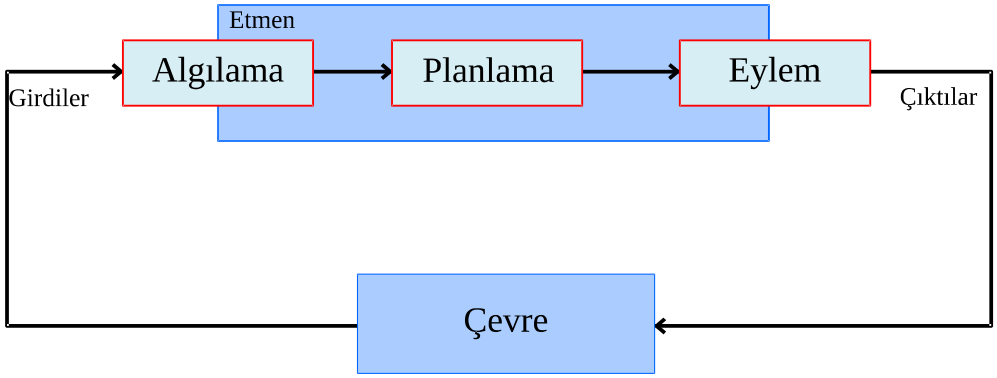
3.1.4. Çevre

Ç.E.S. başlangıcındaki çalışmalarda çevre kavramına önem verilmezken, benzetim uygulamaları ile beraber, etmenler benzetilmiş bir çevre içerisine yerleştirildikleri için çevrenin önemi anlaşıldı.

Davranış tabanlı etmenler alanında çalışan araştırmacılar uzun zamandır etmenlerin çevre ile etkileşimini inceliyorlardı. Temel olarak bu araştırma topluluğunun odaklandığı ana alan robotlar gibi fiziksel ortamda etmenlerin etkileşimde olduğu sistemlerdi. Zamanla bu çalışma yazılım etmenleri konusunda çalışan araştırmacıları etkiledi. Bugün yerleşik çoklu etmen sistemleri olarak bilinen alanda çalışan araştırmacılar mantıksal çevreleri çoklu etmen sistemlerinin önemli bir parçası olduğunu kabul etmektedirler. Bu araştırmacılar çevrenin gürbüz ve kendini düzenleyen ortak bir bellek ve etmenlerin dolaylı koordinasyonu için mükemmel bir yol olduğunu sergilemektedirler. Bazı uygulamalar çevre yoluyla dolaylı etkileşimin Ç.E.S.'lerin gücünü ve anlamlılığını arttırdıklarını, başka türlü imkansız veya pratikte karmaşık olan çözümlere imkan verdiklerini göstermişlerdir [39].

3.1.4.1. Çevrenin modellenmesi

Bir etmenin aldığı girdiler içinde bulunduğu çevreden gelir. Benzer olarak üretilen çıktılar çevreye gider. Şekil 3.3'de bir etmenin çevre ile etkileşimi gösterilmiştir.



Şekil 3.3. Etmenin çevre ile etkileşimi

Modelleme ve benzetim bakış açısından çevre diğer bir dinamik sistemdir. Ancak etmen modelinden farklı olarak çevrenin dinamiği özerk bir davranış göstermez. Çevrenin nitelik ve dinamiği ile ilgili olarak aşağıdaki özellikler dikkate alınabilir [39]:

1. Erişilebilir – Erişilemez : Eğer çevrenin tüm durumu etmen tarafından algılanabiliyorsa ortam erişilebilir olarak tanımlanır.

2. Belirleyici – Olasılıklı : Eğer çevrenin var olan durumuna dayanarak bir sonraki durumu ve etmenlerin eylemleri tam olarak belirlenebiliyorsa çevre belirleyicidir.

3. Bölümlü – Bölümsüz : Bölümlü bir çevrede bir bölüm (etmenin algılaması ve sonra eyleme geçmesi) önceki bölümlerde seçilmiş olan eylemlere bağlı değildir.

4. Durağan – Devingen : Durağan bir çevrede değişimler sadece etmenlerin etkisiyle oluşur. Buna karşılık devingen çevre içsel (endojen) bir gelişim gösterir.

5. Ayrık – Sürekli : Ayrık bir çevrede olası algıların ve eylemlerin sayısı sınırlıdır ve net bir şekilde tanımlanmıştır.

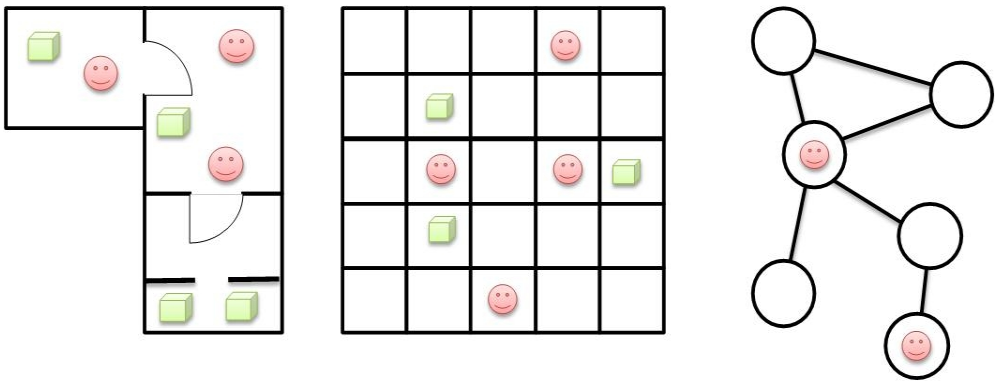
6. Kalıcı – Unutkan : Bir çevrim sonucunda oluşan çevredeki durumlar bir sonraki çevrimde kullanılıyorsa ortam kalıcıdır.

Çevrenin modellenmesi, etmenlerin gelişeceği fiziksel alanların temsilini de genellikle içinde barındırır. Çevre tarafından etmenlerin eylemlerinin ve algılarının tanımlanmasıyla algıların ve eylemlerin boyutlarına ilişkin iki yaklaşım öne çıkmaktadır:

1. Ayrıklaştırılmış : Çevre, etmenlerin algıları ve eylemleri için uzaysal birimler tanımlayan sınırlı alanlara bölünmüştür (Çevre merkezli).

2. Sürekli : Her bir algı ve eylemin mesafesi eylemdeki etmene ve algı/etmenin doğasına bağlıdır (Etmen merkezli).

İlk yaklaşım çevrenin, topolojisini tanımlayan birbirine bağlı alanların kolleksiyonu şeklinde modellenmesinden oluşur. Şekil 3.4'te böyle bir yaklaşımı gösteren üç örnek verilmiştir.



Şekil 3.4. Ayrıklaştırılmış çevre örnekleri

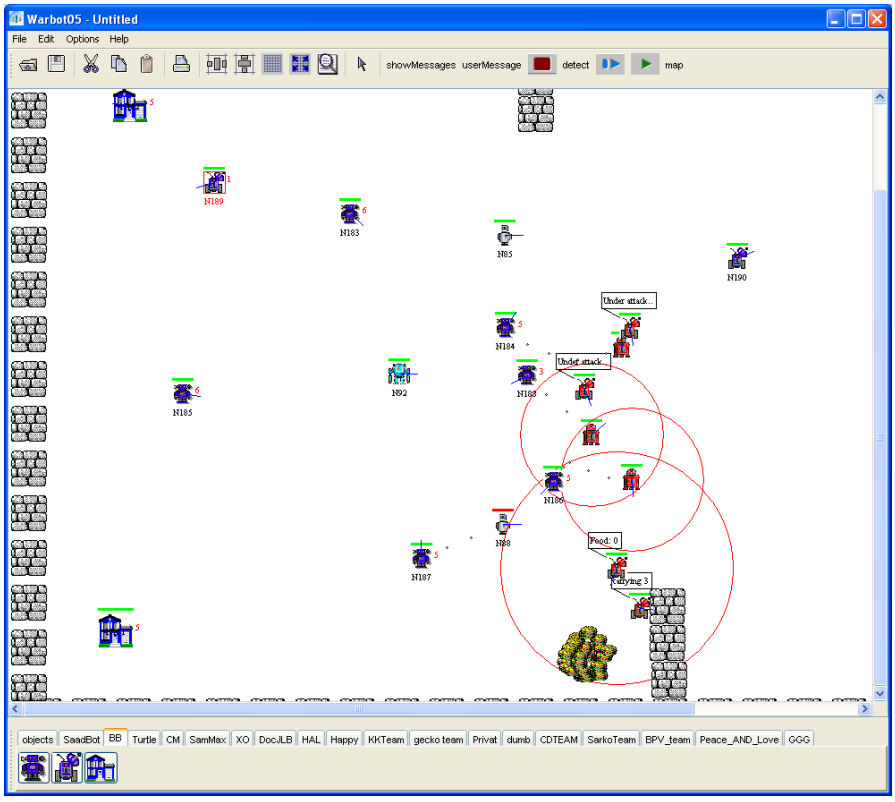
Bu tür yaklaşımın en çok görülen örnekleri, çevrenin düzenli bir hücreler ızgarasına ayrıştırıldığı örneklerdir.

Uygulama basitliği açısından geniş bir şekilde kullanılmakta olan ızgara temelli çevre modelleri feromonların difüzyonu ve buharlaşması gibi ortam dinamiklerinin modellenmesini de kolaylaştırmaktadır.

Ana eksiklik olarak, bir ızgara temelli model bir etmenin olabileceği algılar/eylemlerin boyutu problemini ortaya çıkartır. Gerçekte, bir etmenin çok heterojen olabilen ne tür algıları/eylemleri olursa olsun bunların mesafesi her zaman aynı olacaktır. Bu mesafe hücre olarak adlandırılmaktadır.

Buna karşılık sürekli yaklaşımda her bir etmen algılar/eylemlerin mesafesinin hesaplandığı yer referans noktası olarak kabul edilir. Şekil 3.5'te bir uygulama örneği gösterilen bu yaklaşım doğruluğun yüksek olması istendiği durumlarda kullanılır. Örneğin bu yaklaşım genellikle futbol robotlarının benzetiminde kullanılır: Etmenlerin ve topun hareketinin boyutu yüksek doğrulukla modellenmelidir.

Sürekli yaklaşım heterojen algılar/eylemlerin tümleştirilmesinden daha esnek olmakla birlikte modellenmesi ve gerçekleştirilmesi zordur.



Şekil 3.5. Sürekli yaklaşım uygulama örneği

3.1.5. Etkileşimler

Etmenler arası iletişim etkileşimlerin ve öz örgütlü yapıların merkezindedir. İletişim olmadan bir etmen tamamen izole, sağır ve dilsiz, kendi algılama-planlama-eylem çevrimi içerisinde kapalı bir haldedir. Dolayısıyla etmenler iletişim kurarlar, işbirliği yaparlar, eylemlerini koordine ederler ve bu şekilde birer birey olurlar [39].

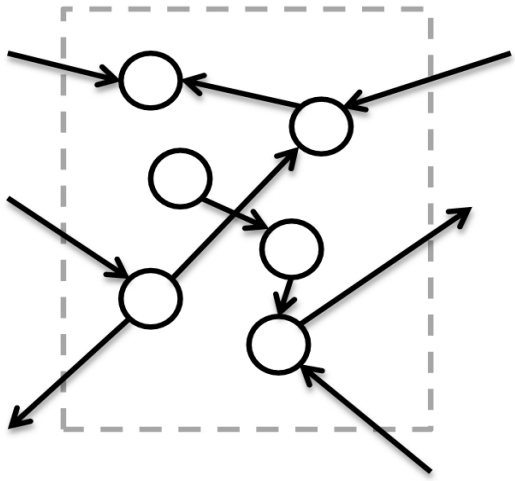
Etkileşim etmenlerin ve çevrenin arasındaki sürekli veri değişimi ve buna bağlı olarak bir sonraki girdilerin etkilenmesi olarak tanımlanabilir. Alıcının eylemlerini ve

gönderenin sonraki girdilerini etkilemeyen bir veri değişimi doğru bir etkileşim sayılmaz. Televizyon ekranında gösterilen sahneye konuşarak ya da bağırarak tepki veren bir insan televizyonla etkileşimde değildir. Bir mikrofon ve yükseltici geri bildirim olmadığı sürece etkileşmezler. Geri bildirim ya da ortak etki, hem doğal hem de yapay sistemlerin birlikteliğini sağlayan önemli bir parametredir.

Etkileşim için geri bildirim zorunludur. Geri bildirim olmadan yapılan tek yönlü iletişim etkileşimden ayırt edilmelidir. Bununla birlikte girdi tek başına etkileşim değildir. Etkileşim ortak nedenselliğe olanak tanımalıdır.

Bir etmen ve çevre arasında tek bir akış yoluyla iletişim kurulduğunda etkileşimin en basit biçimi olan sıralı (sequential) etkileşim oluşur. Şekil 3.3'te gösterildiği gibi sıralı etkileşimde etmen ve çevre arasında tek bir girdi akışı ve tek bir çıktı akışı vardır. Bu iki akışın geçici bileşimi sonucu girdi ve çıktılardan oluşan tek bir etkileşim akışı oluşur. Fiziksel bir çevrede bir etmenin algılama kavramı girdinin alınmasına, eylem kavramı da çıktının yayınlanmasına karşılık gelir [40].

Bir çevrede kalıcı (persistent) durum etmenler arasında doğrudan olmayan bir etkileşim kurulmasına ve dolayısıyla etmen sistemlerinin oluşturulmasına olanak verir. Çoklu özerk akışların etmenler ve ortam arasında aynı anda bulunması çok etmenli etkileşim olarak adlandırılmaktadır. Bu durum Şekil 3.6'da gösterilmiştir. Şekilde yer alan kesikli çizgi sistem ve dış çevre arasındaki sınırı temsil etmektedir [40].



Şekil 3.6. Çok etmenli etkileşim

Doğrudan etkileşim alıcısının içinde tanımlı olduğu mesajlar yoluyla yapılan etkileşim türüdür. Mesaj iletimi her bir tarafın diğer taraf hakkında tanımlayıcı bilgiye sahip olduğu ve iletişim kurma niyeti bulunduğunda gerçekleşir. Ancak taraflar birbiri hakkında haberdar olmadan ve iletişim kurma niyeti bulunmadan da etkileşim kurabilirler. Bu ortak bir çevrenin paylaşılması ve biri tarafından çevreye yapılan değişikliklerin diğeri tarafından izlenebilir olması ile yapılır. Bu etkileşim türüne dolaylı etkileşim denir [40].

3.1.6. Zamanın modellenmesi

Diğer benzetim türlerinde olduğu gibi E.T.M.B'de de zamanın evrimi modellenmelidir. Özellikle tüm etmenlerin nedensellik prensibine göre eş zamanlı olarak hareket etmeleri ve etkileşimde bulunması beklendiğinden zamanın modellenmesi ayrı bir önem kazanmaktadır [39].

Zaman üç ana yaklaşım kullanılarak modellenebilir:

1. Sürekli zaman : Herhangi bir an için sistem durumunu hesaplayan zaman fonksiyonları yoluyla zaman gelişir.
2. Ayrık zaman : Sabit zaman aralıklarına göre zaman ayrık olarak gelişir.
3. Ayrık olay tabanlı : Sürekli bir zaman çizgisi boyunca zaman bir olaydan diğerine evrimleşir. İki olay arasındaki zaman aralığı herhangi bir gerçek sayı olabilir.

Bu bağlamda E.T.M.B. için zamanın modellenmesinde aşağıdaki konular dikkate alınmalıdır.

1. Etmenlerin davranış zamanının modellenmesi
2. Çevrenin içsel dinamiğinin modellenmesi
3. Etmen eylemlerine bağlı olarak çevrenin gelişmesi (Zamanlama)

3.1.6.1. Bir etmenin davranış zamanının modellenmesi

Bir etmenin dış olaylara nasıl tepki verdiğini ve irdelediğini temsil etmek için kullanılan modeller doğal olarak ayrıktır. Gerçekte, sürekli yaklaşım ile dinamiğinin modellendiği bir çevreye koyulan etmenin irdeleme işlemi genellikle iç durumunu

ayrık olarak değiştiren bir işlem olarak modellenir. Üstelik hemen hemen tüm etmen tabanlı modellerde algı/irdeleme/eylem döngüsü basitleştirme amacıyla anlık bir *t* değerine ilişkilendirilir [39].

3.1.6.2. Çevrenin dinamiğinin modellenmesi

Uygulama alanına bağlı olarak çevrenin geçici gelişiminin modellenmesi hayati öneme sahip olabilir. İçsel dinamik olarak adlandırılan durumda çevre sadece etmenlerin çıktılarına tepki vermez ayrıca kendi dinamiğine bağlı olarak da gelişir. Örneğin, robot futbol benzetiminde yuvarlanan top etmenler müdahale etmese de hareketine devam eder.

Çevre çok farklı türdeki sistemleri temsil edebileceği için sürekli veya ayrık zaman modeli uygulama alanının gereksinimlerine bağlı olarak ele alınabilir. Ancak etmenlerin algılarının ve eylemlerinin ayrık yapıda olmasından hareketle çevre geçici dinamiği etmen modelleri ve çevre modelleri arasındaki birlikteliği kolaylaştırmak için bazı olay tabanlı mekanizmaları içerir [39].

3.2. Modelleme ve Benzetim Araçları

E.T.M.B. çalışmalarında kullanmak için çeşitli araştırma grupları tarafından açık kaynak kodlu araçlar geliştirilmiştir. Bu araçlardan hangisinin bu çalışma kapsamında kullanılacağı konusunda bir araştırma yapılmıştır. Bunun için kullanıcılar tarafından en çok tercih edilen dört araç incelemeye alınmıştır. Bunlar Swarm, Repast, Mason ve NetLogo'dur. Yapılan inceleme sonucunda kullanım kolaylığı ve Java programlama dilinin sunduğu esnek olanaklar bakımından Repast aracının kullanılmasına karar verilmiştir.

Aşağıda incelenen dört aracın özellikleri kısaca anlatılmıştır.

3.2.1. Swarm

E.T.M.B. için genel bir dil ve araç kiti olarak tasarlanmış ve bilimsel alanda geniş çaplı olarak kullanımı planlanmıştır. Swarm'daki ana amaç model geliştirilmesi ve geliştirilen model üzerinde deneyler yapılması ve sanal bir laboratuvar olarak kullanılmasıdır. Diğer bir ana kavram modelin “sürüler”in sıradüzeni olarak tasarlanmasıdır. Bir sürü planları üst seviyedeki sürününkine entegre olan alt seviye

sürüleri içerebilir. Yazılım tasarım felsefesi tüm alanlardaki modellerin geliştirilmesine olanak sağlayan genel araçları göz önünde bulundurmuş ve belirli bir alana yönelik özel bir araç yoktur. Swarm kendi veri yapılarına ve bellek yönetimine sahiptir. Bunun sonucu olarak araca eklenmiş sondalar (probes) sayesinde benzetim nesnelerini izlemek ve denetlemek mümkün olmaktadır [41].

3.2.2. Repast Symphony

Repast (Recursive porous agent simulation toolkit)'ın geliştirilmesi birkaç farklı amaçla olmuştur. İlk başlangıç amacı Swarm aracını ya da eşit işlevselliği Java yazılım dilinde yapmaktı. Ancak Repast, Swarm'ın tüm tasarım felsefesini adapte etmedi ve sürü kavramını kullanmadı. Bununla birlikte sosyal bilimler alanını desteklemek için geliştirilmekle beraber genel araçları sayesinde diğer alanları da destekleyen bir duruma ulaştı. Diğer bir amaç da yazılım konusunda çok deneyimi olmayan araştırmacıların modelleme işlerini kolaylaştırmaktır [42].

Repast Simphony 2.0 Beta sürümü 3 Aralık 2010 tarihinde çıkarılmıştır. Bu sürüm Microsoft Windows, Apple Mac OS X ve Linux işletim sistemlerinde çalışabilen entegre, kullanıcı etkileşimi yüksek Java tabanlı modelleme sistemidir. Son derece esnek modellerin iş istasyonlarından bilgisayar kümelerine kadar her ortamda kullanımına olanak vermektedir[42].

Repast Simphony modelleri ReLogo ve Groovy betik dillerinde, grafik destekli akış diyagramları ile ya da saf Java programlama dilinde geliştirilebilmektedir. Ayrıca NetLogo modelleri de Repast Simphony ortamında çalıştırılabilmektedir.

3.2.3. Mason

Mason daha küçük ve Repast'a alternatif olarak tasarlanmıştır. Bu tasarımda yüksek hesaplama gücü gerektiren çok sayıda etmenin bir çok iterasyonda kullanılacağı göz önünde bulundurulmuştur. Odaklanılan ana konu çalıştırma hızının arttırılması yönündedir. Mason herhangi bir bilimsel alana özel olmayan genel araçlar içerir. Temel grafik ve rassal sayı dağılımı konularındaki yetersizlikleri nedeniyle henüz tam olarak olgun bir seviyede değildir [43].

3.2.4. NetLogo

NetLogo kolay kullanımı olan bir eğitim aracı olarak geliştirilmiştir. Yüksek seviye yapıları ve programlama eforunu azaltan temel bileşenleri içeren kendine ait bir betik (script) dili vardır. Bu dil bir çok standart programlama dillerine ait denetleme ve yapılandırma yeteneklerini barındırmakla birlikte nesneye dayalı programlama özelliği yoktur.

NetLogo açık bir şekilde özel bir model için tasarlanmıştır. Bu model, kısa zaman çerçevesi içinde yerel etkileşimlerle oluşan davranışlara sahip etmenlerin bir ızgara uzayında eylem yapmalarına dayanmaktadır. Bu tür modeller kolayca geliştirebilmekle beraber bununla sınırlı kalmamaktadır. NetLogo kullanıcı arayüzü ve dokümantasyonu ile en profesyonel E.T.M.B. platformudur [44].

3.3. Dislokasyon Desen Modeline Genel Bakış

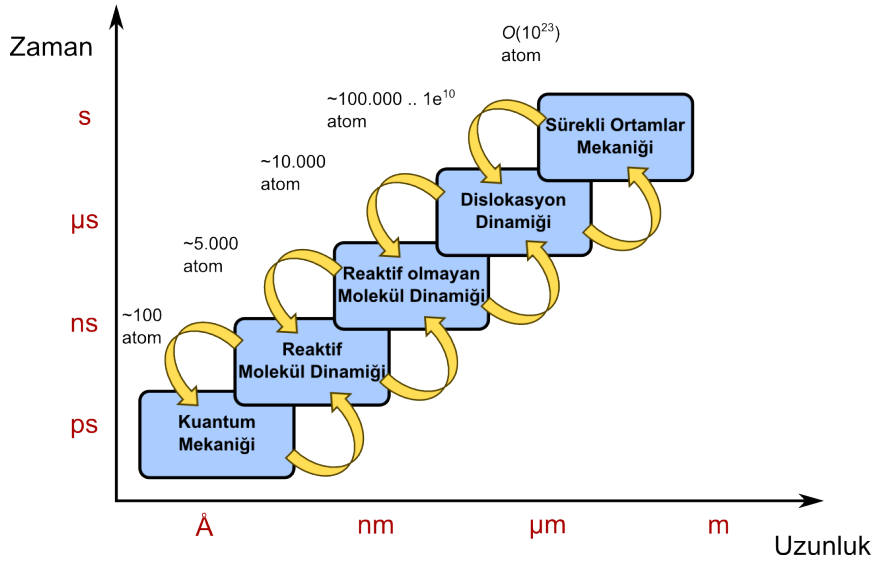
Bu çalışmada Dislokasyon Desen Modeli (D.D.M.)'nin oluşturulmasında yinelemeli bir model tasarım yaklaşımı kullanılmıştır. Bu kapsamda etmen, çevre ve etkileşim güdümlü model tasarım yaklaşımları [45] sırayla uygulanarak basitten başlanarak her bir yinelemede model detayı arttırılmıştır. Her bir yineleme aşağıdaki adımlardan oluşmaktadır:

1. İlgili bakış açılarının oluşturulması/güncellenmesi
2. Etmenlerin ilkel eylemlerinin ve çevre ile etkileşimlerinin belirlenmesi/ güncellenmesi
3. Çevreden etmenlere gelecek olan bilginin belirlenmesi/güncellenmesi
4. Etmen mimarisinin oluşturulması/güncellenmesi
5. Çevre modelinin gerçekleştirilmesi/güncellenmesi

Kullanılan modelleme ölçeğinin çoklu ölçek benzetim yaklaşımı içerisinde bulunduğu yer Şekil 3.7'de gösterilmiştir.

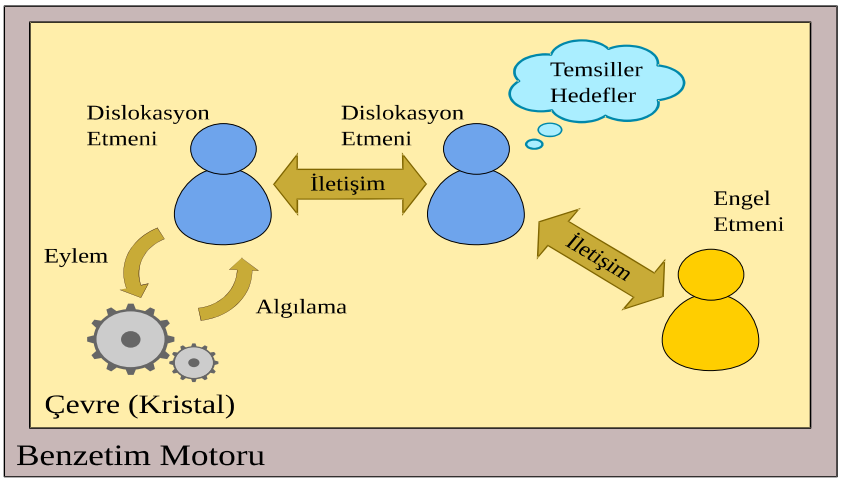
D.D.M. etmenler, çevre ve benzetim motoru ana bileşenlerinden oluşmaktadır. Benzetim modelinin genel görünüşü şematik olarak Şekil 3.8'de verilmiştir. Burada

dislokasyon ve engel etmenleri kollektif bir davranış gösterek kendi aralarında ve çevre ile etkileşimde bulunarak zaman içerisinde evrilmekte ve desen oluşumuna neden olmaktadırlar.



Şekil 3.7. Çok ölçekli modelleme yaklaşımı [18]

Sistemde bulunan varlıklar dislokasyonlar ve engellerden oluşmaktadır. Çevre, varlıkların içinde bulunduğu fiziksel ortamı temsil etmekte ve benzetim motoru yardımıyla, sistemde bulunan tüm varlıkların durumunu görebilmektedir. Özellikle etmenlerin ve çevrenin istenilen bir zamandaki durumunun elde edilmesi benzetim motoru üzerinden gerçekleştirilebilmektedir. Ayrıca benzetim motoru, etmenlerin çevre üzerinden algılamalarını sağlamakta, etmenlerin ve çevrenin eylemlerini gerçekleştirmektedir.



Şekil 3.8. Dislokasyon desen modeli genel görünüş diyagramı

D.D.M., benzetim zamanı boyunca dislokasyonların öz örgütlenmeye dayalı bir desen oluşturacak şekilde evrilmesini tanımlayan bir modeldir. Bu model genel olarak Denklem (3.5)'de verilmiştir.

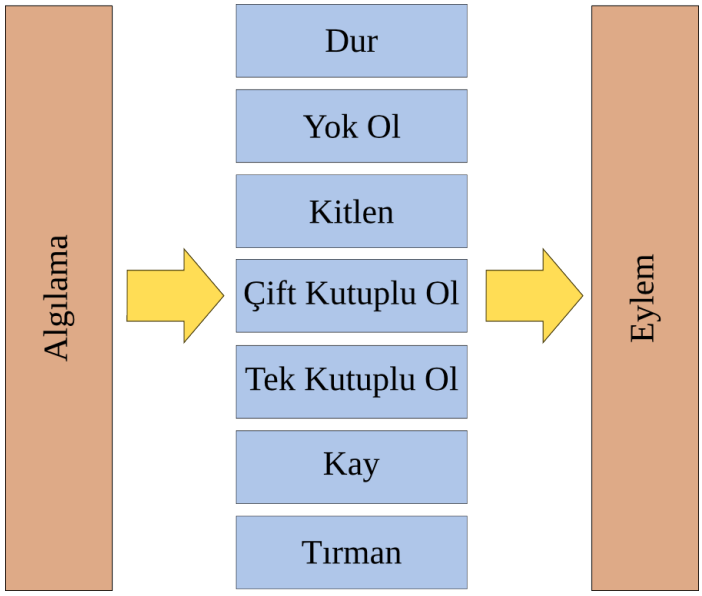
$$DDM = \langle ÇevreM, AM, ilklendir \rangle \tag{3.5}$$

Burada *ÇevreM* çevre modelini, *AM* çalıştırılan etmen modellerinin kümesini, *ilklendir* ise benzetim başlangıcında tüm değişkenlerin ve etmenlerin başlangıç değerlerini belirleyen fonksiyonu belirtmektedir.

3.3.1. Etmen modelleri

D.D.M.'de etmenler, kristal içinde bulunan kenar dislokasyonlarını modellemek için kullanılırlar. Özerk bir şekilde işlev görebilmeleri için algılama, planlama ve eylem yapma yeteneklerine sahiptirler. Bir dislokasyon etmeninin mimarisi Şekil 3.9'da gösterildiği gibi tepkisel mimari kullanılarak gerçekleştirilmişir.

Dislokasyon etmeni, (b, 0, 0) veya (-b, 0, 0) Burgers vektörü değeriyle kristal içinde rastgele bir konumda ve belli bir kayma sisteminde hayata başlayarak uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak hareket etmekte, ayrıca diğer dislokasyon etmenleri veya engellerle etkileşime girmektedir. Etkileşim sonucu dislokasyon etmeni, durabilmekte, yok olabilmekte, tek kutuplu veya çift kutuplu olabilmektedir.



Şekil 3.9. Dislokasyon etmenine ait tepkisel mimari

Dislokasyon etmenine ilişkin model Denklem (3.6)'da verilmiştir. *dis* indisi dislokasyon etmenini ifade etmektedir. Dislokasyon etmenleri sadece benzetim başlangıcındaki ilklendirme sırasında verilen başlangıç değerlerine göre farklılık göstermektedirler. Sayıları ise benzetim boyunca yok olma ve çoğalmaya bağlı olarak değişmektedir.

$$AM = \{AM_{dis}\}, \forall dis \in A, \\ AM_{dis} = \langle RU_{dis}, algıla_{dis}, S_{dis}, zihinselGüncelle_{dis}, EYLEM_{dis}, yap_{dis} \rangle \quad (3.6)$$

S_{dis} dislokasyon etmeninin zihinsel (SA_{dis}) ve fiziksel özelliklerini (SE_{dis}) içeren tüm özelliklerin kümesidir ve

$$S_{dis} = SA_{dis} \times SE_{dis} \quad (3.7)$$

olarak tanımlanır. Dislokasyon etmenine ilişkin fiziksel ve zihinsel değişkenler aşağıda verilmiştir.

$$P_{dis} = \{konum, hız, netKuvvet, burgersVektörü, kaymaSistemi, \\ kutupluluk, hareketlilik, algıYarıçapı, algılananVarlıklar\} \quad (3.8)$$

$$M_{dis} = \{içKuvvet, efektifKuvvet, geçişKaymaGerilmesi, kitlenmeGerilmesi\} \quad (3.9)$$

Böylece dislokasyon etmeninin olası durumunu belirten küme $S_{dis} = V_{konum} \times V_{hız} \times V_{netKuvvet} \times V_{birimBurgersVektörü} \times V_{kaymaSistemi} \times V_{kutupluluk} \times V_{hareketlilik} \times V_{algıYarıçapı} \times V_{algılananVarlıklar} \times V_{içKuvvet} \times V_{efektifKuvvet} \times V_{geçişKaymaGerilmesi} \times V_{kitlenmeGerilmesi}$ olarak verilebilir.

RU_{dis} dislokasyon etmeninin algılayabileceği ve tüm çevrenin bir alt kümesini içeren çevredir. Bu alt küme etmenin *algıYapıçapı*'na giren tüm diğer varlıkları, yani etmenleri ve kaynakları kapsamaktadır ve

$$RU_{dis} = \{ e \in E | \exists o \in A : cisimleştir(o) = \\ e \wedge mesafe(e.konum, dis.konum) < dis.algıYarıçapı, \\ e \in E | \exists r \in R : tanımla(r) = \\ e \wedge mesafe(e.konum, dis.konum) < dis.algıYarıçapı\} \quad (3.10)$$

olarak tanımlanır. E etmenler ve kaynaklardan oluşan tüm varlıkların kümesini temsil eder. $cisimleştir: A \rightarrow E$ fonksiyonu bir etmeni kendi cismine veya fiziksel varlığına

bağlamaktadır. *tanımla:* $R \rightarrow E$ fonksiyonu ise bir kaynağı fiziksel varlığı ile ilişkilendirmektedir. Bir varlığa (etmen veya kaynak) ait değişken *dis.değişkenAdı* veya *e.değişkenAdı* şeklinde gösterilir.

$EYLEM_{dis}$ dislokasyon etmeninin yapabileceği olası tüm eylemleri içeren kümedir ve aşağıdakilerden oluşmaktadır.

$$\begin{aligned} EYLEM_{dis} \quad = \quad & \{\langle DUR, e\rangle, \langle YOKOL, e\rangle, \langle ÇİFTKUTUPLUOL, e\rangle, \\ & \langle TEKKUTUPLUOL, e\rangle, \langle KİTLEN, e\rangle, \\ & \langle KAY, yön, mesafe\rangle, \langle TIRMAN, yön, mesafe\rangle\} \end{aligned} \tag{3.11}$$

DUR sürtünmeKuvveti netKuvvet'ten büyük olduğunda veya bir engelle karşılaşıldığında dislokasyon etmeninin durmasını sağlamak, *YOKOL e* varlığı ile birlikte etmeni benzetimden silmek, *ÇİFTKUTUPLUOL e* varlığı ile birlikte çift kutuplu olmak, *TEKKUTUPLUOL e* varlığı ile birlikte tekrar tek kutuplu olmak, *KİTLEN e* varlığı ile birlikte kilitli olmak, *KAY yön* yönünde ve *mesafe* kadar kaymak ve *TIRMAN yön* yönünde *mesafe* kadar tırmanmak için yapılan eylemlerdir. Bu eylemlerin etkin olması çevre modelinin *çalıştır* fonksiyonunun sorumluluğudur. Bu nedenle eylemler çevre yoluyla diğer etmenlere mesaj olarak görülebilir.

$algıla_{dis}$ dislokasyon etmeninin çevresini ve diğer etmenleri algılamasını sağlayan işlevdir ve

$$algıla_{dis} : RU_{dis} \rightarrow SE_{dis} \tag{3.12}$$

olarak tanımlanır.

$zihinselGüncelle_{dis}$ dislokasyon etmeninin Denklem (3.9)'da verilen zihinsel değişkenlerini güncelleyen işlevdir ve

$$zihinselGüncelle_{dis} : S_{dis} \rightarrow S_{dis} \tag{3.13}$$

olarak tanımlanır. yap_{dis} eylem seçim işlevidir ve

$$yap_{dis} : S_{dis} \rightarrow EYLEM_{dis} \tag{3.14}$$

olarak tanımlanır.

Dislokasyon için *yap* fonksiyonu aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$yap_{dis}=\begin{cases}\langle DUR, e\rangle, & \text{eğer } dis.sürtünmeKuvveti > dis.netKuvvet \vee \\ & \quad (açı(e.konum, dis.konum) < 45^\circ \wedge \\ & \quad mesafe(e.konum, dis.konum) < e.engelBoyutu/2) \\ \langle YOKOL, e\rangle, & \text{eğer } mesafe(e.konum, dis.konum) < dis.yokOlmaMesafesi \wedge \\ & \quad e.BurgersVektörü == -dis.BurgesVektörü \\ \langle ÇİFTKUTUPLUOL, e\rangle, & \text{eğer } dis.gerilme < dis.geçişKaymaGerilmesi \wedge \\ & \quad mesafe(e.konum, dis.konum) < dis.çiftKutupluMesafesi \wedge \\ & \quad (açı(e.konum, dis.konum) < 65^\circ \wedge açı(e.konum, dis.konum) > 25^\circ) \\ \langle TEKKUTUPLUOL, e\rangle, & \text{eğer } dis.gerilme > dis.geçişKaymaGerilmesi \\ \langle KİTLEN, e\rangle, & \text{eğer } mesafe(e.konum, dis.konum) < dis.yokOlmaMesafesi \wedge \\ & \quad dis.gerilme < dis.kitlenmeKaymaGerilmesi \\ \langle TIRMAN, yön, mesafe\rangle, & tırmanmaİzni == doğru \\ \langle KAY, yön, mesafe\rangle, & diğer \end{cases} \tag{3.15}$$

Bir etmenin temel programını oluşturan algılama, bilgi işleme ve eylem seçme bileşenleri bu üç fonksiyon tarafından şekillendirilmektedir. $pdurum \in SE_{dis}$ dislokasyon etmeninin fiziksel durumunu ve $adurum \in S_{dis}$ tüm durumları ifade ederse yeni durum için

$$\begin{aligned} algıla_{dis}(pdurum) &:= pdurum' \\ zihinselGüncelle_{dis}(adurum) &:= adurum' \end{aligned} \tag{3.16}$$

yazılabilir.

3.3.2. Çevre modeli

Çevre modeli genel olarak Denklem (3.17)'deki gibi verilebilir.

$$ÇevreM = \langle KaynakM, GenelM, EYLEM_{çevre}, yap_{çevre}, çalıştır\rangle \tag{3.17}$$

Burada *KaynakM* malzeme içinde bulunan engelleri temsil etmektedir ve

$$KaynakM_{engel} = \langle SE_{engel}, kaynakGüncelle_{engel}, EYLEM_{engel}, yap_{engel}\rangle \tag{3.18}$$

olarak tanımlanır. Engellerin malzeme içerisindeki yayınımı ihmal edildiğinden hareket etmezler. Bu nedenle $kaynakGüncelle_{engel}$ ve yap_{engel} fonksiyonları ile $EYLEM_{engel}$ kümesi boştur. Tüm engel kaynakları aynı olup aşağıdaki özelliklere sahiptirler.

$$P_{engel} = \{konum, engelBoyutu\} \tag{3.19}$$

GenelM modele ilişkin genel özellikleri içermektedir ve

$$GenelM = \langle SP, özellikGüncelle \rangle \tag{3.20}$$

olarak tanımlanır.

$$P_{çevre} = \{ dislokasyonSayısı, maksimumNetGerilme, uygulananGerilme, sıcaklık \} \tag{3.21}$$

$EYLEM_{çevre}$ çevre tarafından gerçekleştirilecebilecek olası eylem kümesini içerir ve aşağıdaki gibidir.

$$EYLEM_{çevre} = \{ \langle ÇOĞALT, hız \rangle \} \tag{3.22}$$

ÇOĞALT eylemi, dislokasyon üzerindeki ortalama maksimum net gerilmenin Orowan gerilmesini aşması durumunda *hız* ile hesaplanan sayıda dislokasyonu yarısı pozitif Burgers vektörlü diğer yarısı negatif Burgers vektörlü olarak rastgele konumlarda oluşturur.

$$yap_{çevre}(ES) = \begin{cases} \langle ÇOĞALT, hız \rangle, & eğer\ maksimumNetGerilme > orowanGerilmesi \\ tanımlanmamış, & diğer \end{cases} \tag{3.23}$$

çalıştır fonksiyonu tüm varlıkların çizelgeye kaydedilmiş adımlarını çalıştırır ve

$$\begin{aligned} &çalıştır(adım_{1,} adım_{2,\ldots}, adım_n) = \\ &\quad çalıştır(adım_1) \circ çalıştır(adım_2) \circ \ldots \circ çalıştır(adım_n) \end{aligned} \tag{3.24}$$

olarak tanımlanır. *1 ... n* arası varlıkların *adım* fonksiyonları benzetim motoru yoluyla sırayla çalıştırılır.

3.3.3. Bileşenler arası arayüzler

Dislokasyon etmenleri, çevre ve benzetim motoru arasındaki arayüzler aşağıdaki gibidir.

3.3.3.1. Dislokasyon etmeni ve çevre

Her bir dislokasyon etmeni çevresinden bilgiyi algılar. Çevreden alınan bilgi algı yarıçapı içinde bulunan diğer dislokasyon etmenlerinin ve engellerin listesini içerir.

Ayrıca dışarıdan etkiyen gerilme ve sıcaklık dislokasyon etmeninin algıladığı bilgiler içindedir.

Dislokasyon etmeni yapmaya karar verdiği eylemi çevreden ister. Kayma veya tırmanma gibi başka bir yere hareket etme ve yok olma istekleri örnek verilebilir.

3.3.3.2. Çevre ve benzetim motoru

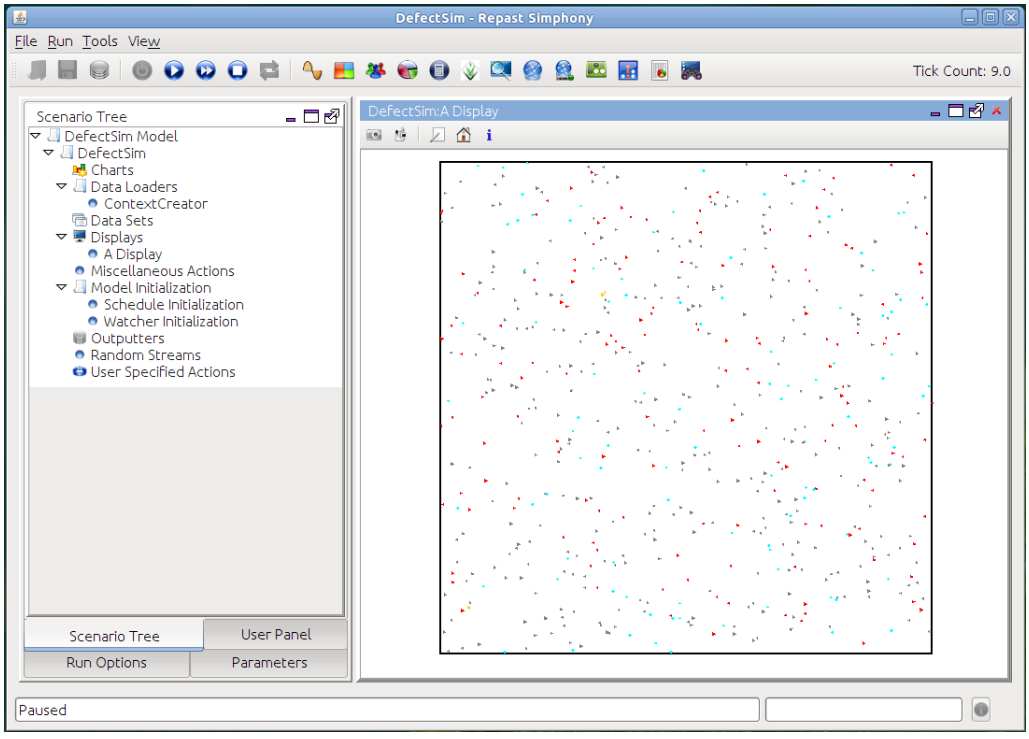
Çevre etmenler tarafından kendisinden talep edilen eylemlele kendisine ait eylemleri benzetim motoruna aktarır. Benzetim motoru da eylemleri gerçekleştirir. Etmenlerin çevre yoluyla benzetim motoruna erişmeleri bir yalıtım sağlamaktadır. Bu şekilde model sadece çevre ve benzetim motoru arasındaki arayüzlerin yeniden tanımlanmasıyla farklı benzetim motorları tarafından çalıştırılabilir.

4. DİSLOKASYON DESEN MODELİNİN GERÇEKLENMESİ

Bu bölümde geliştirilen D.D.M.'nin Repast benzetim aracı kullanılarak gerçeklenmesi, doğrulama, geçerlemesi ve tanımlanan deneysel çerçeveler ile çalıştırılarak elde edilen sonuçlar verilmiştir.

4.1. D.D.M.'nin Gerçeklenmesi

Bir önceki bölümde tanımlanan D.D.M., Repast Simphony benzetim aracının sunduğu modelleme ve benzetim altyapısı kullanılarak Java programlama dilinde gerçeklenmiştir. Aracın sunduğu kullanıcı arayüzü Şekil 4.1'de verilmiştir. Bu arayüzün sunduğu çeşitli olanaklar (Duraklatma, tekrar başlatma, büyültme/küçültme, renklendirme vb.) ile model çalışırken grafiksel olarak incelenmesi yapılabilmektedir.



Şekil 4.1. Repast Symphony aracı kullanıcı arayüzü

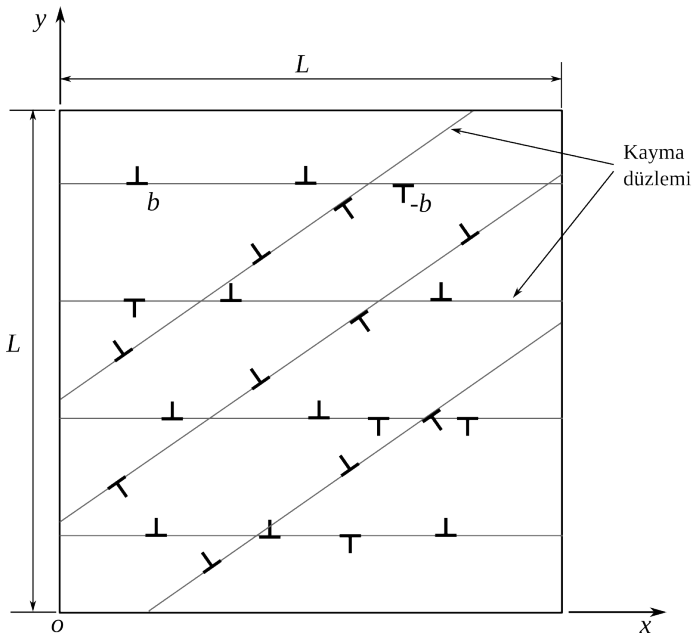
Gerçekleme çalışmaları aşağıdaki adımlardan oluşmaktadır.

4.1.1. Bakış açılarının oluşturulması

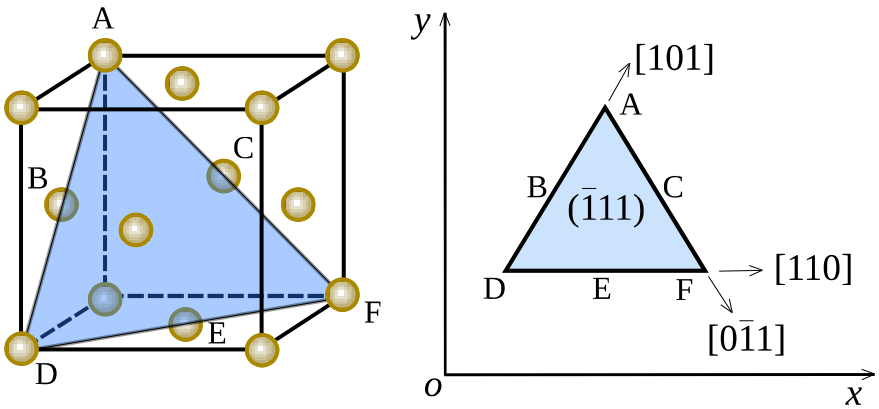
Malzeme içerisinde dislokasyonların hareketi, birbirleri ve diğer elemanlarla olan etkileşimleri 2 boyutlu dislokasyon dinamiği kullanılarak mezoskopik ölçekte modellenmiştir.

Etmenler *LxL* genişliğinde 2 boyutlu bir ortamda hareket edecek, birbirleriyle ve çevreyle etkileşimde bulunacaklardır. Dislokasyonlar *z* ekseninde sonsuz uzunluğa sahip birbirlerine paralel kenar dislokasyonları olarak modellenmiştir. Şekil 4.2'de kayma düzlemlerinde (b, 0, 0) ve (-b, 0, 0) Burgers vektörlerine sahip kenar dislokasyonları gösterilmiştir. Y.M.K. kristallerine ait kayma sistemleri ve kartezyen koordinat sistemine göre yerleşimi Şekil 4.3'te verilmiştir.

3 boyutlu benzetim çok yüksek hesaplama gücü ve zaman gerektirdiğinden etmen tabanlı yaklaşımının denenmesi ve uygunluğunun incelenmesi amacıyla basitleştirilmiş şartlarla 2 boyutlu bir bakış açısı seçilmiştir. Bu şekilde desen oluşumuna etkisinin yüksek olduğu tespit edilen dislokasyonların kesişmesi tam olarak modellenememektedir [46].

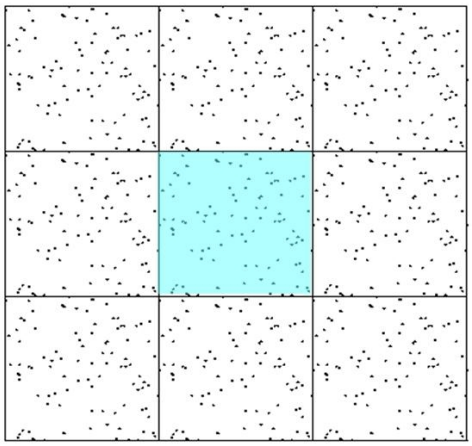


Şekil 4.2. Benzetimde kullanılan kayma düzlemi ve kenar dislokasyonları



Şekil 4.3. Y.M.K. malzemelerde kayma sistemleri ve kartezyen koordinat sistemine göre yerleşimi

Şekil 4.4'te gösterildiği gibi simülasyon ortamında periyodik sınır koşulları uygulanmıştır. Bu şekilde benzetim penceresini terk eden bir dislokasyon terk ettiği noktanın simetriğinden tekrar pencere içerisine girmektedir.



Şekil 4.4. Periyodik sınır koşulları

4.1.2. Etmen, kaynak ve çevrenin gerçeklenmesi

Etmen, kaynak ve çevre Repast içerisinde Java sınıfları olarak gerçeklenmiştir. Bu sınıflara ilişkin Unified Modeling Language (U.M.L.) kullanılarak oluşturulan sınıf diyagramı Şekil 4.5'te verilmiştir.

Dislokasyon sınıfı soyut *KusurEtmeni* sınıfından türeyip, *DislokasyonDavranış* ve *Malzeme* sınıflarıyla bağlantılıdır. Dislokasyona ait hareket denkleminin entegrasyonu için *Entegratör* arayüzünü gerçekleyen *TrapezoidEntegratör* sınıfı kullanılmaktadır. Dislokasyonun davranışları soyut *Davranış* sınıfından türeyen

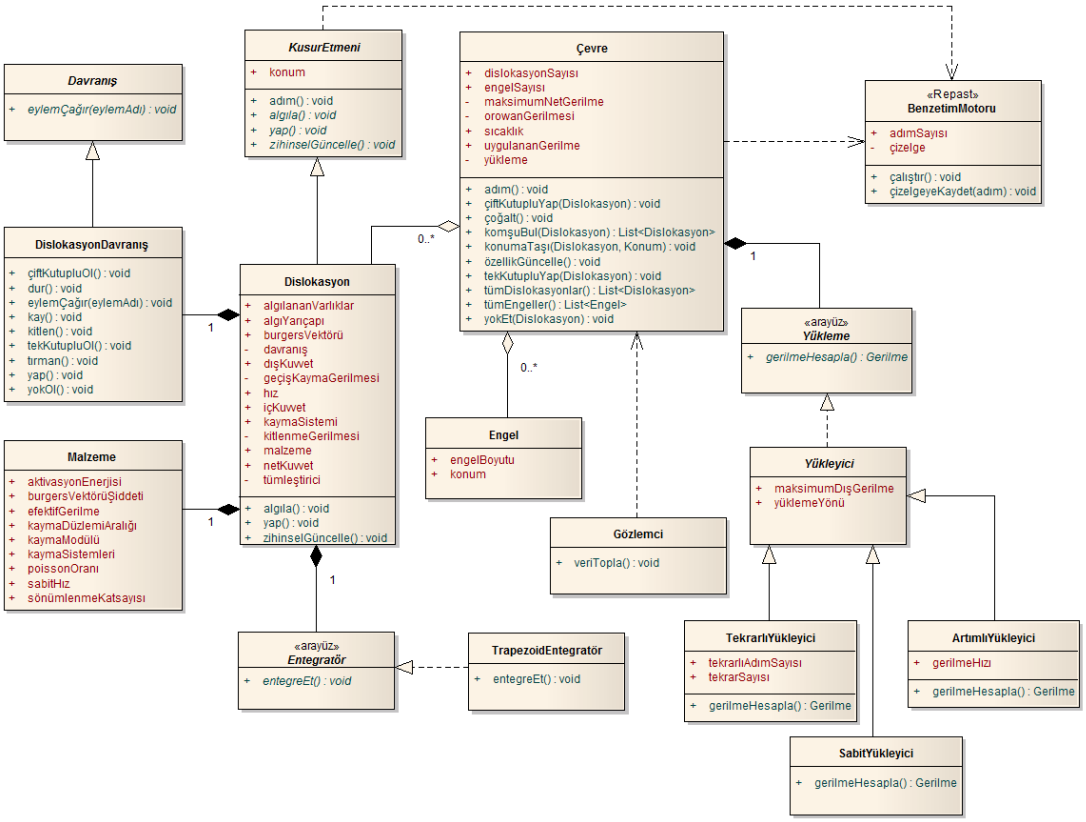
DislokasyonDavranış sınıfında, bu davranışları çağıran mantık ise *Dislokasyon* sınıfında tanımlanmıştır. *Çevre* sınıfı etmenlerin çevreden ihtiyaç duydukları servisleri içermekte ve her bir benzetim adımında özellikleri güncellemektedir. Ayrıca *Çevre* sınıfı seçilen yükleme tipine bağlı olarak uygulanan dış gerilmeyi hesaplamaya yarayan ve *Yükleme* arayüzünü gerçekleyen *Yükleyici* sınıfını barındırır. *Gözlemci* sınıfı benzetim koşumu sonunda kullanılmak üzere gerekli olan bilgileri her bir benzetim adımında toplar ve kaydeder. *KusurEtmeni* ve *Çevre* sınıflarının *adım* metotları Repast *BenzetimMotoru*'nda bulunan çalıştırma çizelgesine Tablo 4.1'de verilen parametrelerle kaydedilir. *KusurEtmeni* sınıfının adım metotu sırasıyla soyut *algıla*, *zihinselGüncelle* ve *yap* metotlarını çağırır. Bu metotlar *Dislokasyon* sınıfı içinde gerçeklenmektedir. *Çevre* sınıfının *adım* metodu ise *özellikGüncelle* ve *çoğalt* metotlarını çağırır.

Tablo 4.1. Repast benzetim motorunda metodların çizelgelemesinde kullanılan parametreler

Sınıf/Metod	Başlangıç (Start)	Aralık (Interval)	Öncelik (Priority)
KusurEtmeni/adım	1	1	1
Çevre/adım	1	1	0

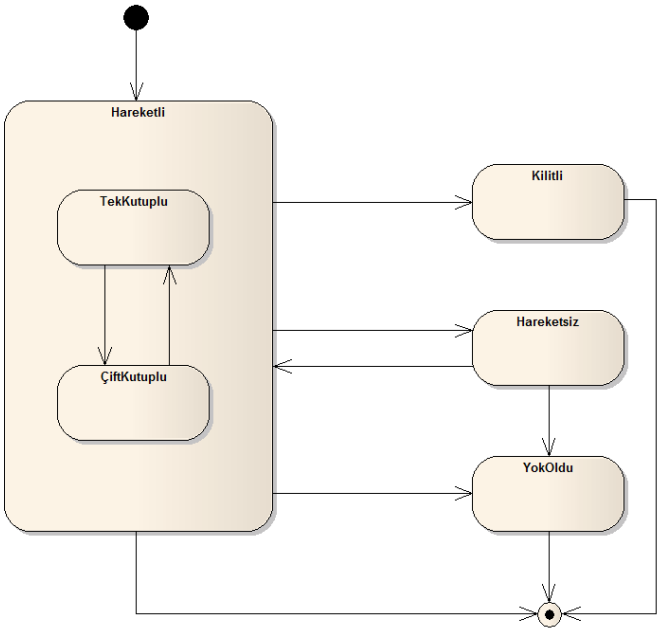
4.1.2.1. Etmenler

D.D.M.'de kenar dislokasyonları etmenleri oluşturmaktadır. Kenar dislokasyonları diğer dislokasyonlarla uzak mesafeli ve yakın mesafeli etkileşimde bulunmaktadır. Her bir dislokasyon etmeni diğer etmenlerle ve çevreyle olan etkileşimine bağlı olarak Şekil 4.6'da verilen durumlardan birinde olur.



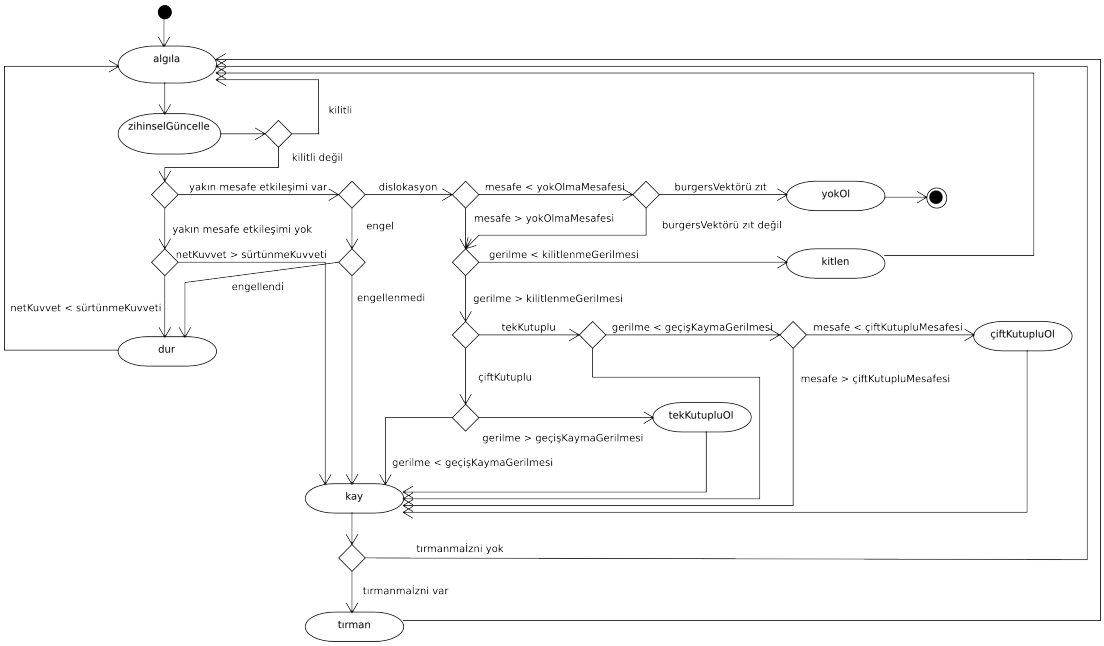
Şekil 4.5. Sınıf diyagramı

Dislokasyon etmeninin davranış diyagramı Şekil 4.7'de verilmiştir. Bu davranış *adım* metodunda kodlanmıştır.



Şekil 4.6. Dislokasyon etmeninin durum diyagramı

Uzak mesafeli etkileşim ve uygulanan dış gerilme dislokasyonların üzerinde kuvvet oluşturur ve bu da onların hareket etmelerine neden olur. Her bir kenar dislokasyonu bulundukları kayma düzleminde Burgers vektörüne paralel olarak hareket etmektedir. Bu durumda bir kenar dislokasyonunun hareketi için Denklem (2.16), (2.17) ve (2.18) kullanılabilir.



Şekil 4.7. Dislokasyon etmeninin davranış diyagramı

Denklem (2.17)'de verilen iç kuvvetlerin hesabında dislokasyonun algı yarıçapı içerisindeki diğer dislokasyonlar kullanılır. Bu durumda kuvvet hesabında bir süreksizlik oluşmaktadır. Algı yarıçapına yaklaştıkça ortaya çıkan bu durumun etkisini azaltmak amacıyla anahtarlama (switching) fonksiyonu kullanılmıştır[47]. Anahtarlama fonksiyonu kullanımı ile Denklem (2.12) aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\vec{\sigma}_{ij}=\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)r_{ij}}\begin{pmatrix}-\sin\theta & \cos\theta & 0\\ \cos\theta & -\sin\theta & 0\\ 0 & 0 & -2\nu\sin\theta\end{pmatrix}S(|\vec{r}_{ij}|) \tag{4.1}$$

Burada anahtarlama fonksiyonu aşağıdaki şekilde verilir.

$$S(|\vec{r}_{ij}|)=\begin{cases}(1-\dfrac{|\vec{r}_{ij}|^2}{R^2}) & eğer\,|\vec{r}_{ij}|<R\\ 0 & eğer\,|\vec{r}_{ij}|>R\end{cases} \tag{4.2}$$

Denklem (2.18) ve (2.19) ile verilen dislokasyon hızlarının sayısal entegrasyonu için trapezoid yöntemi kullanılmıştır. Buna göre,

$$r_{n+1}=r_n+\frac{\Delta t}{2}(v_{n+1}+v_n) \tag{4.3}$$

trapezoid kuralı ile dislokasyonların her bir zaman adımında kayma ve tırmanma yönlerinde gitmeleri gereken mesafe ayrı ayrı elde edilir.

Dislokasyonların hızı Denklem (2.18) ile verilen ısıl etkisiz ve Denklem (2.19) ile verilen ısıl etkili olmak üzere iki yolla hesaplanır. Tırmanma hareketi sıcaklığa bağlı olduğundan ısıl etkili model çalıştırıldığında ve malzemeye bağlı olarak kritik sıcaklık değeri aşıldığında dislokasyonlar tırmanma hareketini yapabilirler.

4.1.2.2. Kaynaklar

Engeller *KusurEtmeni* sınıfından türetilmektedir. Engellerin kristal içinde yayılımları ihmal edildiğinden *algıla*, *zihinselGüncelle* ve *yap* metodlarının içi boştur.

4.1.2.3. Çevre

Etmenlerin etkileşimde bulundukları çevre birinci derecede soyutlanarak ayrı bir sınıf olarak kodlanmıştır.

Çevre her bir zaman adımında etmenlerin ihtiyaç duyduğu bilgileri üretmekte ve benzetim motoru ile etmenler arasında aracılık yapmaktadır.

Etmenlerin benzetim motorundan istekleri özellikle çevre yoluyla yalıtılmıştır. Bu şekilde farklı bir benzetim motorunun kullanılması kolaylaştırılmıştır.

4.1.3. Çevreden etmenlere gelen bilgiler

Çevre tarafından aşağıdaki bilgiler etmenlere iletilmektedir:

- Malzeme
- Uygulanan dış gerilme
- Etmenlerin algı yarıçapları içerisindeki diğer etmenlerin listesi (Komşuluk)
- Sıcaklık

4.1.3.1. Malzeme

Bu çalışma kapsamında Y.M.K. tek kristal malzemeler ele alınmıştır. Tablo 4.2'de özellikleri verilen bakır ve alüminyum malzemelerine ait bilgiler çevre tarafından etmenlere aktarılır.

Tablo 4.2. Benzetimde kullanılan Cu ve Al malzemelerine ait sabit parametreler

Metal	Burgers vektörü (nm)	Poisson oranı	Kayma modülü (GPa)
Bakır	0,255	0,324	42
Alüminyum	0,238	0,350	26

Y.M.K. malzemelerde sıkı paketlemenin olduğu düzlem (111) düzlemidir. Kayma doğrultusu ise [110]'dır. Buna göre benzetimde kullanılan kayma sistemleri Tablo 4.3'de verilmiştir.

Tablo 4.3. Y.M.K. malzemelerde temel kayma sistemleri

Sistem No	Kayma düzlemi	Kayma doğrultusu
1	$(\bar{1}11)$	[110]
2	$(\bar{1}11)$	[101]
3	$(\bar{1}11)$	$[0\bar{1}1]$

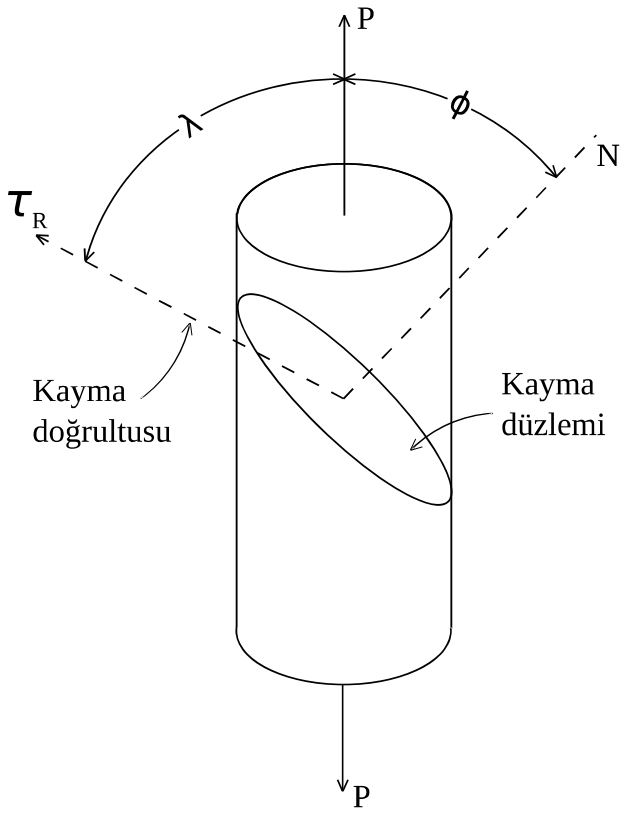
4.1.3.2. Dış gerilmenin hesaplanması

Uygulanan dış gerilme 3 farklı şekilde olabilmektedir:

1. Tekrarlı gerilme

2. Artımlı gerilme

3. Sabit gerilme



Şekil 4.8. Eksenel yükleme için kayma düzlemi ve kayma doğrultusundan oluşan kayma sistemi

Uygulanan gerilmenin kayma düzlemi üzerindeki değerinin bulunması için Schmid faktörü kullanılmıştır. Schmid faktörü aşağıdaki şekilde hesaplanmaktadır.

Şekil 4.8'de eksenel yükleme için kayma sistemi gösterilmiştir. Uygulanan kuvvetin kayma düzlemi üzerindeki değerini (Çözümlenmiş Kayma Gerilmesi) bulmak için Denklem (4.4) kullanılır.

$$\tau = (P/A)\cos\lambda\cos\phi = \sigma\cos\lambda\cos\phi = \sigma m \qquad (4.4)$$

Burada $m = \cos\lambda\cos\phi$ Schmid faktörü olarak anılmaktadır.

Örneğin [112] ekseninde yapılan bir yükleme sonucunda $(\bar{1}11)$ düzleminde ve [110] kayma doğrultusunda oluşan çözümlenmiş kayma gerilmesini bulmak için kullanılan Schmid faktörü $m = \sqrt{6}/9$ 'dur.

Tekrarlı gerilme sinüs dalgası olarak etki ettirilmektedir. Bu gerilmenin hesaplanmasında Denklem (4.5) kullanılmıştır.

$$\sigma_{dış} = \sigma_o \sin(w) \tag{4.5}$$

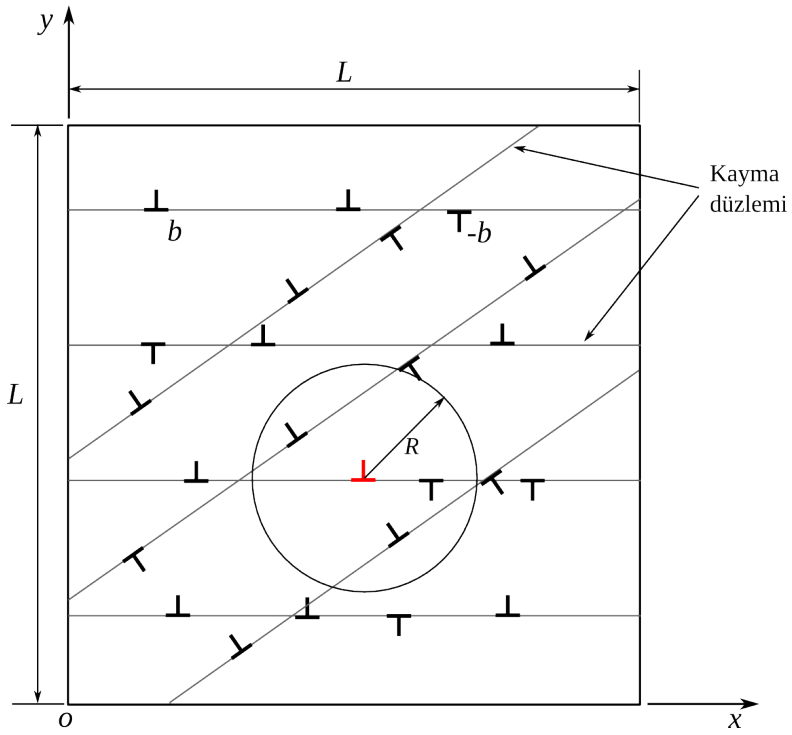
Burada $w = 2\pi f$'dır. *f*, frekans değeri *benzetimAdımı/tekrarlıAdımSayısı* şeklinde hesaplanmaktadır.

Artımlı gerilmede her bir zaman adımındaki uygulanacak $\Delta\sigma$ değerinin hesaplanması için Denklem (4.6) kullanılmıştır.

$$\Delta\sigma = \dot{\sigma}_{emredilen} \Delta t \tag{4.6}$$

4.1.3.3. Komşu listesinin oluşturulması

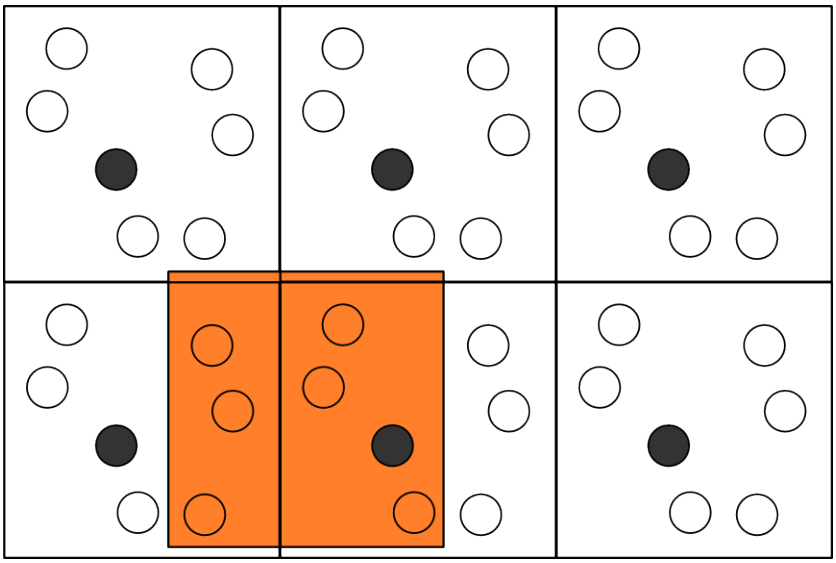
Dislokasyonların birbirleri ile uzak mesafeli elastik ve yakın mesafeli etkileşimleri için etrafındaki diğer dislokasyonların bilgisine ihtiyaç vardır. Her bir zaman adımında dislokasyon etmenleri Şekil 4.9'da gösterildiği gibi algı yarıçapları içinde kalan diğer etmenlerin listesini çevreden alırlar.



Şekil 4.9. Uzak mesafeli elastik kuvvet hesabı için kullanılan algılama yarıçapı

Periyodik sınır koşulları uygulandığında bir etmen üzerine etkiyen iç kuvvetlerin hesabında tüm alanlarda yer alan kopyaların kullanılması hesaplama yükü açısından

mümkün değildir. Bu nedenle komşular bulunurken aşağıda tanımlanan ve Şekil 4.10'da uygulaması gösterilen minimum imge kuralı (minimum image convention) kullanılmıştır[48].



Şekil 4.10. Minimum imge kuralının uygulanması

$$\begin{aligned} \Delta_{min} x &= \Delta x - kL = \Delta x - Lnint\left(\frac{\Delta x}{L}\right) \\ \Delta_{min} y &= \Delta y - kL = \Delta y - Lnint\left(\frac{\Delta y}{L}\right) \end{aligned} \tag{4.7}$$

Burada L, simülasyon penceresinin boyutunu ve *nint*, en yakın tamsayı fonksiyonunu belirtmektedir.

4.1.3.4. Sıcaklık

Dislokasyonların hareketi yüksek miktarda yitirgen bir süreç olup kristalin yerel sıcaklığını arttırmaktadır. Ancak model kapsamında sıcaklığın sabit kaldığı varsayılmıştır. Çalışmanın devamında bir değişim modelinin kolaylıkla eklenebilmesi amacıyla bu bilginin çevre tarafından etmenlere aktarılması planlanmıştır.

4.1.4. Deneysel çerçeveler

Geçerleme ve model sonuçlarının elde edilmesinde biçimselliği sağlamak amacıyla deneysel çerçeveler kullanılmıştır. Bir deneysel çerçeve gözlemlenecek olan sistemin veya modelin koşullarının kısıtlı bir kümesini karakterize eder. Benzetim deneyleri

için deneysel çerçeve model için gerekli olan tüm verilere ek olarak bir benzetim koşumundan diğerine değişkenlik gösteren verileri de içerir. Bir deneysel çerçeve aşağıdaki bilgileri içermelidir [49]:

- İlklendirme
- Girdi verilerinin değişimi
- Sonlandırma şartları
- Gözlenecek değişkenler
- Veri toplama ve birleştirme

D.D.M. modeli için deneysel çerçeve üst düzeyde Denklem (4.8)'deki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned} DÇ_{ETM} &= \langle G, B_G, Ç, sonŞart, veriTopla \rangle \\ &= \langle DÇ_{çevre}, \{DÇ_A\}, sonŞart, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{4.8}$$

Burada, *G*, girdilerin kümesini, B_G, girdilerin kabul edilebilir birleşimlerinin kümesini, *Ç*, çıktıların kümesini, *sonŞart*, modelin genel durumuna ve zamana bağlı olarak benzetim koşumunun nasıl sonlandırılacağını belirleyen fonksiyonu, *veriTopla*, benzetim koşumu süresince veri toplama ve birleştirme fonksiyonunu ifade etmektedir.

$DÇ_{çevre}$ ve $DÇ_A$ alt düzey deneysel çerçevedirler ve Denklem (4.9)'da verildiği şekilde tanımlanırlar.

$$\begin{aligned} DÇ_{çevre} &= \langle G, B_G, Ç, veriTopla \rangle \\ DÇ_A &= \langle G, B_G, Ç, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{4.9}$$

Buradaki farklı *G* ve *Ç* kümeleri modelin dış dünyaya olan arayüzleri gibi görülebilir.

D.D.M. için girdiler aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\begin{aligned} G = \{ &\{EtmenSayıları\}, \{Malzeme\}, \{Yükleme\}, sürtünmeGerilmesi, \\ &yokOlmaMesafesi, çiftKutupluMesafesi, sıcaklık, ısılEtki, \\ &tırmanmaİzni, gevşemeAdımSayısı, kutuUzunluğu, zamanAdımı \} \end{aligned} \tag{4.10}$$

EtmenSayıları kümesi aşağıdaki değişkenleri içerir.

$$EtmenSayıları = \{dislokasyonSayısı, dislokasyonÇoğalmaHızı, engelSayısı\} \quad (4.11)$$

Burada *dislokasyonSayısı*, benzetim başlangıcında oluşturulacak dislokasyon sayısını, *dislokasyonÇoğalmaHızı*, benzetim adımı başına yeni oluşturulacak dislokasyon sayısını ve *engelSayısı* başlangıçta oluşturulacak engel sayısını belirtir. Malzeme kümesi benzetimde kullanılan malzemelerin aşağıda verilen özelliklerini içerir.

$$\begin{aligned} Malzeme = \{ & burgersVektörüŞiddeti, poissonOranı, kaymaModülü, \\ & sönümlenmeKatsayısı, efektifGerilme, aktivasyonEnerjisi, \\ & sabitHız, kaymaDüzlemiAralığı, \{KaymaSistemi\}\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Kayma sistemi aşağıdaki değişkenlerden oluşmaktadır.

$$\begin{aligned} KaymaSistemi = \{ & sistemNo_1, kaymaDüzlemi_1, kaymaDoğrultusu_1, \\ & sistemNo_2, kaymaDüzlemi_2, kaymaDoğrultusu_2, \ldots, \\ & sistemNo_n, kaymaDüzlemi_n, kaymaDoğrultusu_n\} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Benzetim kapsamında bakır ve aluminyum malzemeleri kullanılmıştır. Bu malzemelere ait girdi değişkenleri aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned} Cu = \{ & 0{,}255\,nm, 0{,}324, 42\,GPa, 5{,}0\,x\,10^{-5}\,Pa\ s, 2{,}62\,GPa, 1{,}0\,x\,10^{6}\,eV, \\ & 1600\,ms^{-1}, 100\,nm, \{1, (\bar{1}\,1\,1), [1\,1\,0], 2, (\bar{1}\,1\,1), [1\,0\,1], \\ & 3, (\bar{1}\,1\,1), [0\,\bar{1}\,1]\}\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} Al = \{ & 0{,}238\,nm, 0{,}35, 26\,GPa, 5{,}0\,x\,10^{-4}\,Pa\ s, 2{,}62\,GPa, 1{,}0\,x\,10^{6}\,eV, \\ & 1600\,ms^{-1}, 100\,nm, \{1, (\bar{1}\,1\,1), [1\,1\,0], 2, (\bar{1}\,1\,1), [1\,0\,1], \\ & 3, (\bar{1}\,1\,1), [0\,\bar{1}\,1]\}\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Dışarıdan uygulanan gerilmeye ilişkin bilgileri içeren *Gerilme* kümesi aşağıdaki girdi değişkenlerini içerir.

$$\begin{aligned} Yükleme = \{ & yüklemeTipi, maksimumDışGerilme, yüklemeYönü, \\ & tekrarSayısı, tekrarlıAdımSayısı, gerilmeHızı\} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Yükleme *tekrarlı*, *artımlı* veya *sabit* olarak seçilebilmektedir. *tekrarlı* yüklemeye bir örnek aşağıda verilmiştir.

$$Yükleme = \{tekrarlı, 100\,MPa, [112], 5, 200, 0\} \tag{4.17}$$

Denklem (4.17)'de verilen örnekte, [112] yönünde, 100 MPa genlikli, her bir tekrar 200 benzetim adımı olacak şekilde toplam 5 tekrarlı yükleme yapılacaktır. Sonuçların değerlendirilmesi amacıyla kullanılacak olan model çıktıları aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned} Ç = \{ & benzetimAdımı, ortalamaKaymaHızı, ortalamaTırmanmaHızı, \\ & ortalamaNetGerilme, dışGerilme, enerji, dislokasyonSayısı, \\ & hareketliDislokasyonSayısı, yokOlanDislokasyonSayısı, \\ & çiftKutupluDislokasyonSayısı, çoğalanDislokasyonSayısı, \\ & kitlenenDislokasyonSayısı\} \end{aligned} \tag{4.18}$$

Çıktılarda yer alan değişkenler aşağıdaki denklemlerle hesaplanmaktadır. Burada, *ortalamaNetGerilme*, dislokasyonlar üzerindeki net gerilmenin ortalamasını,

$$\langle \sigma^{net} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \sigma_{ij} + \sigma^{dış} - \sigma_{sürtünme} \right) \tag{4.19}$$

ortalamaKaymaHızı, hareketli dislokasyonların kayma hızlarının ortalama karekökünü,

$$\langle v_{RMS} \rangle = \sqrt{\frac{1}{N_m} \sum_{i=1}^{N_m} v_i^2} \tag{4.20}$$

enerji, dislokasyonların hızlarından elde edilen yaklaşık kinetik enerjiyi,

$$E \approx \sum_{i=1}^{N} v_i^{\,2} \tag{4.21}$$

belirtmektedir. *sonŞart* işlevi benzetim adımı üzerinden koşumun sonlandırılmasını sağlar. *veriTopla* çıktı değişkenlerini güncelleyen bir işlevdir ve

$$veriTopla : Ç \rightarrow Ç \tag{4.22}$$

olarak tanımlanır.

4.2. Modelin Doğrulanması Ve Geçerlenmesi

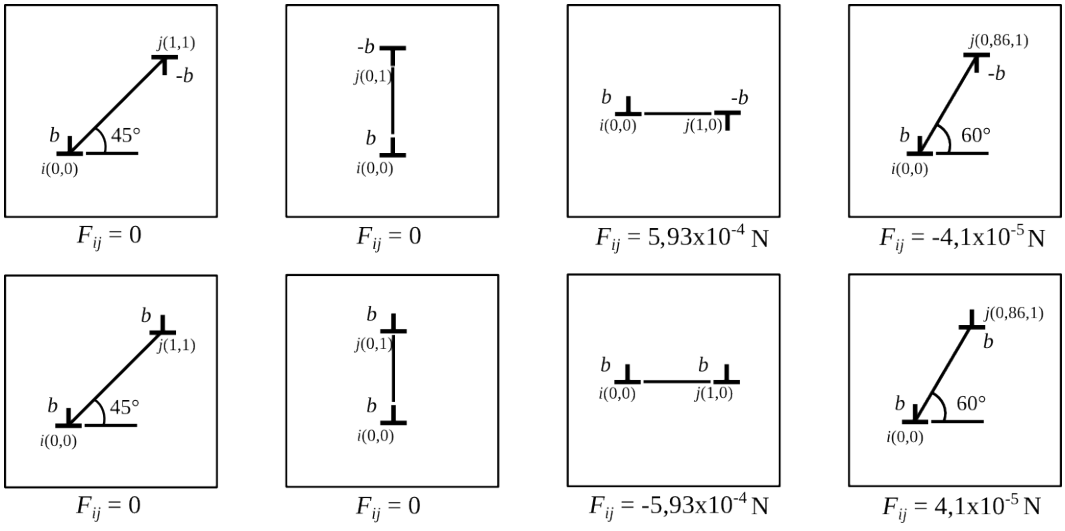
Geliştirilen D.D.M.'in, iki ana süreçten geçirilmesi gerekmektedir. Birincisi, modelin çıkış noktasına ve beklenen isteklere uygunluğunu denetleyen ve doğru modelin oluşturulmasını sağlayan doğrulama sürecidir. İkincisi, modelin gerçek dünyadaki asıl sisteme olan yakınlığını denetleyen ve modelin doğru çalışmasını sağlayan geçerleme sürecidir. Her iki süreç modelin kabul edilebilirliği açısından büyük önem taşımaktadır.

4.2.1. Modelin doğrulanması

Modelin doğrulama çalışmaları, etmenlerin davranışlarına yönelik kullanılan algoritmaların MATLAB kodlarının Java kodları ile karşılaştırmasını içeren birim testleri ile gerçekleştirilmiştir. Bu kapsamda yapılan çalışmalar şunlardır:

1. İki dislokasyonun uzak mesafeli kuvvet birim testleri

İki dislokasyonun tipik biçimlenmeleri göz önüne alınarak uzak mesafeli etkileşim sonucunda dislokasyon üzerinde oluşan kuvvetin MATLAB hesaplarıyla karşılaştırılması yapılmıştır. Şekil 4.11'de birim testlerde göz önüne alınan dislokasyon biçimlenmeleri verilmiştir. Bu testler tek kristal bakırın özellikleri kullanılarak gerçekleştirilmiştir.



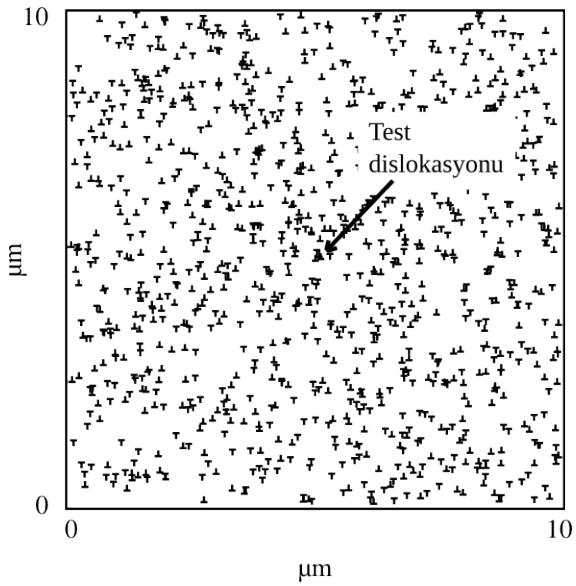
$F_{ij} = 0$ $F_{ij} = 0$ $F_{ij} = 5{,}93\text{x}10^{-4}$ N $F_{ij} = -4{,}1\text{x}10^{-5}$ N

$F_{ij} = 0$ $F_{ij} = 0$ $F_{ij} = -5{,}93\text{x}10^{-4}$ N $F_{ij} = 4{,}1\text{x}10^{-5}$ N

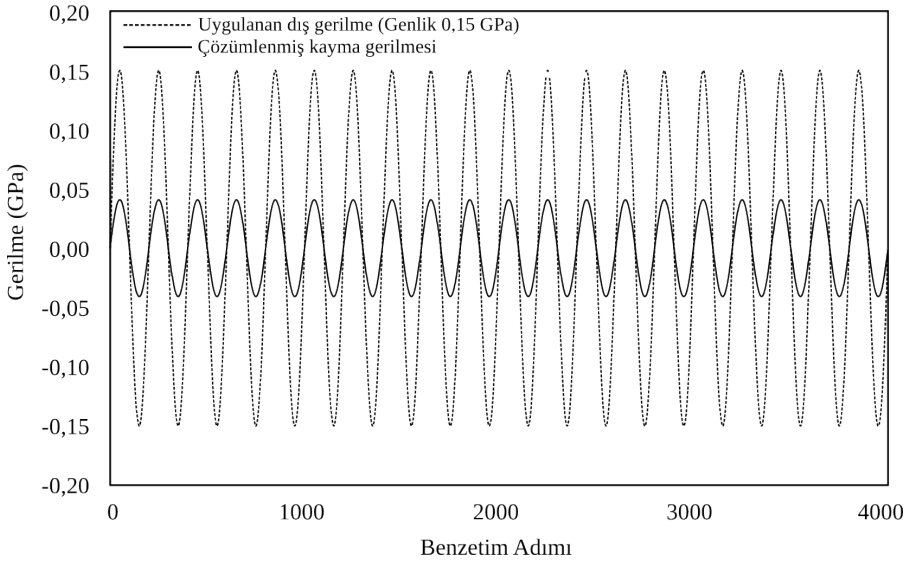
Şekil 4.11. İki dislokasyonun uzak mesafeli etkileşiminin birim testlerinde kullanılan tipik biçimlenmeler

2. Çok sayıda dislokasyonun uzak mesafeli kuvvet birim testi

Bu kapsamda 1000 adet rastgele yerleştirilmiş dislokasyonun test dislokasyonu üzerinde oluşturdukları uzak mesafeli kuvvet MATLAB sonucu ile karşılaştırılmıştır. Şekil 4.12'de kullanılan test verisinin dağılımı ve test dislokasyonu gösterilmiştir.



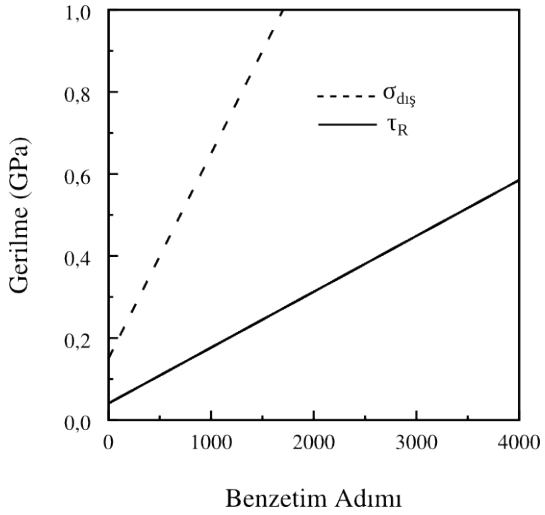
Şekil 4.12. Çok sayıda dislokasyonun uzak mesafeli kuvvet birim testinde kullanılan dislokasyon dağılımı ve test dislokasyonu



Şekil 4.13. Uygulanan tekrarlı dış gerilme ve çözümlenmiş kayma gerilmesi birim test sonucu

3. Uygulanan dış gerilme birim testleri

Tekrarlı ve artımlı modlarda uygulanan dış gerilme ve buna bağlı kayma düzlemlerinde oluşan çözümlenmiş kayma gerilmesinin MATLAB sonuçlarıyla karşılaştırması yapılmıştır. Şekil 4.13'te 0,15 GPa genlikle [112] yönünde uygulanan tekrarlı gerilmeye karşılık, ($\bar{1}11$) kayma düzleminde ve [110] kayma doğrultusunda oluşan çözümlenmiş kayma gerilmesi verilmiştir. Şekil 4.14'te aynı kayma sistemi için uygulanan artımlı gerilmeye karşılık çözümlenmiş kayma gerilmesi verilmiştir.



Şekil 4.14. Uygulanan artımlı dış gerilme ve çözümlenmiş kayma gerilmesi birim test sonucu

4.2.2. Modelin geçerlenmesi

Modelin geçerlenmesi için üç seviyeli bir yöntem izlenmiştir. Seviyelendirme tek bir dislokasyon etmeninin geçerlenmesinden başlayarak makro düzeyde desen oluşumunun geçerlenmesine doğru karmaşıklığın giderek arttırılması ile yapılmıştır. Bu şekilde basit yapıların öncelikle geçerlenmesi karmaşık etkileşim durumlarının geçerlenmesini kolaylaştırmaktadır.

4.2.2.1. Birinci seviye geçerleme

Bu seviyede tek bir dislokasyonun hareketine yoğunlaşarak, üzerine etkiyen kuvvetler doğrultusunda hareket edip etmediğinin incelemesi ve geçerlemesi yapılmıştır. Bu kapsamda yapılan çalışmalar şunlardır:

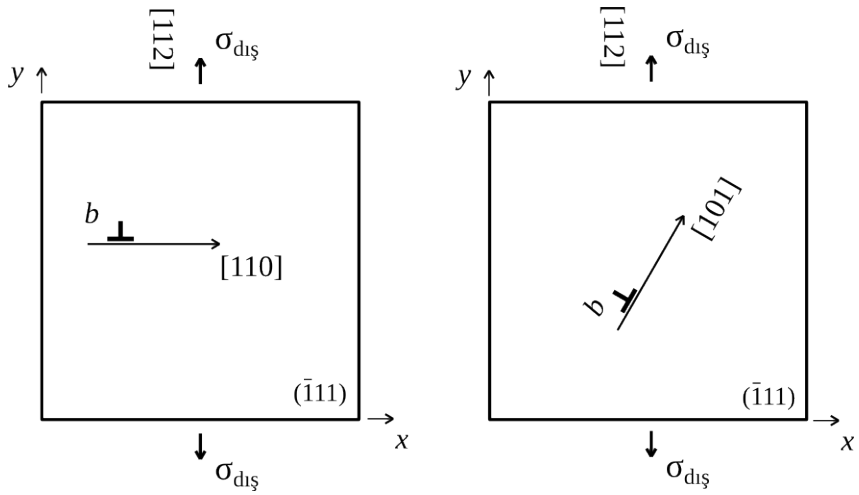
1. Tek dislokasyonun hareket testi

Tek dislokasyonun uygulanan dış gerilmeye uygun olarak hareket etmesi gerekmektedir. Bu amaçla Şekil 4.15'te gösterildiği gibi iki kayma doğrultusunda iki farklı malzeme ile test yapılmış ve yer değiştirme miktarı, kayma hızı ve efektif gerilme değerlerinin birbiriyle uyumlu olduğu görülmüştür. Testin sonuçları Şekil 4.16 ve 4.17'de gösterilmiştir. Bu amaçla kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

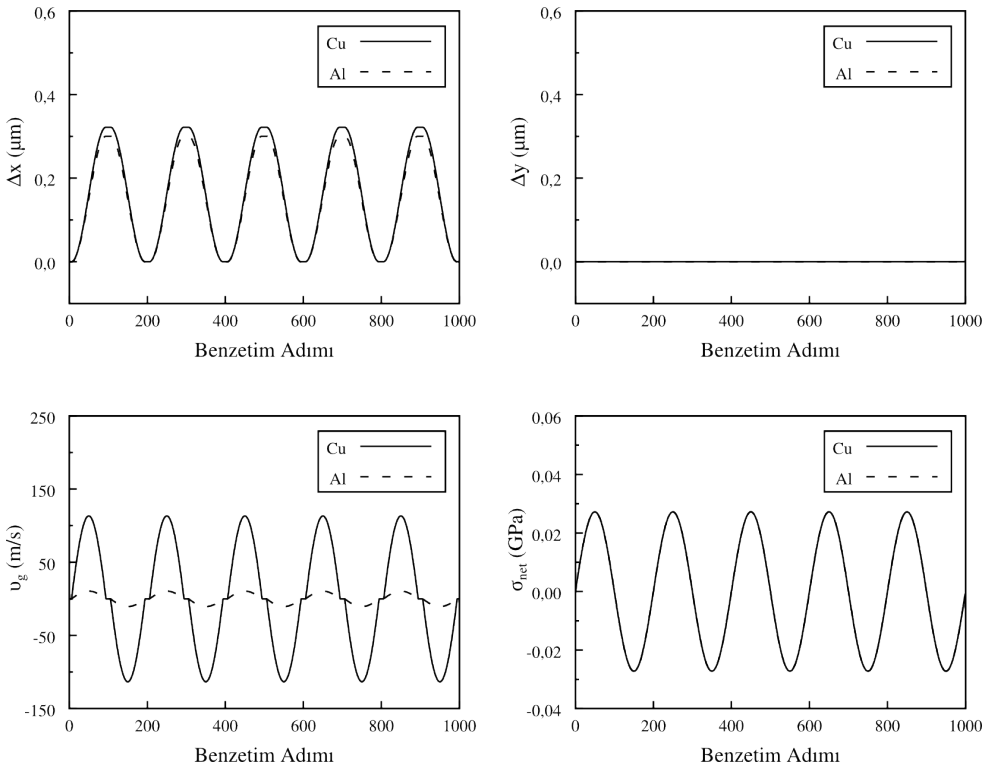
$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-Test1} = \langle & G, \{\{(1,0,0)\} \times (Cu, Al) \times \{tekrarlı, 100\,MPa, [112], \\ & 5,200,0\} \} \times (5\,MPa) \times (0) \times (0) \times (0) \times (hayır) \times (hayır) \\ & \times (0) \times (10\,\mu m) \times (50, 500\,ps) \}, Ç, \{t > 1000\}, veriTopla \rangle \end{aligned} \quad (4.23)$$

Tek bir dislokasyon [110] ve [101] kayma doğrultularında oluşturularak Denklem (4.23) ve (4.24)'de verilen çerçevelerle test edilmiştir. Bu test amacıyla yaratılan dislokasyon etmeninin deneysel çerçevesi aşağıda verilmiştir.

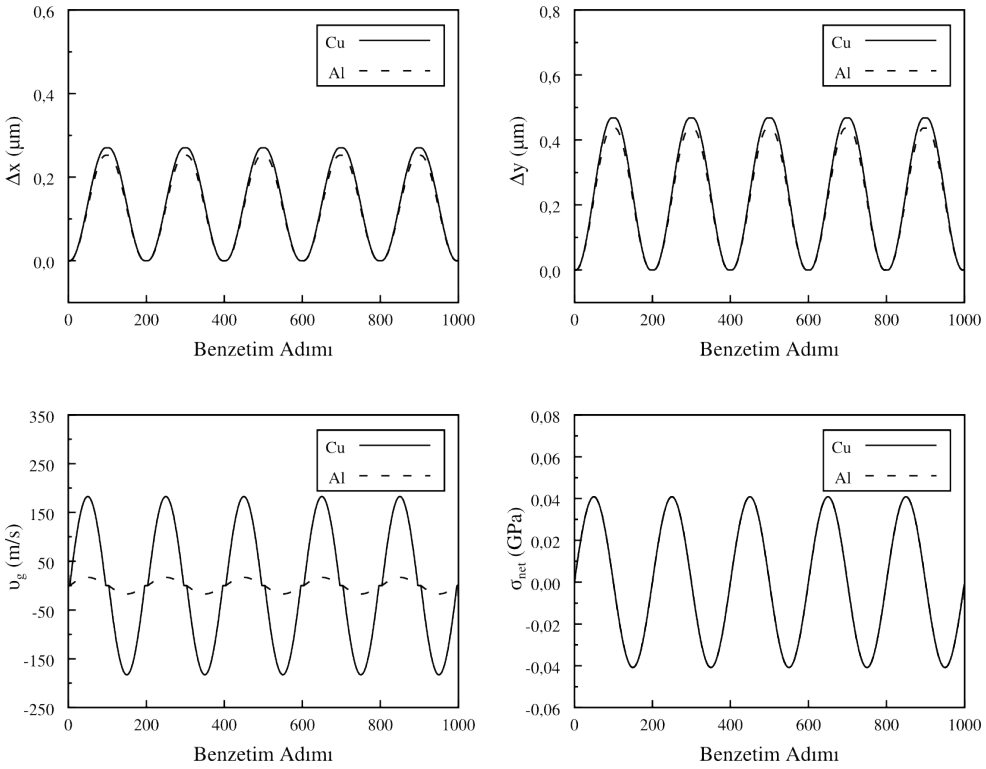
$$\begin{aligned} DÇ_{dis-Test1} = \langle & AM_{dis}, \{konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, \\ & algıYarıÇapı\}, \{(0,5,0), 1,0, (1,2), 5\,\mu m\}, \\ & \{benzetimAdımı, konum, kaymaHızı, netGerilme\}, veriTopla \rangle \end{aligned} \quad (4.24)$$



Şekil 4.15. [110] ve [101] kayma doğrultularında tek dislokasyonun hareket testi için kullanılan iki yerleşim



Şekil 4.16. [110] kayma doğrultusunda elde edilen x/y eksenlerindeki kayma mesafesi, dislokasyonun kayma hızı ve dislokasyonun üzerindeki net gerilme



Şekil 4.17. [101] kayma doğrultusunda elde edilen x/y eksenlerindeki kayma mesafesi, dislokasyonun kayma hızı ve dislokasyonun üzerindeki net gerilme

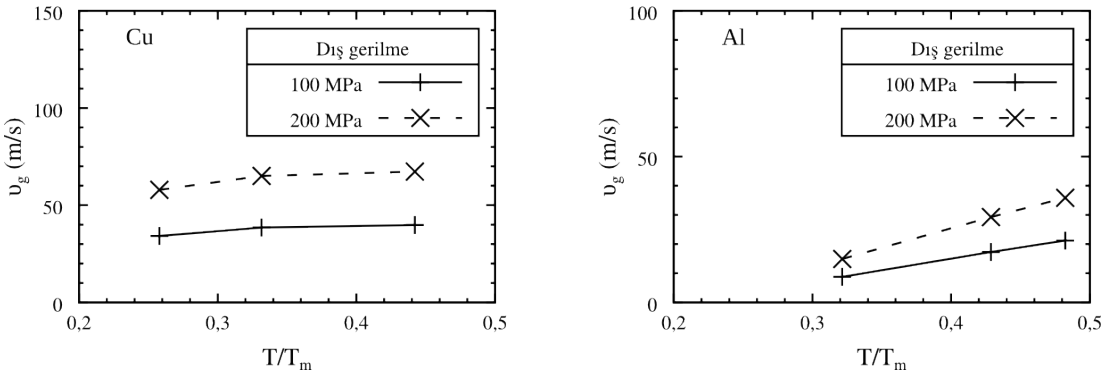
2. Tek dislokasyon üzerinde ısıl etki testi

Isıl etkinin dislokasyon üzerindeki etkisini incelemek amacıyla çeşitli sıcaklıklarda ve dış gerilme değerlerinde test yapılmıştır. Bunun sonucu olarak Şekil 4.18'de gösterildiği gibi artan sıcaklık ve gerilme ile beraber dislokasyon hızlarının da arttığı gözlenmiştir.

Testte kullanılan deneysel çerçeveler aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{DDM-Test2} = \langle G, \{\{(1,0,0)\}\times(Cu, Al)\times\{(sabit, (100,200\,MPa), [112], 5, 200,0)\}\times(0)\times(0)\times(0)\times\{(350, 450, 600^\circ K), (300,400,450^\circ K)\}\times(evet)\times(hayır)\times(0)\times(10\,\mu m), \times(50, 500\,ps)\}, Ç, \{t>2\}, veriTopla\rangle \quad (4.25)$$

$$DÇ_{dis-Test2} = \langle AM_{dis}, \{konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, algıYarıÇapı\}, \{(5,5), 1, 1,5\,\mu m\}, \{kaymaHızı\}, veriTopla\rangle \quad (4.26)$$



Şekil 4.18. Sıcaklığın dislokasyon hızları üzerindeki etkisi

Testte kullanılan sıcaklık değerleri Tablo 4.4'de verilmiştir.

Tablo 4.4. Isıl etki testinde kullanılan sıcaklık değerleri ve ergime sıcaklığına oranları

Cu (T_m=1357°K)		Al (T_m=933°K)	
Sıcaklık (°K)	T/T_m	Sıcaklık (°K)	T/T_m
350	0,258	300	0,321
450	0,331	400	0,428
600	0,442	450	0,482

4.2.2.2. İkinci seviye geçerleme

Bu seviyede iki dislokasyonun hareketine ve birbirleri arasındaki etkileşime yoğunlaşılarak temel hareket ve etkileşimler incelenmiş ve geçerlemesi yapılmıştır. Bu kapsamda yapılan çalışmalar şunlardır:

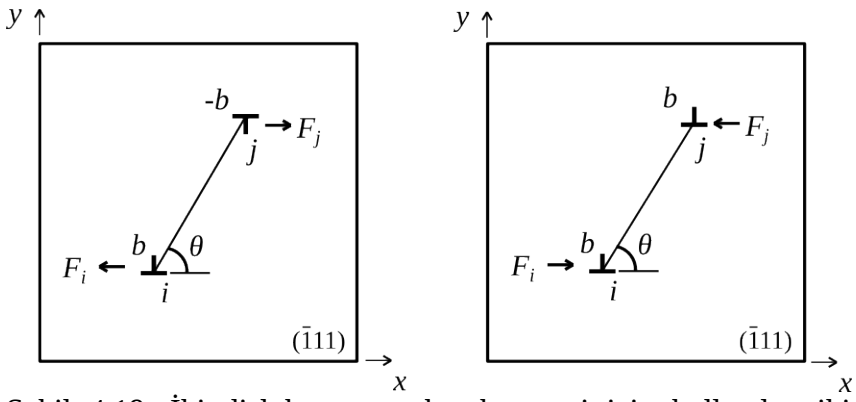
1. İki dislokasyonun hareket testi

Belli bir uzaklıkta bulunan iki dislokasyon birbirleri üzerine uzak mesafeli etkileşimde bulunurlar. Dislokasyonlar Burgers vektörlerine bağlı olarak etraflarında oluşturdukları gerilme alanının konumlanmasına göre birbirlerine itme veya çekme kuvveti uygularlar ve denge durumuna gelirler. Bunun test edilebilmesi amacıyla iki dislokasyon Şekil 4.19'da gösterildiği gibi iki farklı biçimlenme şeklinde yerleştirilmiştir.

Birinci biçimlenmede aralarındaki açı 45°'den az olarak yerleştirilen dislokasyonlar zıt Burgers vektörlerine sahiptir ve birbirlerini itmektedirler. Sonuç olarak kuvvetin sıfırlandığı 45°'ye doğru iki dislokasyon hareket ederek denge durumuna gelirler.

İkinci biçimlenmede yine aralarındaki açı 45°'den az olarak yerleştirilen dislokasyonlar aynı Burgers vektörlerine sahiptir ve birbirlerini çekmektedirler. İki dislokasyon arasındaki kuvvet sıfırlanarak 0°'de denge durumuna gelirler.

Bu testte dış gerilme ve sürtünme gerilmesi sıfır olarak alınmıştır. Dislokasyonlar üzerine etkiyen kuvvet sadece Peach-Koehler kuvvetinden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.19. İki dislokasyonun hareket testi için kullanılan iki farklı yerleşim

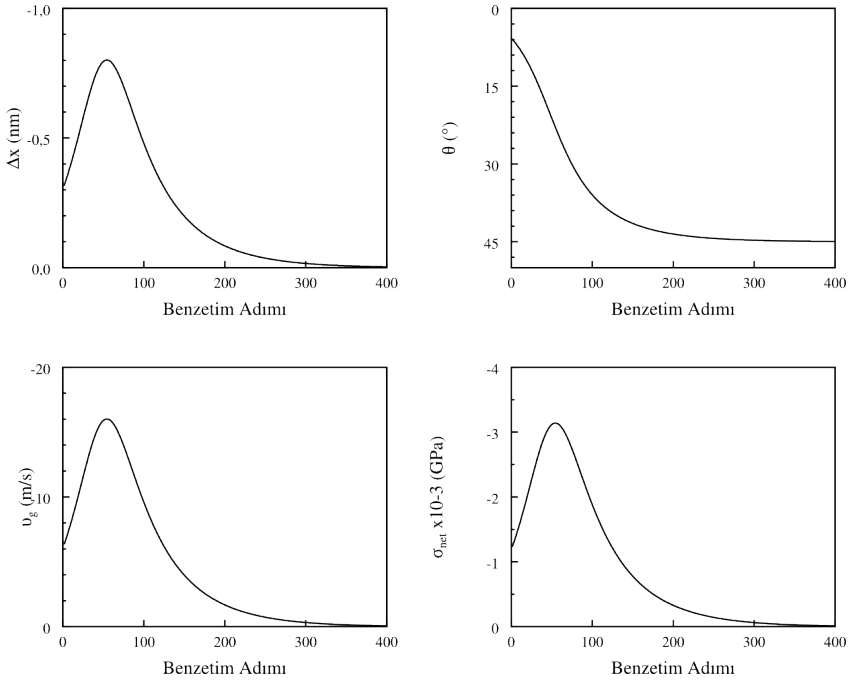
Kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{DDM-Test3} = \langle G, \lfloor \{(2,0,0)\} \times (Cu) \times \lfloor (tekrarlı, 0, [112], 5, 200, 0) \rfloor \times (0) \times (0) \times (0) \times (0) \times (hayır) \times (hayır) \times (0) \times (10\mu m) \times (50\, ps) \rfloor, Ç, \{t > 400\}, veriTopla \rangle \quad (4.27)$$

Bu test amacıyla yaratılan dislokasyon etmenlerinin deneysel çerçeveleri aşağıda verilmiştir.

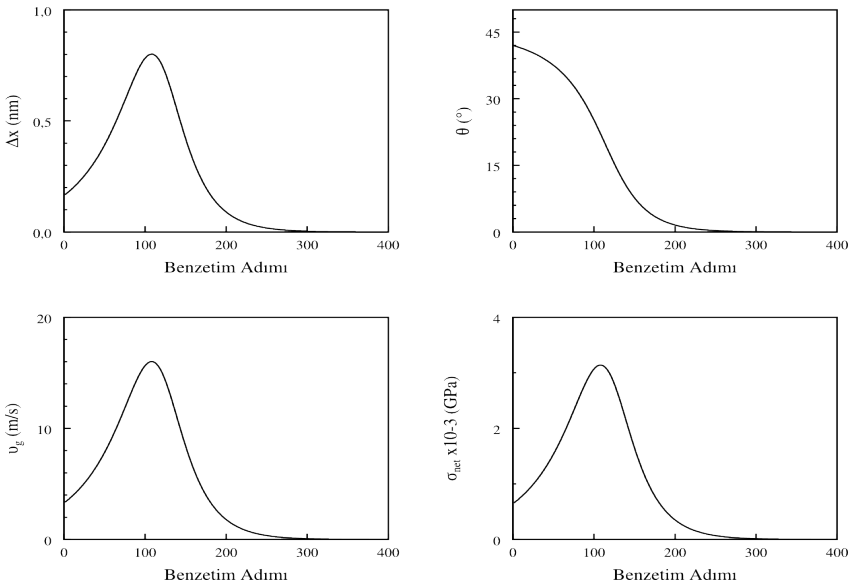
$$DÇ_{dis-Test3_1} = \langle AM_{dis}, \lfloor konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, algıYarıÇapı \rfloor, \{\{(4{,}99, 4, 9), (5{,}01, 5, 1)\}, (1, -1), 1{,}5\mu m\} \{benzetimAdımı, konum, kaymaHızı, netGerilme\}, veriTopla \rangle \quad (4.28)$$

$$DÇ_{dis-Test3_2} = \langle AM_{dis}, \lfloor konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, algıYarıÇapı \rfloor, \{\{(4{,}91, 4, 9), (5{,}09, 5, 1)\}, (1, 1), 1{,}5\mu m\} \{benzetimAdımı, konum, kaymaHızı, netGerilme\}, veriTopla \rangle \quad (4.29)$$



Şekil 4.20. Birbirlerini iterek uzaklaşan iki dislokasyonun konum, hız, açı ve net gerilme değerleri

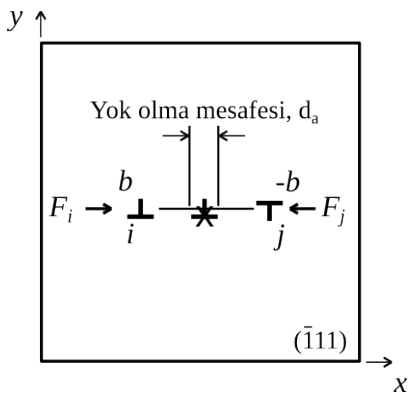
Yukarıda verilen deneysel çerçeveler ile modelden elde edilen çıktılar Şekil 4.20 ve 4.21'de verilmiştir. Her iki durumda da dislokasyonların etki eden kuvvet nedeniyle önce hızlandıkları, ancak kuvvet azalmaya başlayınca yavaşladıkları ve en sonunda denge konumuna geldikleri gözlenmektedir.



Şekil 4.21. Birbirlerini çekerek yaklaşan iki dislokasyonun konum, hız, açı ve net gerilme değerleri

2. Yok olma mesafesi testi

Zıt Burgers vektörlerine sahip iki dislokasyonun birbirlerini yok etmesini test etmek amacıyla Şekil 4.22'de verilen yerleşim kullanılmıştır.



Şekil 4.22. Yok olma mesafesi testi için kullanılan yerleşim

Yok olma testi için kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{DDM-Test4} = \langle G, \{\{(2,0,0)\}\times(Cu)\times\{(tekrarlı,0,[112],5,200,0)\} \times(0.0)\times(40\text{b},60\text{b},130\text{b})\times(0)\times(0)\times(hayır)\times(hayır) \times(0)\times(10\,\mu m)\times(50\,ps)\}, Ç, \{t>200\}, veriTopla\rangle \quad (4.30)$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{dis-Test4} = \langle AM_{dis}, \{konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, algıYarıÇapı\}, \{\{(4,7,5),(5,3,5)\},(1,-1),1,5\mu m\} \{benzetimAdımı, konum, kaymaHızı, netGerilme\}, veriTopla\rangle \quad (4.31)$$

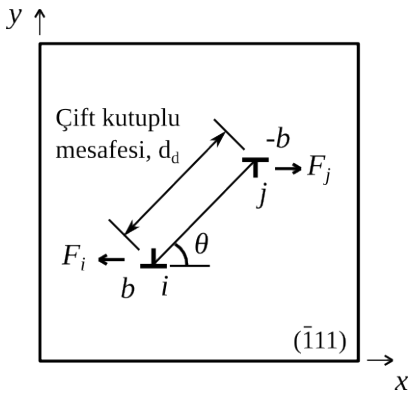
Modele girilen farklı yok olma mesafe değerleri için çıktılar elde edilmiştir. Bu değerler Tablo 4.5'de verilmiştir. Girdi ve çıktı arasındaki fark seçilen zaman adımından (50 ps) kaynaklanmaktadır.

Tablo 4.5. Yok olma mesafesi girdi ve çıktı değerlerine ait test sonuçları

Sıra No	d_a Girdi	d_a Çıktı
1	40*b*	35*b*
2	60*b*	45*b*
3	130*b*	124*b*

3. Çift kutuplu mesafesi testi

Zıt Burgers vektörlerine sahip iki dislokasyonun çift kutupluluk durumunu test etmek amacıyla Şekil 4.23'te verilen yerleşim kullanılmıştır.



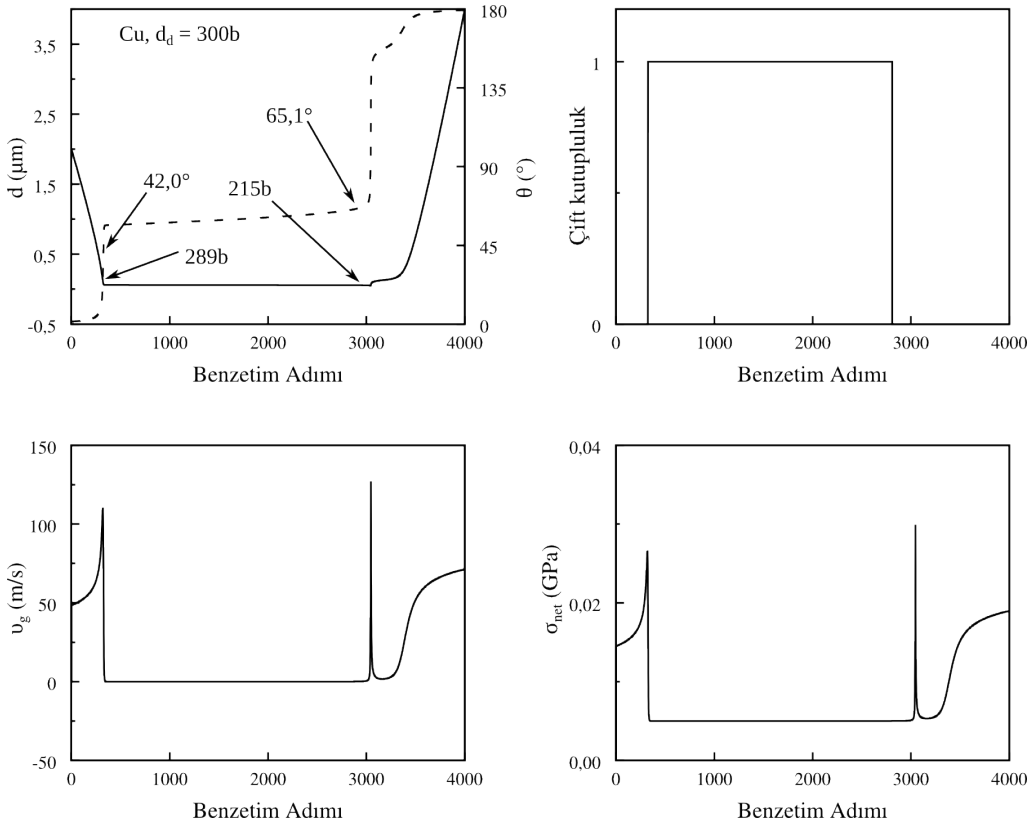
Şekil 4.23. Çift kutuplu mesafesi testi için kullanılan yerleşim

Çift kutuplu mesafesinin ölçülmesine ilişkin kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{DDM-Test5} = \langle G, \{\{(2,0,0)\} \times (Cu) \times \{\langle artımlı, 50\,MPa, [112], 5, 200, 1{,}0\,x10^{5} GPa\ s^{-1}\rangle\} \times (5\,MPa) \times (0) \times (300\text{b}) \times (0) \times (hayır) \times (hayır) \times (0) \times (10\,\mu m) \times (50\,ps)\}, Ç, \{t > 4000\}, veriTopla\rangle \quad (4.32)$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{dis-Test5} = \langle AM_{dis}, \{konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, algıYarıÇapı\}, \{\{(5,5), (7,5,05)\}, (1,-1), 1,5\,\mu m\}, \{benzetimAdımı, konum, kaymaHızı, netGerilme\ kutupluluk\}, veriTopla\rangle \quad (4.33)$$



Şekil 4.24. Çift kutuplu durumu oluşturan iki dislokasyona ait mesafe, çift kutupluluk, hız ve net gerilme değerleri

Yukarıdaki deneysel çerçeveler için modelden alınan sonuçlar Şekil 4.24'te verilmiştir. Artımlı yükleme altında birbirlerine yaklaşan iki dislokasyon çift kutupluluk şartlarının oluşmasıyla ($25^o < \theta < 65^o$ ve $d_d < 300b$) çift kutuplu hale gelmişler ve sonrasında artan yükleme sonucunda açı şartı bozulmuş ve çift kutupluluk durumu kalkmıştır.

4.2.2.3. Üçüncü seviye geçerleme

Bu seviyede çoklu etmen hareketleri, birbirleri arasındaki etkileşimler ve desen oluşumu incelenerek geçerlemesi yapılmıştır. Bu kapsamda yapılan çalışmalar şunlardır:

1. Dislokasyon duvarlarının oluşum testi

K.K.B.'nin oluşumu, tekrarlı biçim değiştirme altında paralel kenar dislokasyonların hareketi ile temsil edilir. Zıt Burgers vektörlerine sahip kenar dislokasyonları çift kutuplu olabilirler veya birbirlerini yok edebilirler. Bakır üzerinde yapılan deneysel çalışmalar kaymaya göre tırmanmanın ihmâl edilebileceğini göstermektedir [29]. Genellikle oda sıcaklığında yapılan yorulma deneylerinde tırmanma hızı, kayma hızına göre çok düşük olmaktadır. Bu nedenle dislokasyon hareketi sadece kayma ile sınırlandırılmıştır.

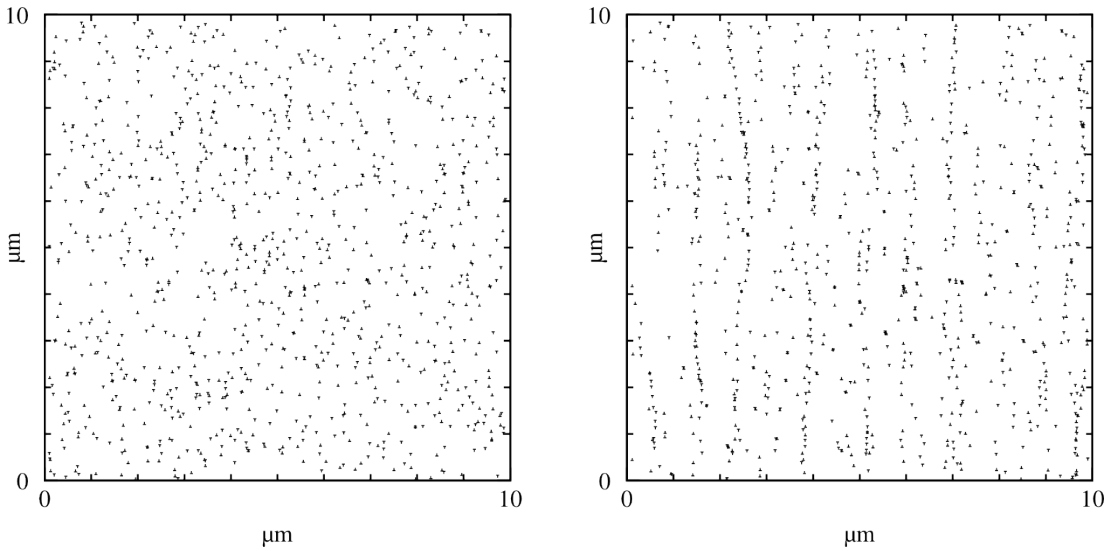
K.K.B. içersinde oluşan dislokasyon duvarlarının benzetimi amacıyla kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-Test6} = \langle & G, \{\{(1000,0,0)\}\times(Cu)\times\{(tekrarlı, 100\,MPa, [112], 5, \\ & 200, 0)\}\times(5\,MPa)\times(40\text{b})\times(300\text{b})\times(0) \\ & \times(hayır)\times(hayır)\times(200)\times(10\,\mu m)\times(50\,ps)\}, Ç, \\ & \{t > 4000\}, veriTopla\rangle \end{aligned} \tag{4.34}$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

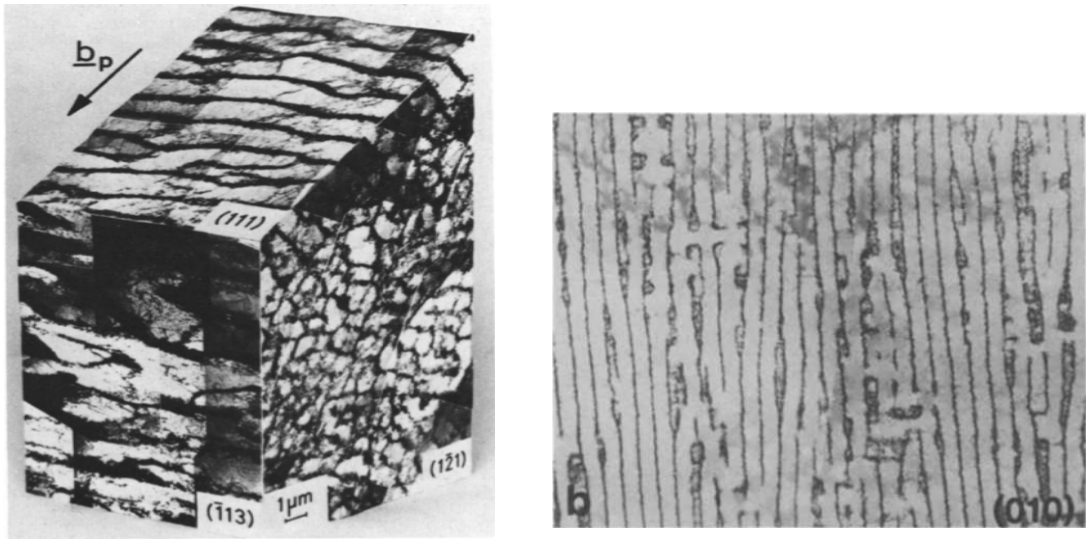
$$\begin{aligned} DÇ_{dis-Test6} = \langle & AM_{dis}, \{konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, \\ & algıYarıÇapı\}, \{rastgeleKonum, rastgeleBurgersVektörü, \\ & (2,3), 5\,\mu m\}, \{benzetimAdımı, konum, hız\}, veriTopla\rangle \end{aligned} \tag{4.35}$$

Bu testte 1000 adet dislokasyon, toplam Burgers vektörleri sıfır olacak şekilde rastgele 10x10 μm boyutundaki benzetim kutusuna dağıtılmış ve 200 benzetim adımı boyunca gevşeyerek dengeye gelmesi beklenmiştir. Ardından 100 MPa genlikli 5 tekrar dış gerilme uygulanmıştır. Başlangıçtaki dislokasyon dağılımı ve 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon duvarları Şekil 4.25'te gösterilmiştir.



Şekil 4.25. Dislokasyon duvarlarının oluşumu, dislokasyonların başlangıçtaki ve 4000 benzetim adımı sonucundaki konumları

Model sonuçları yazında yer alan deneysel ve bilgisayar benzetimi sonuçları ile uyumluluk göstermektedir. Tek kristal bakırda tekrarlı yükleme sonucunda oluşan K.K.B. ve dislokasyon duvarlarına ait deneysel çalışmalar Şekil 4.26'da gösterilmiştir.

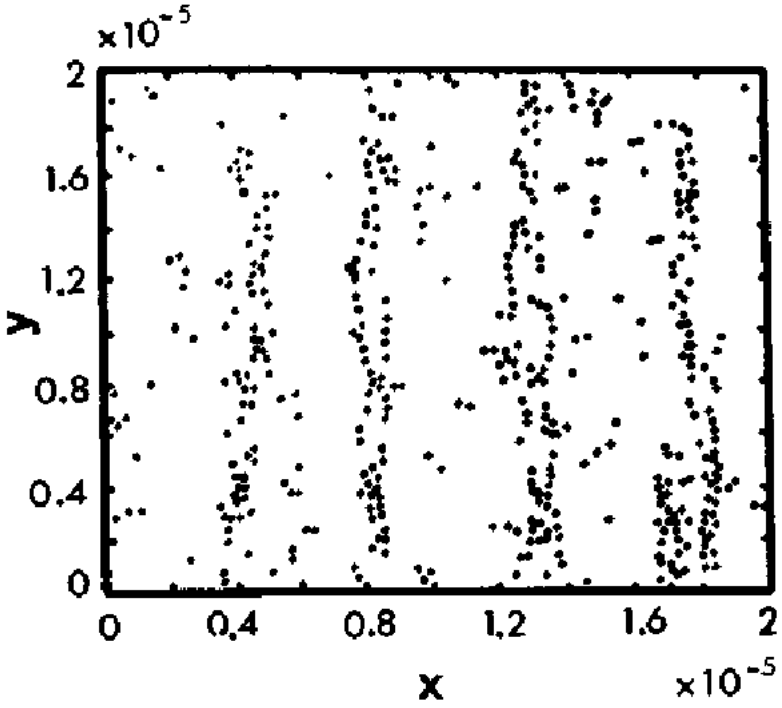


(a) Tek kristal bakırın tekrarlı yüklemesi sonucunda (111)'de oluşan dislokasyon duvarları [50]

(b) Tek kristal bakırda gözlenen dislokasyon duvarları [51]

Şekil 4.26. Tek kristal bakırda tekrarlı yükleme ile elde edilen dislokasyon duvarlarına ilişkin deneysel çalışmalar

Fournet ve Salazar tarafından, 1,375x10^{12} m^{-2} dislokasyon yoğunluğuna sahip bakır tek kristali üzerinde yapılan bilgisayar benzetim çalışmalarında tekrarlı yükleme sonucu elde edilen dislokasyon duvarları Şekil 4.27'de verilmiştir [35].



Şekil 4.27. Bakırın tekrarlı yüklenmesi sonucunda oluşan dislokasyon duvarlarına ait bilgisayar benzetimi [35]

2. Dislokasyon hücrelerinin oluşum testi

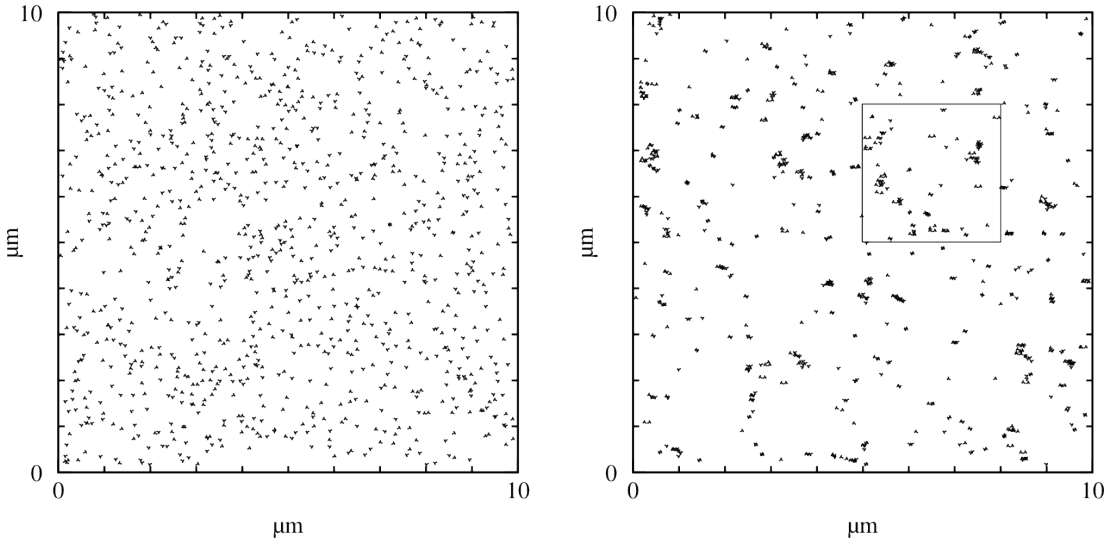
İki kayma sisteminin aktif olması durumunda gözlenen dislokasyon hücrelerine ilişkin kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-Test7} \;=\; & \langle G, \{\{(1000,0,0)\}\times(Cu)\times\{(sabit, 100\,MPa, [112], 0, \\ & 0,0)\}\times(5\,MPa)\times(25\text{b})\times(300\text{b})\times(300^{\circ}K) \\ & \times(evet)\times(evet)\times(200)\times(10\,\mu m)\times(25\,ps)\}, Ç, \\ & \{t>10000\}, veriTopla\rangle \end{aligned} \tag{4.36}$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve olarak Denklem (4.34) kullanılmıştır.

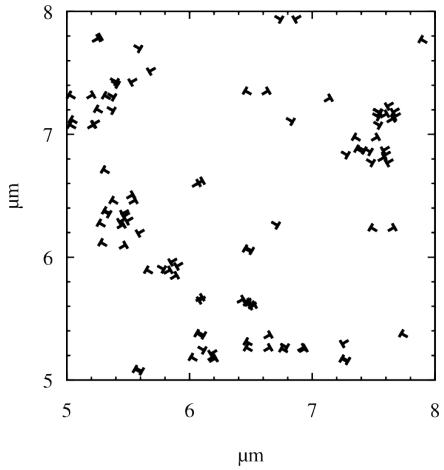
Bu testte Cu içerisinde [101] ve [011] kayma doğrultularında N_0 = 1000 adet kenar dislokasyonu oluşturulmuş ve 100 MPa sabit yükleme uygulanmıştır. Dislokasyonlar her iki kayma düzleminde eşit sayıda ve toplam Burgers vektörleri sıfır olacak şekilde rastgele konumlandırılmıştır. Hızların hesaplanmasında ısıl etkiler hesaba

katılmış ve buna bağlı olarak dislokasyonlara tırmanma izni verilmiştir. Başlangıçtaki rastgele dağılım ve 10000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon deseni Şekil 4.28'de verilmiştir.

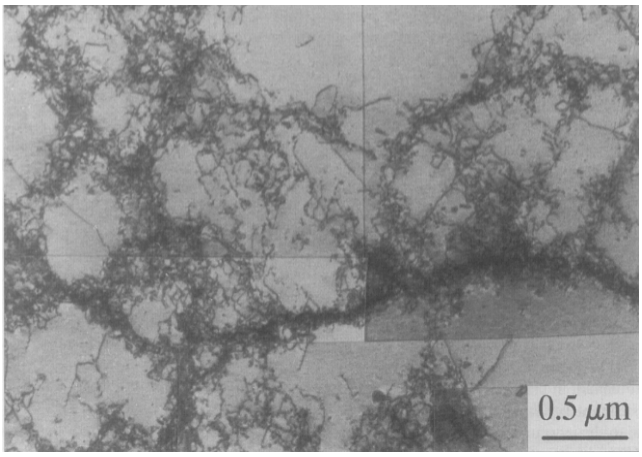


Şekil 4.28. Dislokasyon hücrelerinin oluşum testinde başlangıçtaki ve 10000 benzetim adımı sonucu oluşan dislokasyon dağılımı

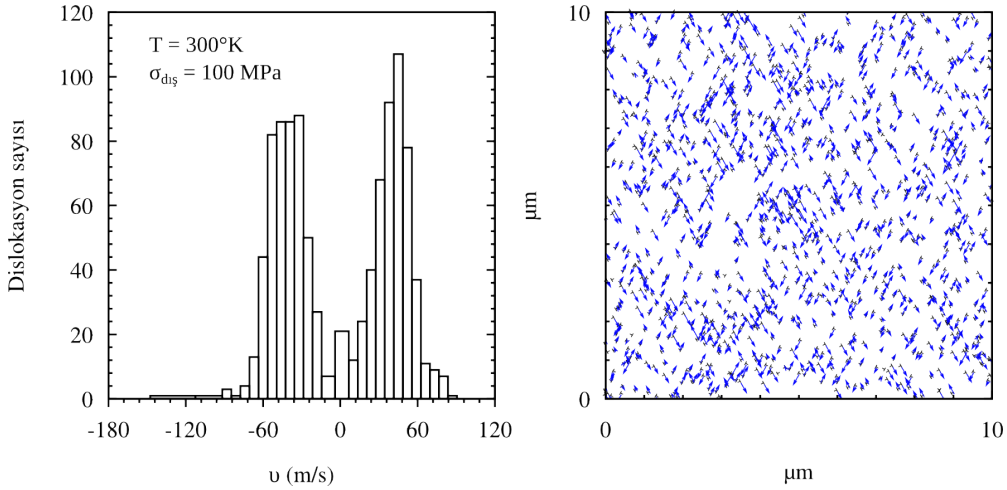
10000 benzetim adımı sonunda dislokasyonların kümeler şeklinde birikim oluşturduğu gözlenmiştir. Bu kümelerin büyütülmüş dağılımı Şekil 4.29'da verilmiştir. Oluşan bu kümelenme Şekil 4.30'da verilen sabit yük altındaki Cu malzemede yapılan deneysel gözlemle uyumludur.



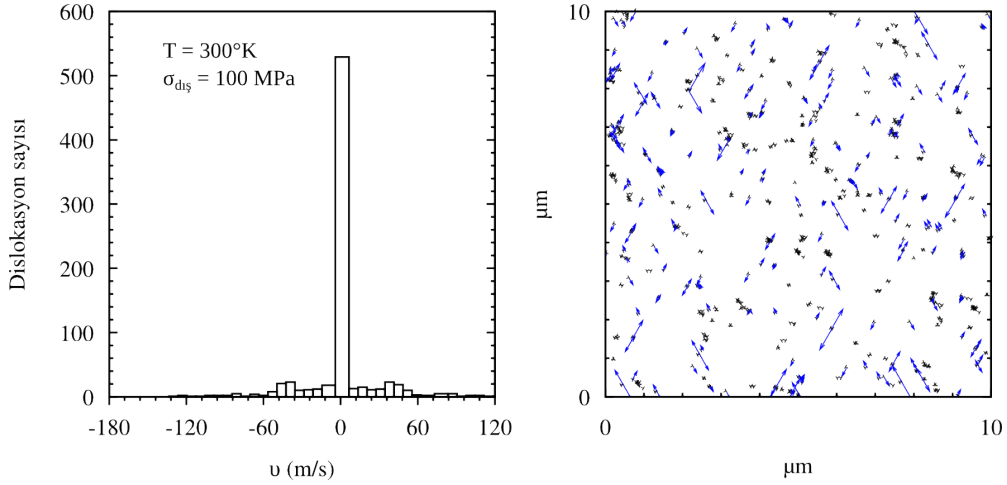
Şekil 4.29. 10000 benzetim adımı sonucu oluşan dislokasyon dağılımının büyütülmüş hali



Şekil 4.30. Oda sıcaklığında 180 MPa sabit yükleme sonucu elde edilen hücre yapısı[52]



Şekil 4.31. Başlangıç durumundaki hız dağılımı

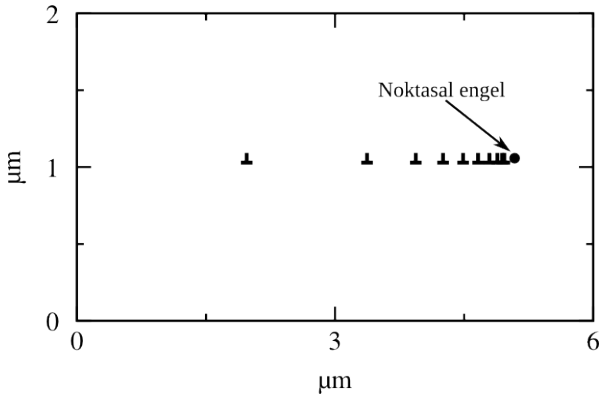


Şekil 4.32. 10000 benzetim adımı sonundaki hız dağılımı

Şekil 4.31 ve 4.32'de dislokasyon hızlarının başlangıçtaki ve 10000 benzetim adımı sonundaki dağılımları verilmiştir. Başlangıçta hızları yüksek olan dislokasyonlar kilitlenme ve Peach-Koehler kuvvetlerinin etkisiyle durağan hale gelmektedirler.

3. Engel testi

Bu test kapsamında dislokasyonların bir engel tarafından durdurulması ve birikme oluşması incelenmiştir. Şekil 4.33'te gösterildiği gibi sabit duran bir engele doğru yeni üretilen dislokasyonlar hareket etmekte ve engel tarafından hareketleri durdurulmaktadır.



Şekil 4.33. Noktasal engel tarafından dislokasyonların durdurulması ve birikme oluşumu

Engel testi için kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir. Bu çerçevede her 400 benzetim adımında yeni bir dislokasyon üretilmektedir. Toplam 10 adet olan dislokasyonların özellikleri aynıdır.

$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-Test8} = \langle & G, \lfloor \{(10,1/400,1)\} \times (Cu) \times \lfloor sabit, 100\,MPa, [112], 0, \\ & 0,0 \rfloor \rfloor \times (5\,MPa) \times (40\text{b}) \times (300\text{b}) \times (0.0) \\ & \times (hayır) \times (hayır) \times (0) \times (10\,\mu m) \times (50\,ps) \rfloor, Ç, \\ & \{t > 4000\}, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{4.37}$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned} DÇ_{dis-Test8} = \langle & AM_{dis}, \lfloor konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, \\ & algıYarıÇapı \rfloor, \{(1,1), 1, 1, 5\,\mu m\}, \lfloor konum \rfloor, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{4.38}$$

Noktasal engele ilişkin deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{eng-Test8} = \langle AM_{eng}, \lceil konum, engelÇapı \rceil, \{(5,1), 1000\text{b}\} \rangle \quad (4.39)$$

5. DİSLOKASYON DESEN MODELİNİN UYGULANMASI

Bu bölümde geliştirilen D.D.M.'nin bazı parametrelerin desen oluşumları üzerindeki etkisi incelenerek modelin uygulanabilirliği sergilenmeye çalışılmıştır. Temel olarak uygulanan dış gerilme, sıcaklık ve engellerin etkisi incelenmiştir.

5.1. Dislokasyon Duvarlarının Oluşumuna Gerilmenin Etkisi

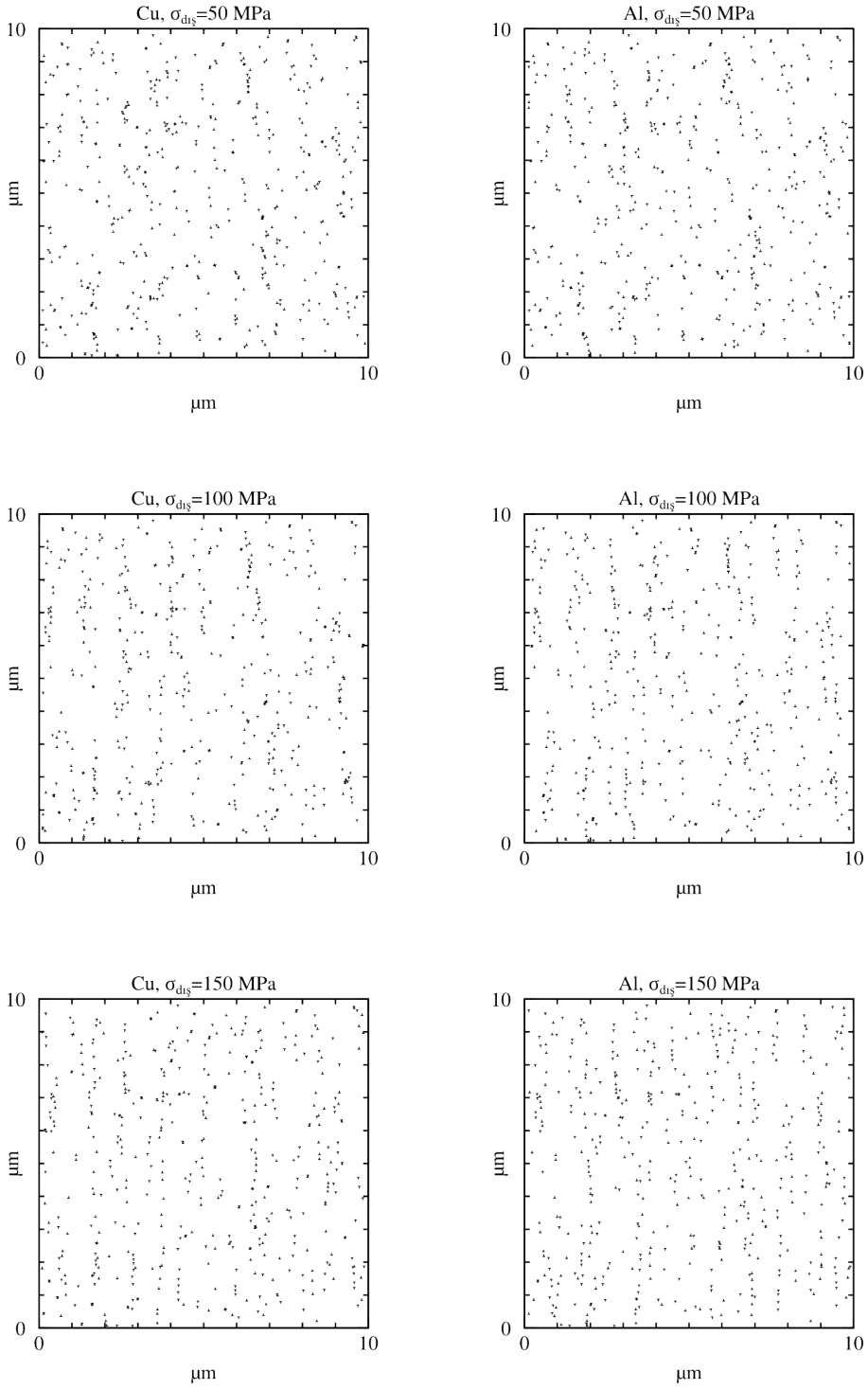
Bölüm 2.4'te belirtildiği gibi tekrarlı yüklemelerde K.K.B.'deki dislokasyon duvarlarının oluşumunda gerilmenin etkisi deneysel çalışmalarda ortaya konmuştur. Artan gerilme genliği miktarı ile duvar oluşumu artmaktadır. K.K.B. matris içinde Şekil 1.12'deki gerilme-gerinme eğrisinin *B* bölümünde gözlenmektedir. Bu durumun bakır ve alüminyum tek kristal malzemelerde gözlenebilmesi amacıyla aşağıdaki deneysel çerçeveler oluşturulmuştur.

$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-1} \;=\; & \langle G, \lfloor \{(500,0,0)\} \times (Cu, Al) \times \lfloor (tekrarlı, (50,100,150\,MPa), \\ & [112], 5, 200, 0.0 \rfloor \rfloor \times (5,2,5\,MPa) \times (25\text{b}) \times (300\text{b}) \times (0) \\ & \times (hayır) \times (hayır) \times (200) \times (10\,\mu m) \times (50,500\,ps) \rfloor, Ç, \\ & \{t > 4000\}, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{5.1}$$

Dislokasyon etmenlerine ait deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

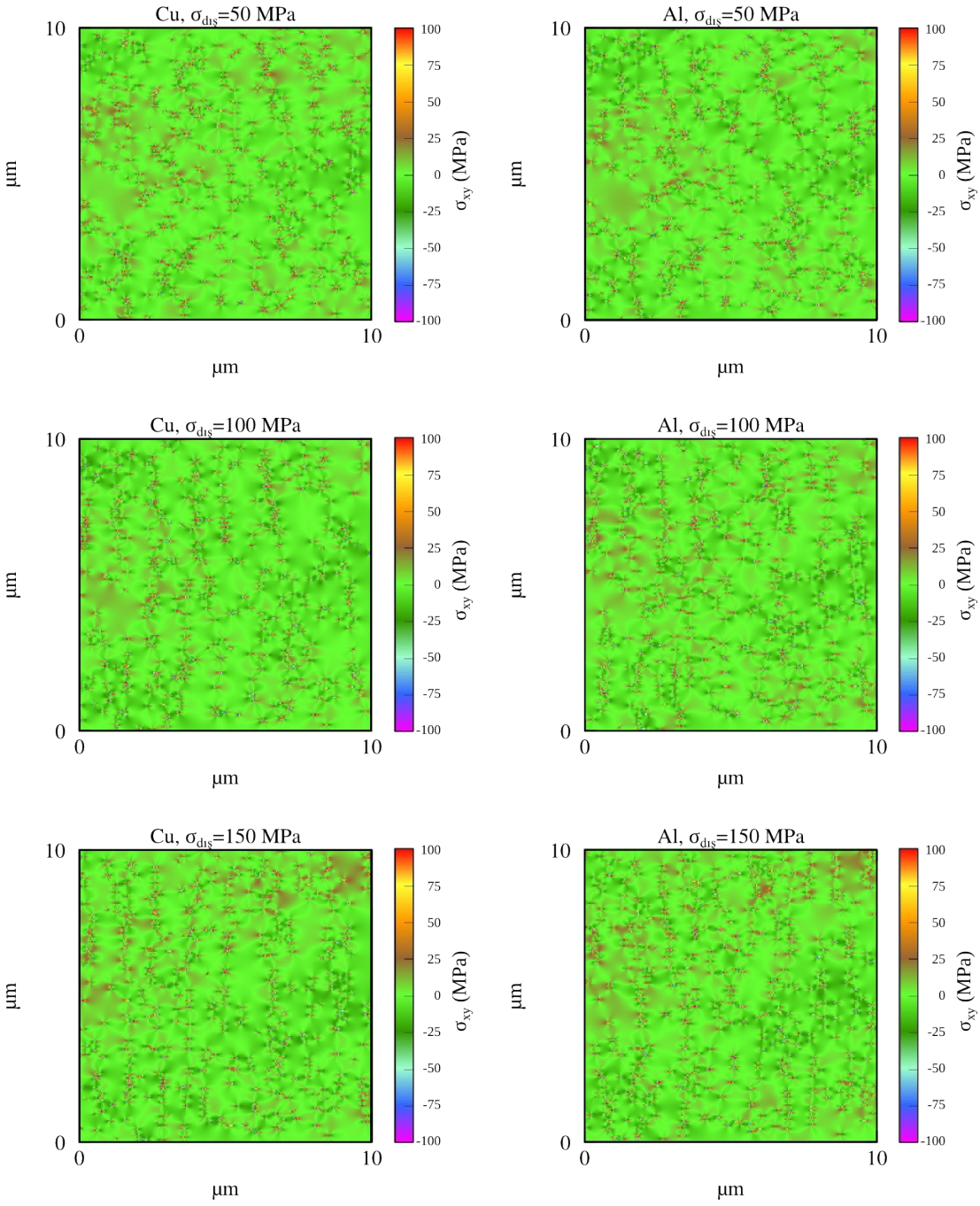
$$\begin{aligned} DÇ_{dis-1} \;=\; & \langle AM_{dis}, \lfloor konum, burgersVektörü, kaymaSistemi, \\ & algıYarıÇapı \rfloor, \lfloor rastgeleKonum, rastgeleBurgersVektörü, \\ & 1,5\,\mu m \rfloor, \lfloor benzetimAdımı, konum, hız \rfloor, veriTopla \rangle \end{aligned} \tag{5.2}$$

Şekil 5.1'de bakır ve alüminyum tek kristallerinde tekrarlı yükleme altında oluşan dislokasyon duvarlarına uygulanan dış gerilme genliğine bağlı değişim verilmiştir. Başlangıçta rastgele olarak matris içerisine dağıtılmış olan dislokasyonlar 4000 benzetim adımı sonrasında belli bir desene doğru evrilmektedir. Desen belirmesi artan dış gerilme genliği ile birlikte artmaktadır. 50 MPa'da duvarlar 6-7 dislokasyondan oluşurken, 100 MPa'da 20-30 dislokasyona çıkmakta ve 150 MPa'da ise tüm matrise yayılmaktadır.



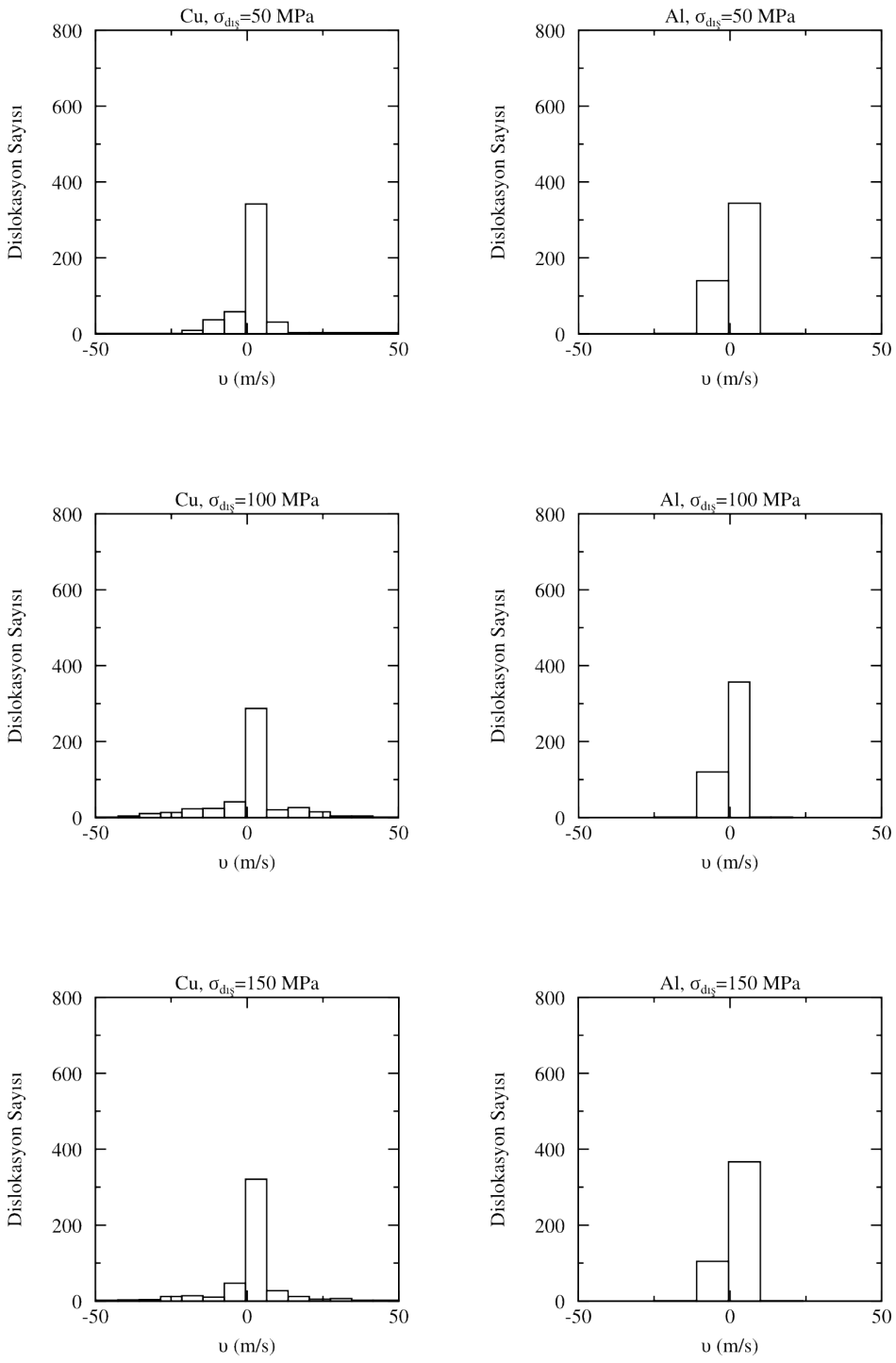
Şekil 5.1. $\dot{N}_n$=0 durumunda bakır ve alüminyum tek kristallerinde uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon duvarları

Şekil 5.2'de 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dislokasyonların gerilme alanlarına ait σ_{xy} bileşeninin Denklem (2.3) kullanılarak bindirme ile elde edilen dağılımı verilmiştir.



Şekil 5.2. $\dot{N}_n$=0 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni

4000 benzetim adımı sonundaki dislokasyonların hızlarının dağılımı Şekil 5.3'te verilmiştir. Genelde hızların sıfıra yakın olduğu, bakırda daha geniş bir alana yayıldığı gözlenmektedir.



Şekil 5.3. $\dot{N}_n$=0 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların kayma hızlarının dağılımı

Çoğalma hızının etkisinin görülmesi amacıyla kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$DÇ_{DDM-2} = \langle G, \{[(500,2/10,0)] \times (Cu, Al) \times \{(sabit, (50,100,150\,MPa), [112],5,200,0)\} \times (5,2,5\,MPa) \times (25b) \times (300b) \times (0.0) \times (hayır) \times (hayır) \times (200) \times (10\,\mu m) \times (50\,ps)\}, Ç, \{t > 4000\}, veriTopla\rangle \quad (5.3)$$

Dislokasyon etmenleri için Denklem (5.2)'de verilen deneysel çerçeve kullanılmıştır.

Dislokasyonların 4000 benzetim adımı sonundaki dağılımları Şekil 5.4'te, 150 MPa dış gerilme altında evrilmeleri Şekil 5.5 ve 5.6'da, gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni Şekil 5.7'de verilmiştir. Buna göre çoğalma hızı tanımlandığında dislokasyon duvarlarının daha yoğun olduğu gözlenmektedir.

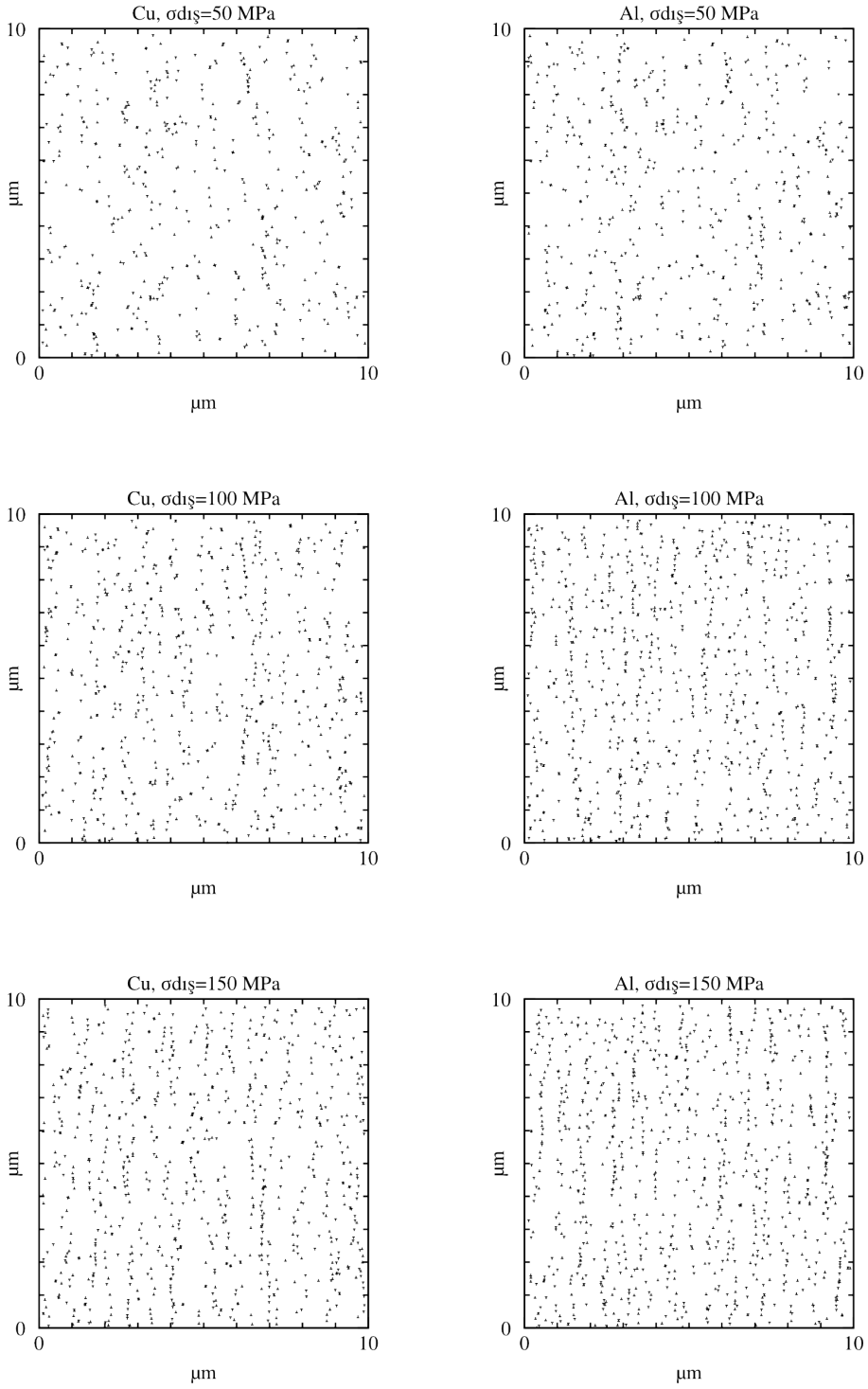
Dislokasyonların 4000 benzetim adımı sonundaki durumları $\dot{N}_n$=0 için Tablo 5.1'de ve $\dot{N}_n$=2/10 için Tablo 5.2'de verilmiştir. N_m hareketli, N_d çift kutuplu, N_a yok olan ve N_t toplam dislokasyon sayılarını göstermektedir.

Tablo 5.1. $\dot{N}_n$=0 durumunda, 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeler ile oluşan dislokasyon sayıları

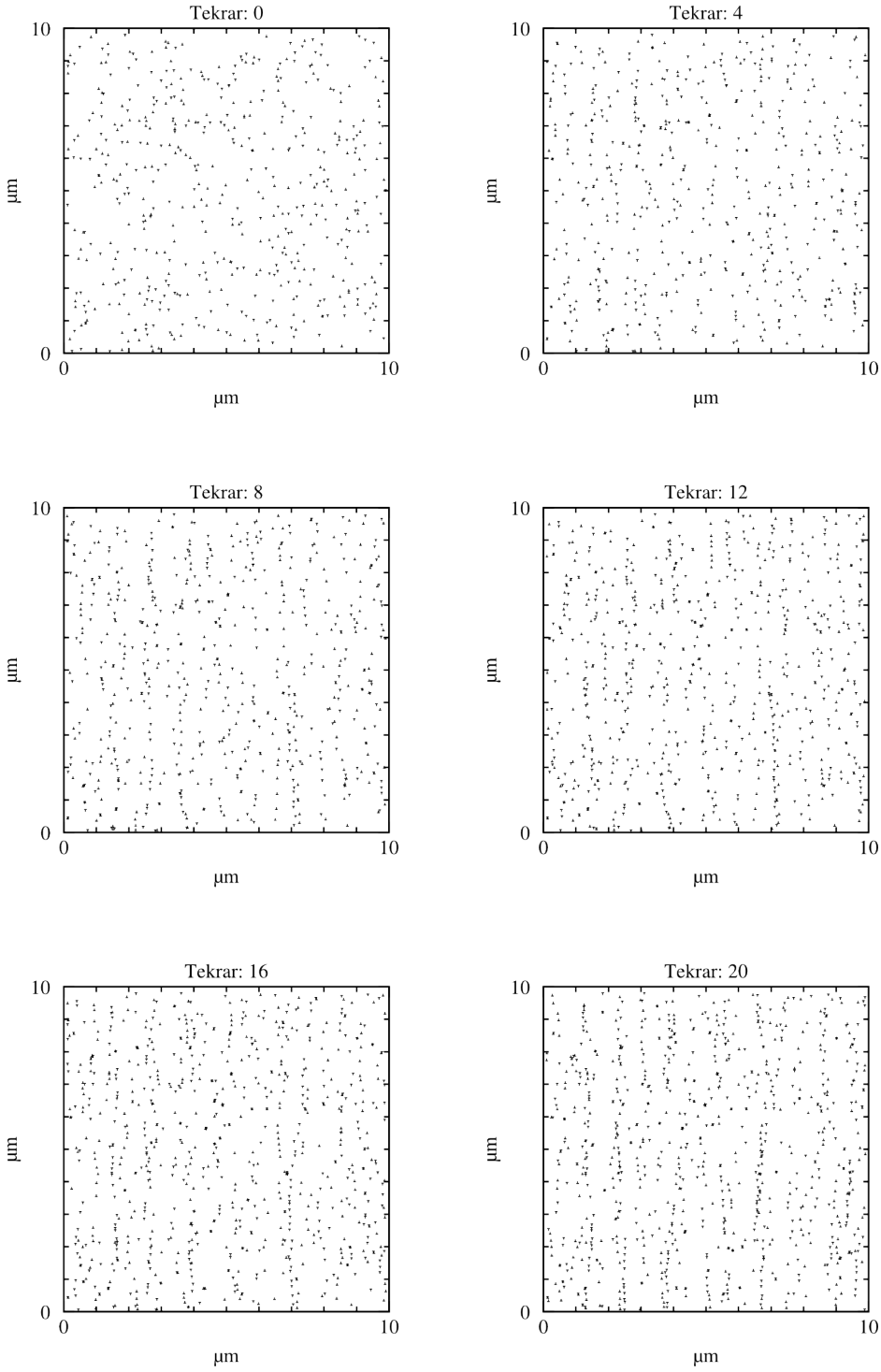
$\sigma_{dış}$	Cu				Al			
(MPa)	N_m	N_d	N_a	N_t	N_m	N_d	N_a	N_t
50	201	49	14	486	268	47	14	486
100	227	47	18	482	240	27	20	480
150	198	31	24	476	188	14	26	474

Tablo 5.2. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda, 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeler ile oluşan dislokasyon sayıları

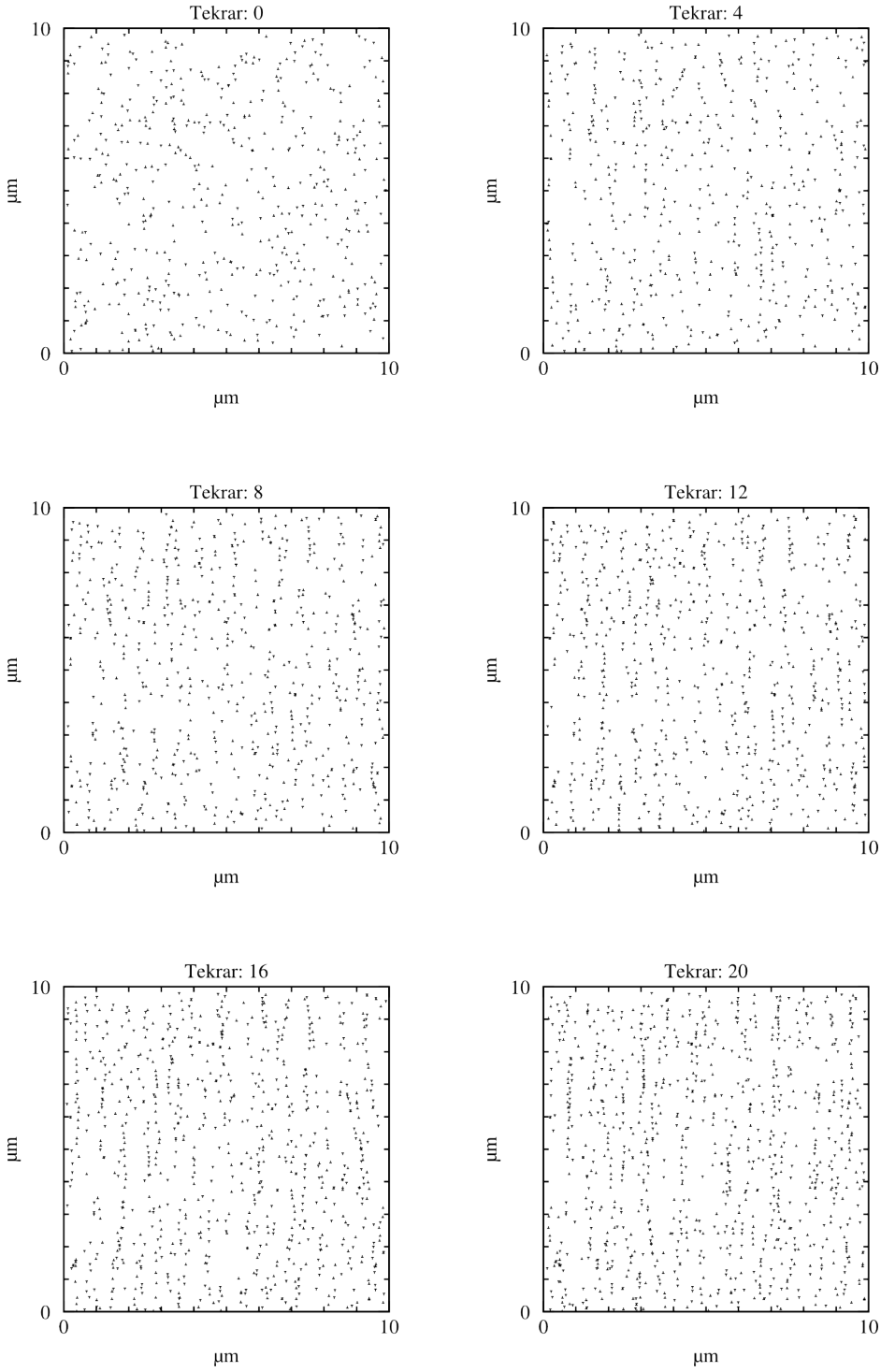
$\sigma_{dış}$	Cu				Al			
(MPa)	N_m	N_d	N_a	N_t	N_m	N_d	N_a	N_t
50	201	49	14	486	326	60	23	579
100	331	56	40	736	503	72	70	886
150	335	52	101	849	513	65	90	942



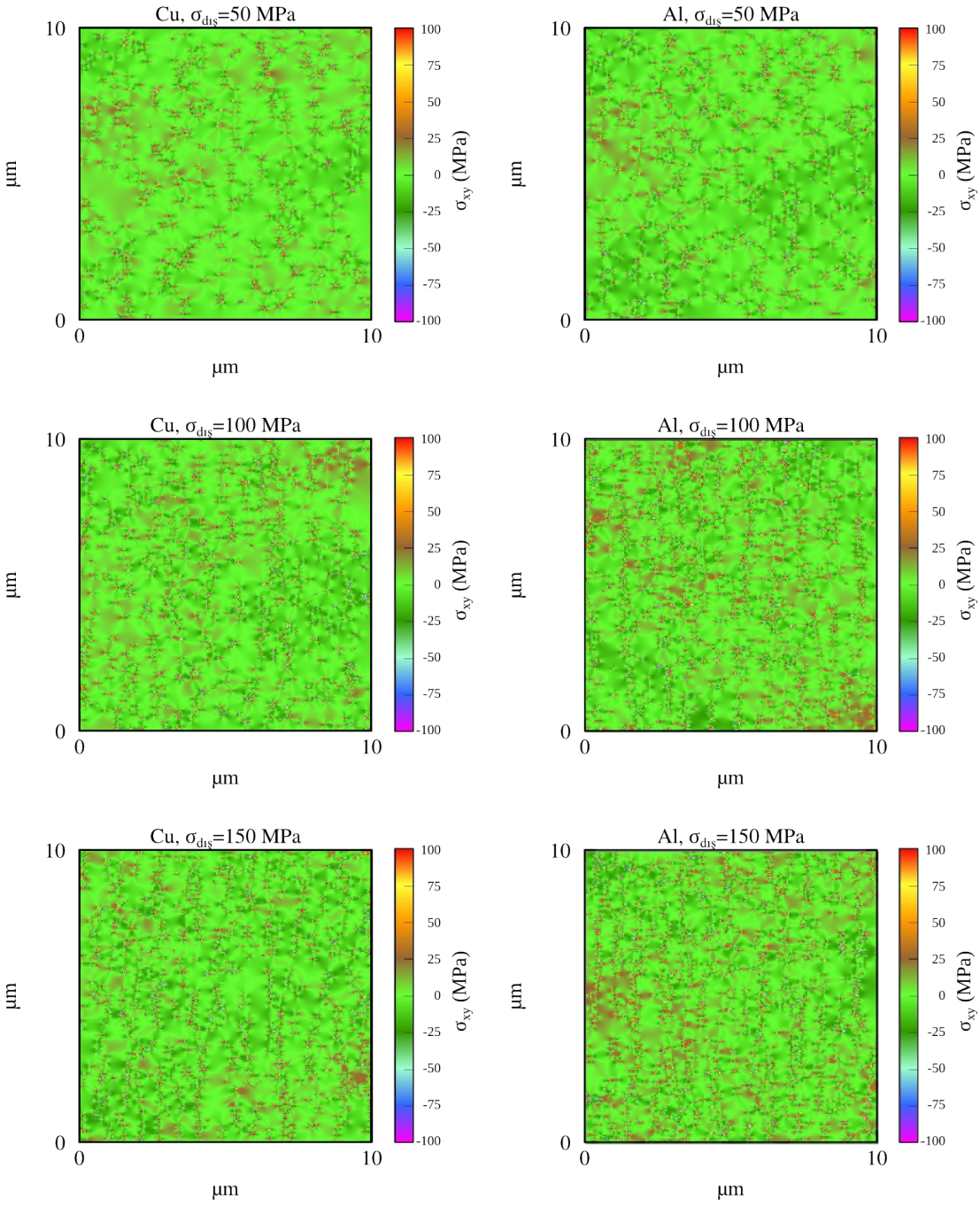
Şekil 5.4. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda bakır ve alüminyum tek kristallerinde uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon duvarları



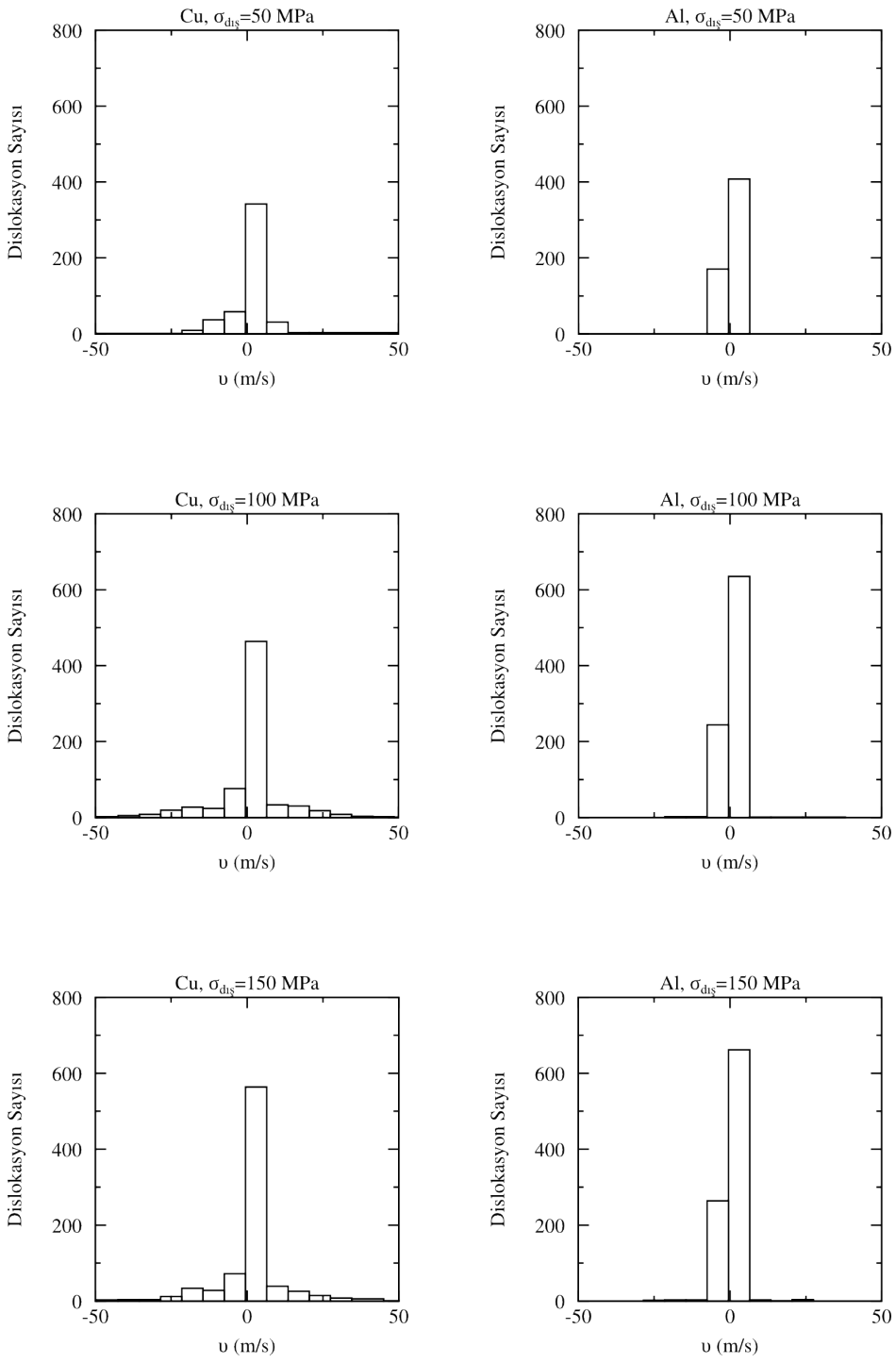
Şekil 5.5. Bakırda $\dot{N}_n$=2/10 durumunda ve 150 MPa dış gerilme altında 4000 benzetim adımı boyunca dislokasyon duvarlarının evrilmesi



Şekil 5.6. Alüminyumda $\dot{N}_n$=2/10 durumunda ve 150 MPa dış gerilme altında 4000 benzetim adımı boyunca dislokasyon duvarlarının evrilmesi

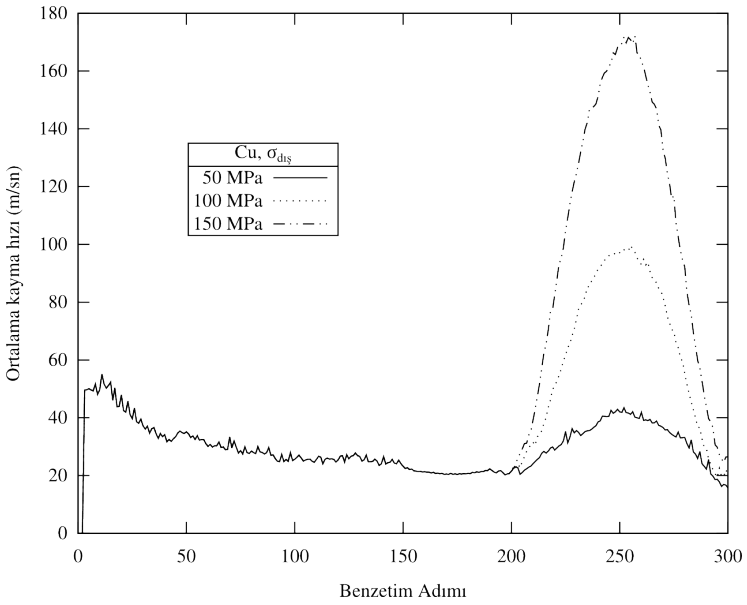


Şekil 5.7. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni

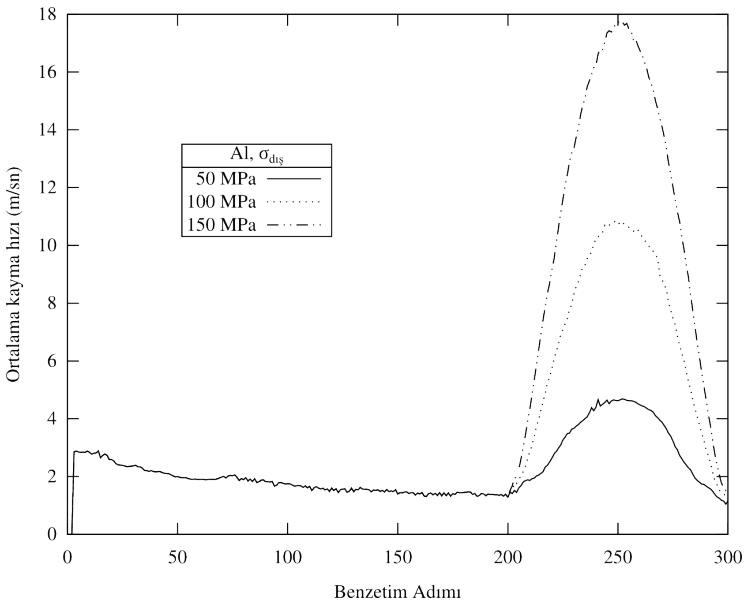


Şekil 5.8. $\dot{N}_n$=2/10 durumunda 4000 benzetim adımı sonucu oluşan dağılımdaki dislokasyonların kayma hızlarının dağılımı

Başlangıçta yükleme başlamadan 200 benzetim adımı gevşeme uygulanmıştır. Bu zaman diliminde dislokasyonlar belli bir miktar dengeye ulaşmıştır. Gevşemenin dislokasyon hızları üzerindeki etkisi bakır için Şekil 5.9'da ve alüminyum için Şekil 5.10'da gösterilmiştir. Ayrıca yüklemenin ilk başladığı zaman kayma hızlarının uygulanan dış gerilmeye göre değişimi verilmiştir.



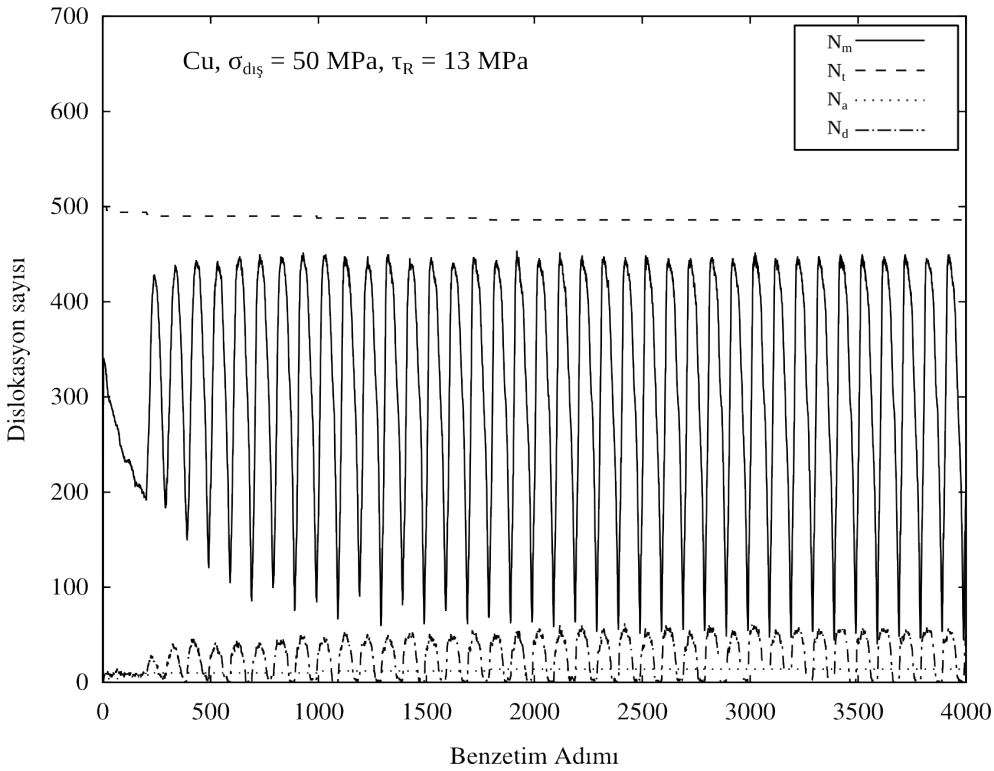
Şekil 5.9. Bakırda gevşeme sonucunda hızların düşmesi



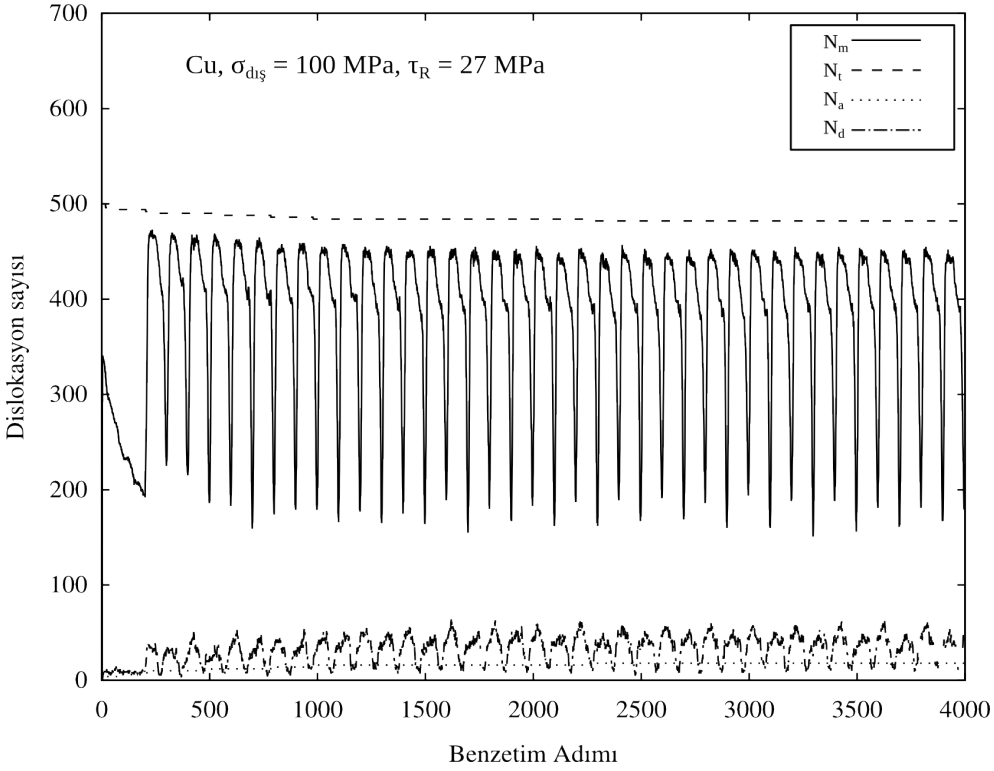
Şekil 5.10. Alüminyumda gevşeme sonucunda hızların düşmesi

Şekil 5.11 - 5.16 arasında $\dot{N}_n$=0 olduğunda dislokasyon durumlarının benzetim boyunca nasıl değiştiği bakır ve alüminyum için uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak verilmiştir.

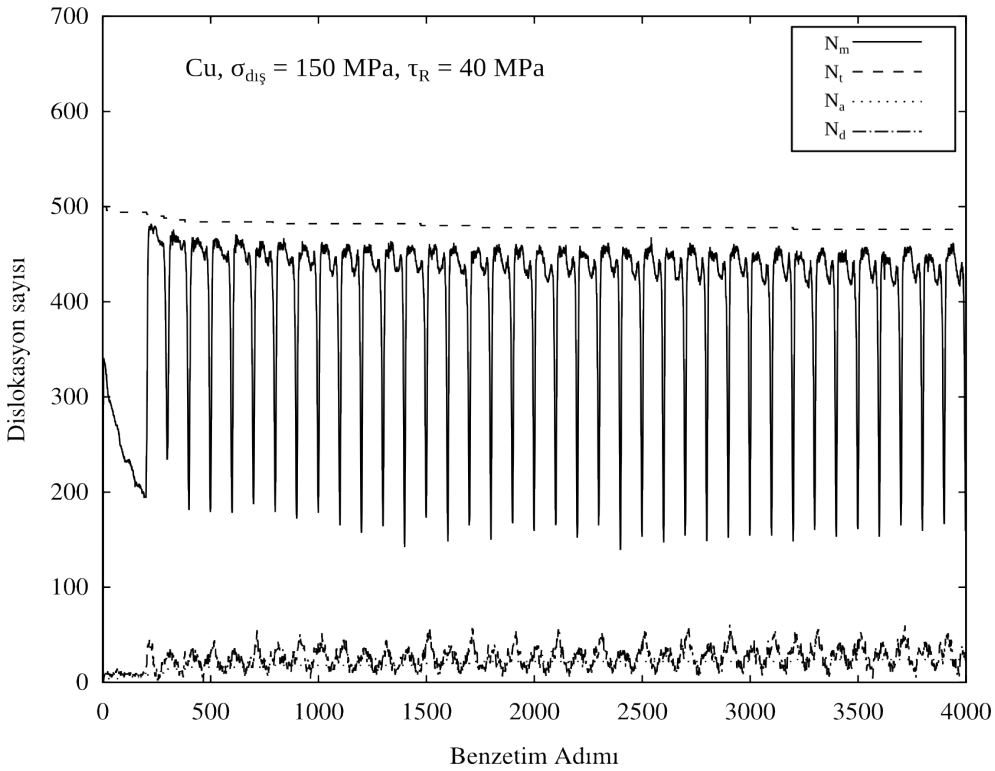
Şekil 5.17-5.19 arasında $\dot{N}_n$=2/10 olduğunda dislokasyon durumlarının benzetim boyunca nasıl değiştiği alüminyum için uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak verilmiştir.



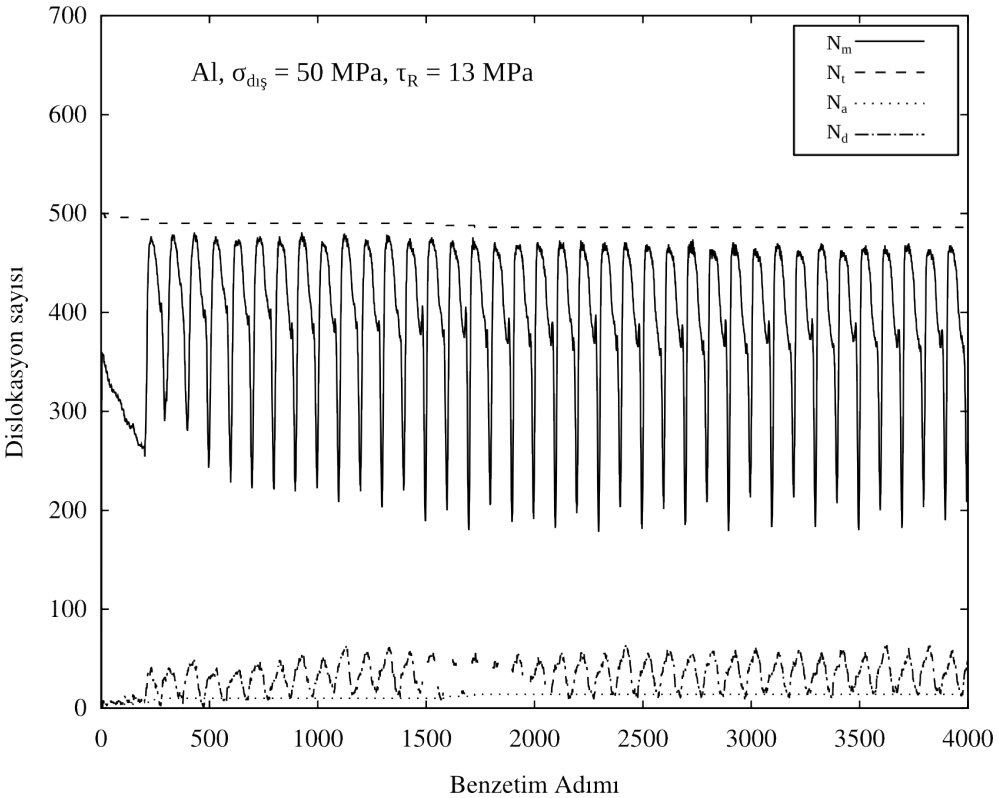
Şekil 5.11. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



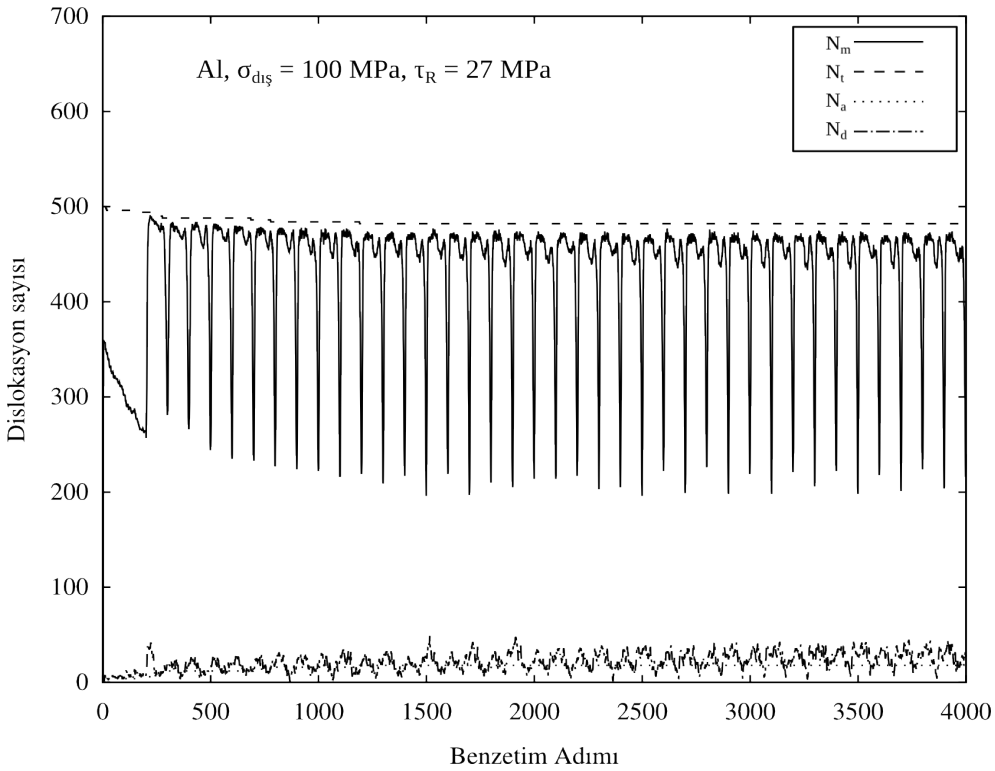
Şekil 5.12. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



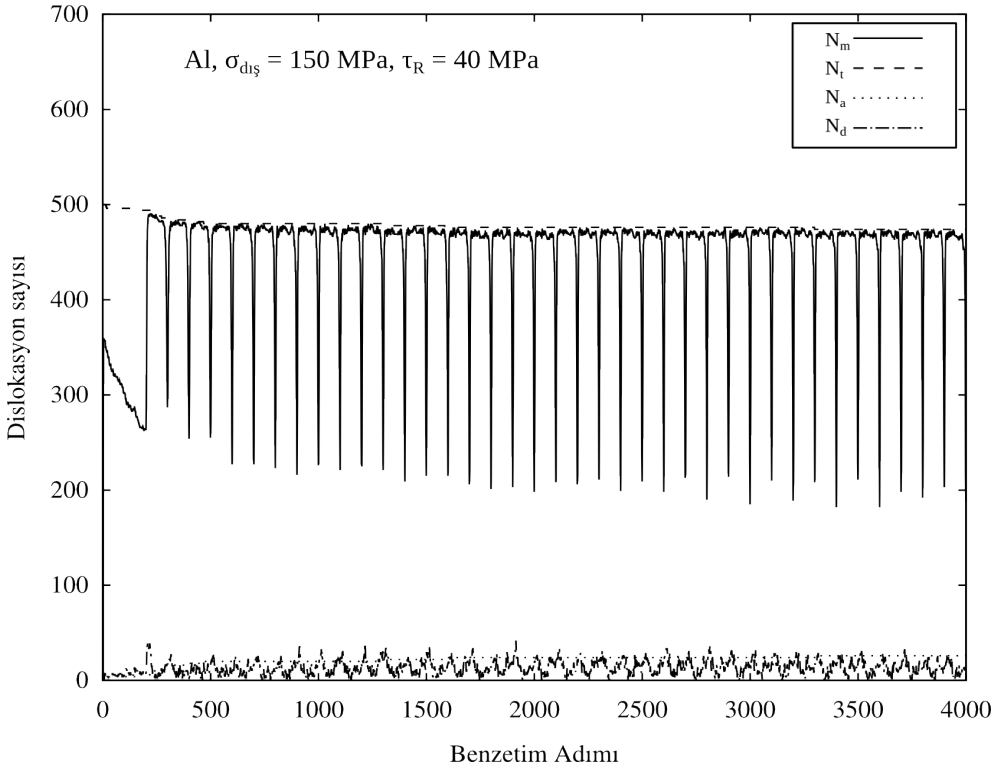
Şekil 5.13. Bakır için $\dot{N}_n$=0 ve 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



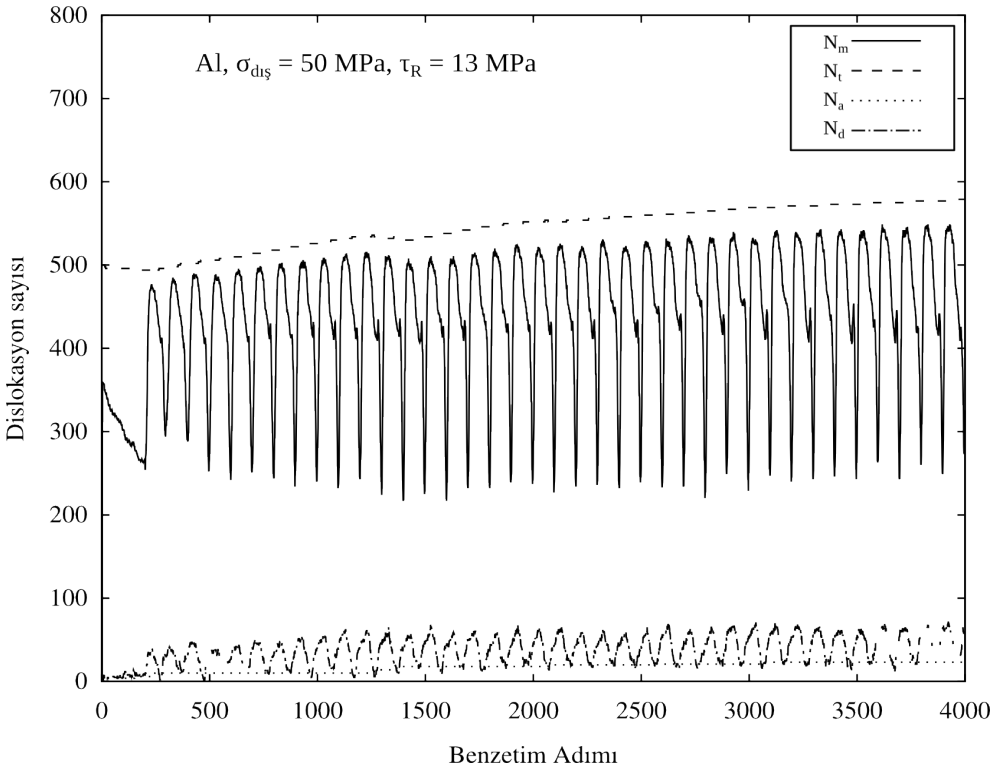
Şekil 5.14. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



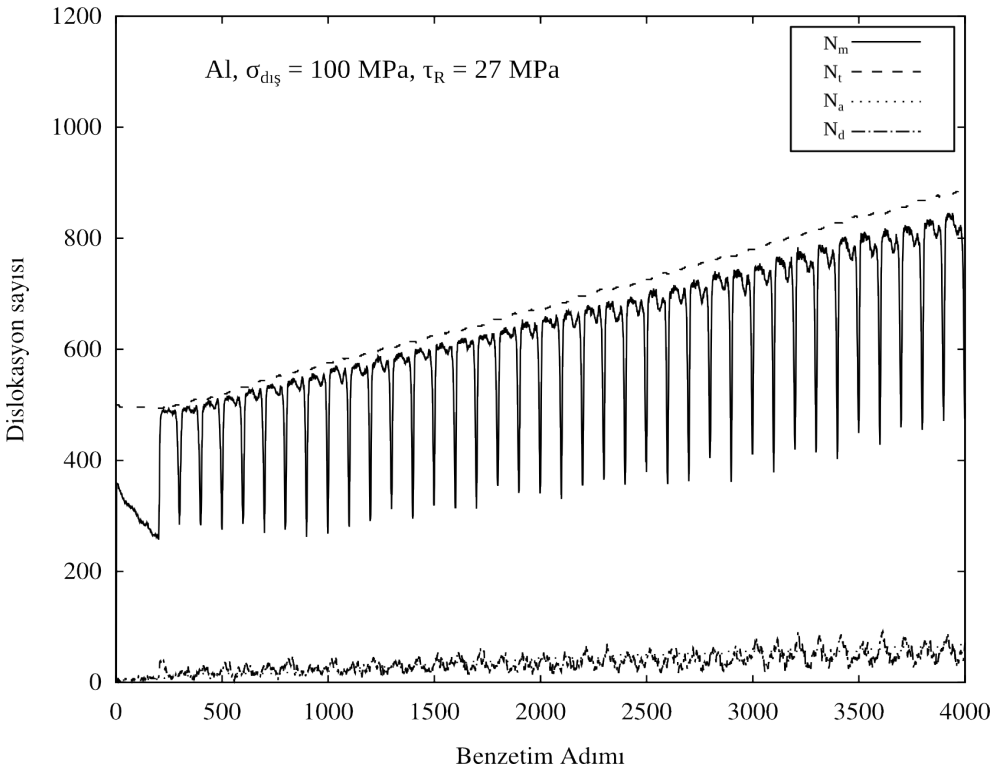
Şekil 5.15. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



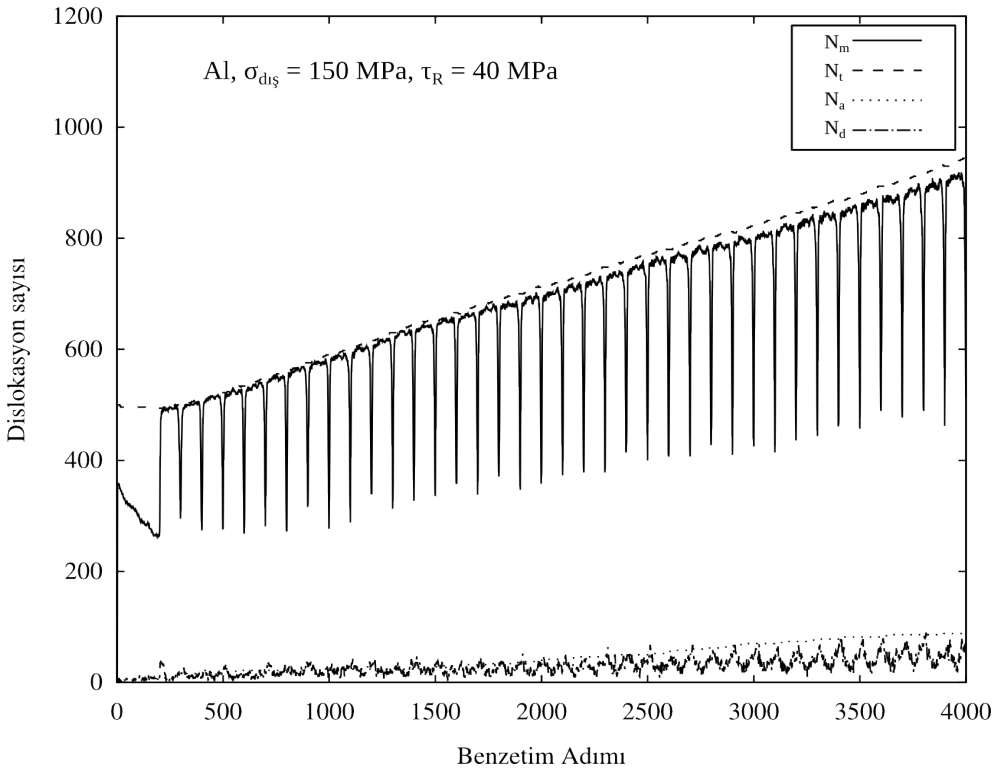
Şekil 5.16. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 ve 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi



Şekil 5.17. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 *v*e 50 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi

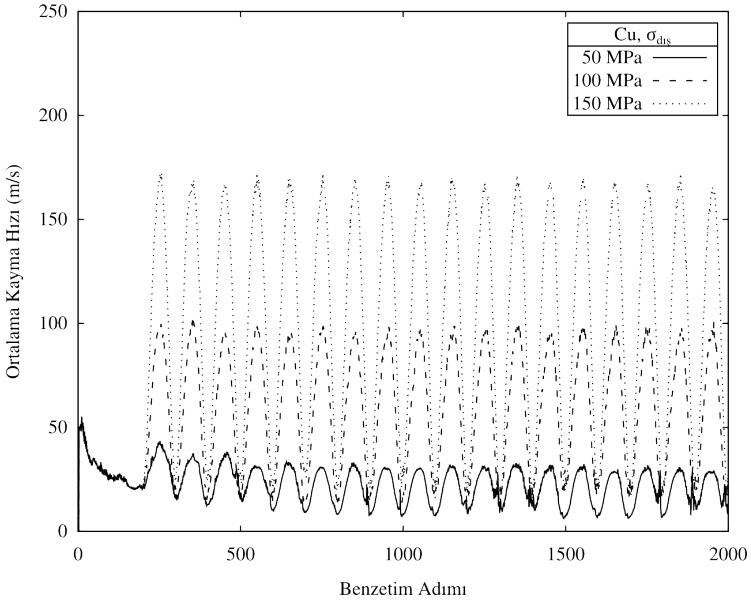


Şekil 5.18. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 *v*e 100 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi

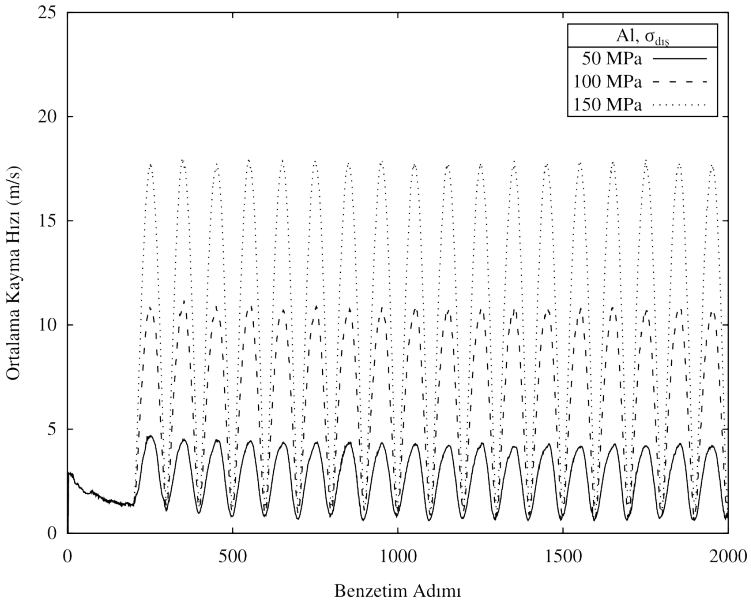


Şekil 5.19. Alüminyum için $\dot{N}_n$=2/10 *v*e 150 MPa dış gerilme için dislokasyon durumlarının değişimi

Şekil 5.20 ve 5.21'de $\dot{N}_n$=0 olduğunda maksimum kayma hızının benzetim boyunca nasıl değiştiği bakır ve alüminyum için uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak verilmiştir.

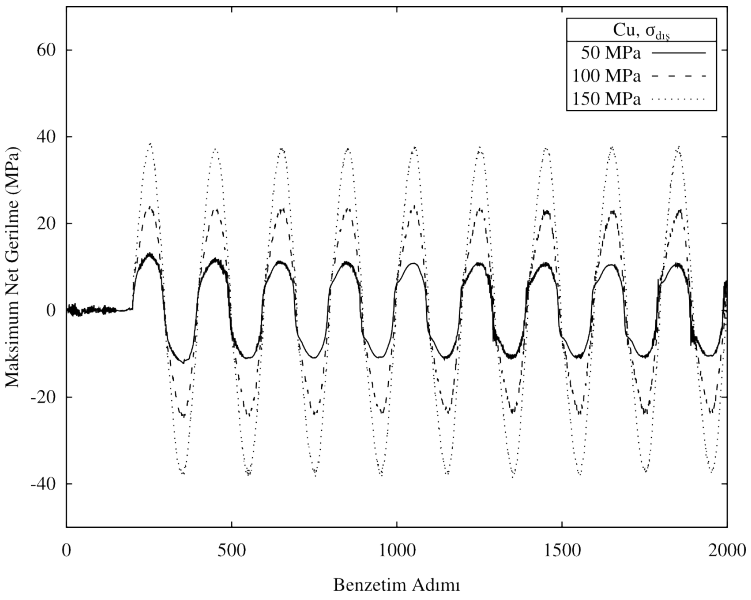


Şekil 5.20. Bakır için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak ortalama kayma hızının zamanla değişimi

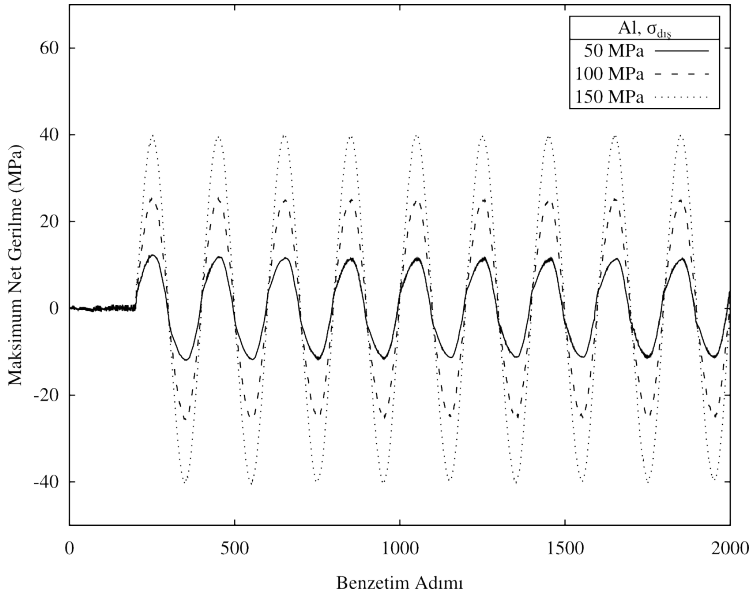


Şekil 5.21. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum kayma hızının zamanla değişimi

Şekil 5.22 ve 5.23'de $\dot{N}_n$=0 olduğunda maksimum net gerilmenin benzetim boyunca nasıl değiştiği bakır ve alüminyum için uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak verilmiştir.



Şekil 5.22. Bakır için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum net gerilmenin zamanla değişimi



Şekil 5.23. Alüminyum için $\dot{N}_n$=0 durumunda uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak maksimum net gerilmenin zamanla değişimi

5.2. Dislokasyon Duvarlarının Oluşumuna Sıcaklığın Etkisi

K.K.B.'de dislokasyon duvarlarının oluşumuna sıcaklığın etkisi incelenmiştir. Bu amaçla kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

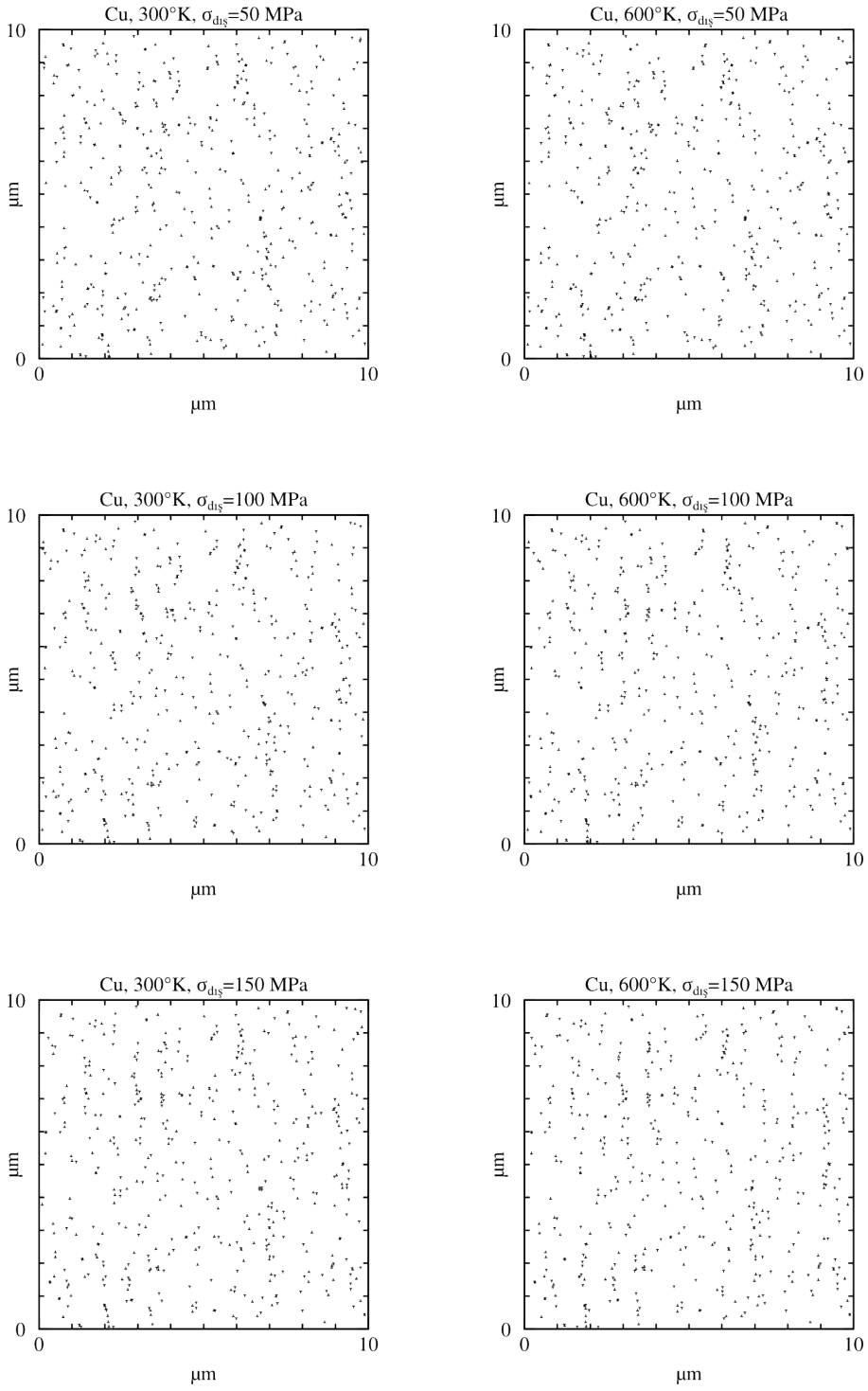
$$\begin{aligned} DÇ_{DDM-3} \;=\; & \langle G, \{\{(500,0,0)\}\times(Cu, Al)\times\{\langle tekrarlı, (50,100,150\,MPa), \\ & [112], 5, 200, 0\rangle\}\times(5,2,5\,MPa)\times(25\text{b})\times(300\text{b}) \\ & \times(300,450,600^{\circ}K)\times(evet)\times(hayır)\times(200) \\ & \times(10\,\mu m)\times(50,500\,ps)\rangle, Ç, \{t>4000\}, veriTopla\rangle \end{aligned} \tag{5.4}$$

Dislokasyon etmenleri için Denklem (5.2)'de verilen deneysel çerçeve kullanılmıştır.

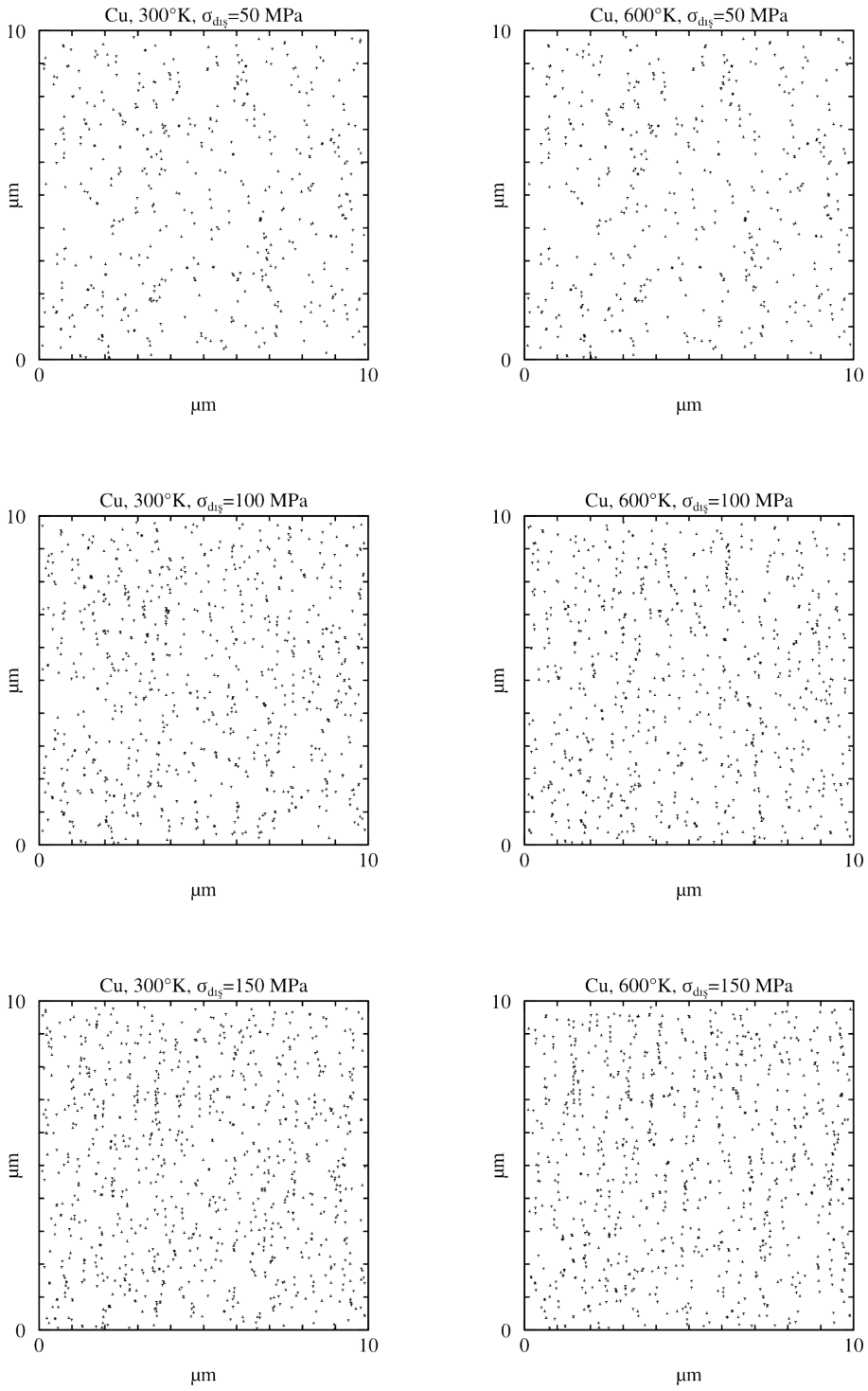
Şekil 5.24'de bakırda $\dot{N}_n$=0, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları verilmiştir. Buna göre dislokasyon duvarlarının oluşumu 150 MPa dış gerilmede 300°K ve 600°K sıcaklıklarda az sayıda gözlenmektedir. Diğer gerilme değerlerinde duvar oluşumu bulunmamaktadır.

Şekil 5.25'de bakırda $\dot{N}_n$=2/10, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları verilmiştir. Buna göre dislokasyon duvarlarının oluşumunu 150 MPa dış

gerilmede 300°K ve 600°K sıcaklıklarda $\dot{N}_n$=0'a göre daha fazla olduğu gözlenmektedir. 50 MPa ve 100 MPa dış gerilmelerde ise duvar oluşmu bulunmamaktadır.

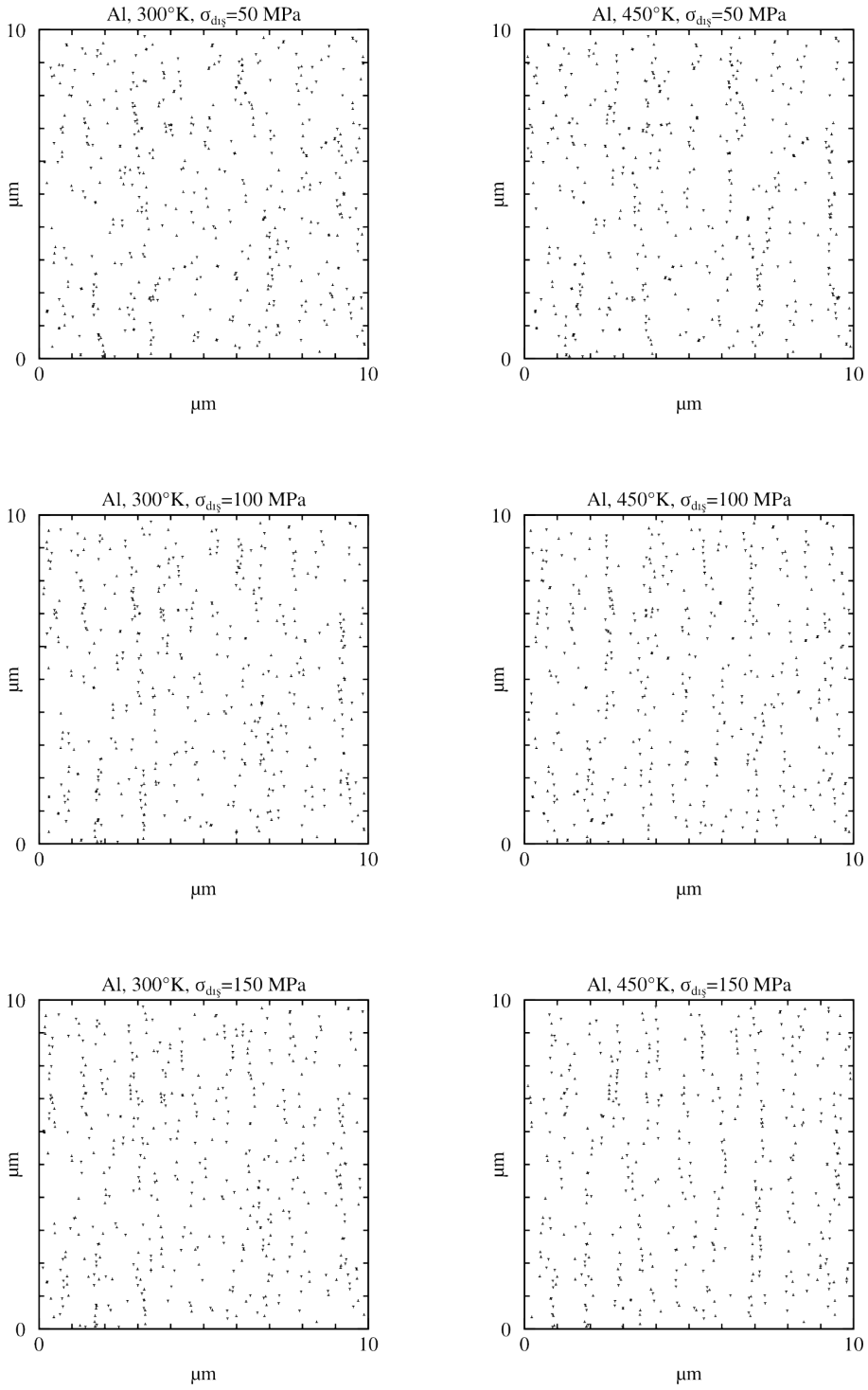


Şekil 5.24. Bakırda $\dot{N}_n$=0, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları

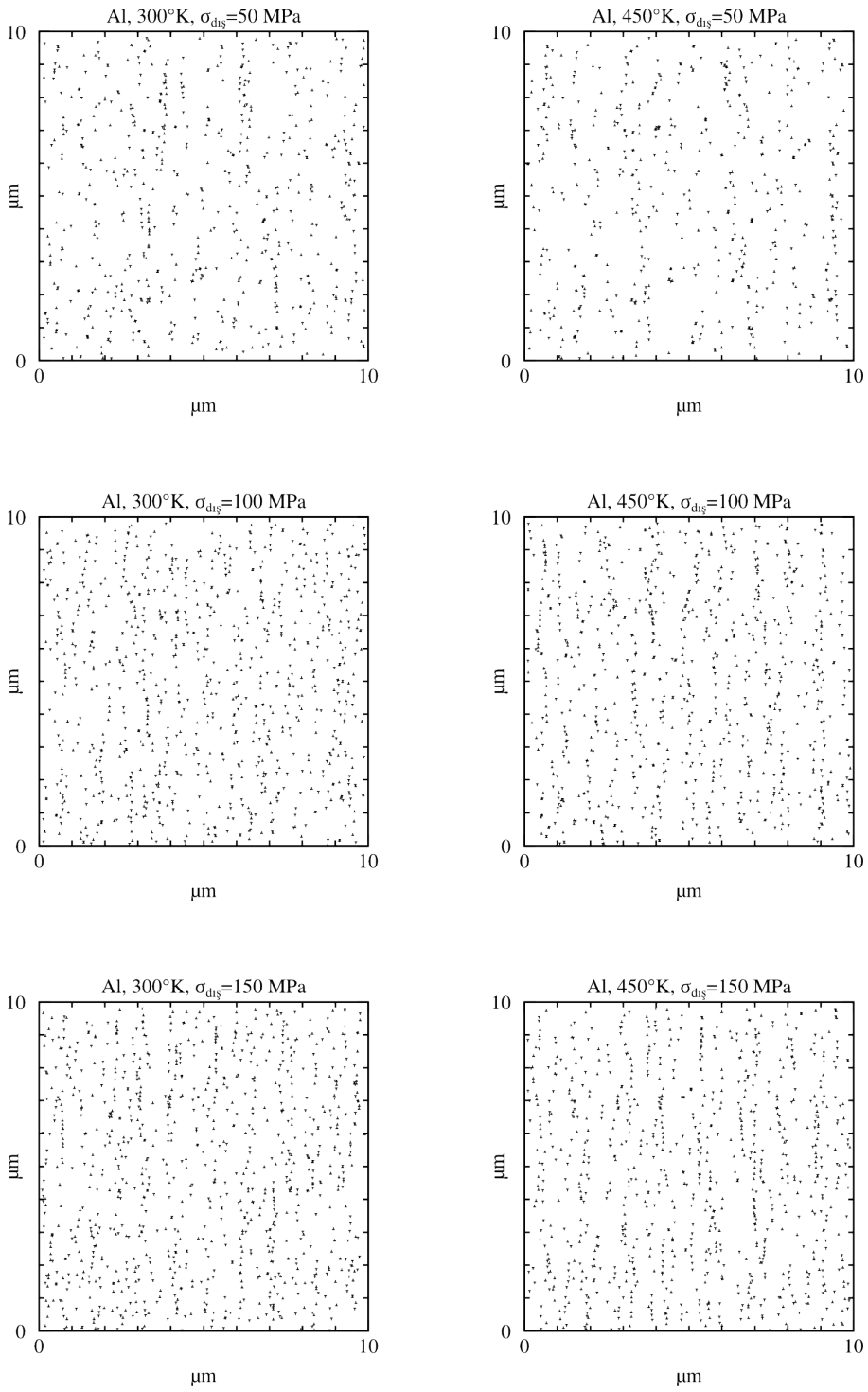


Şekil 5.25. Bakırda $\dot{N}_n$=2/10, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları

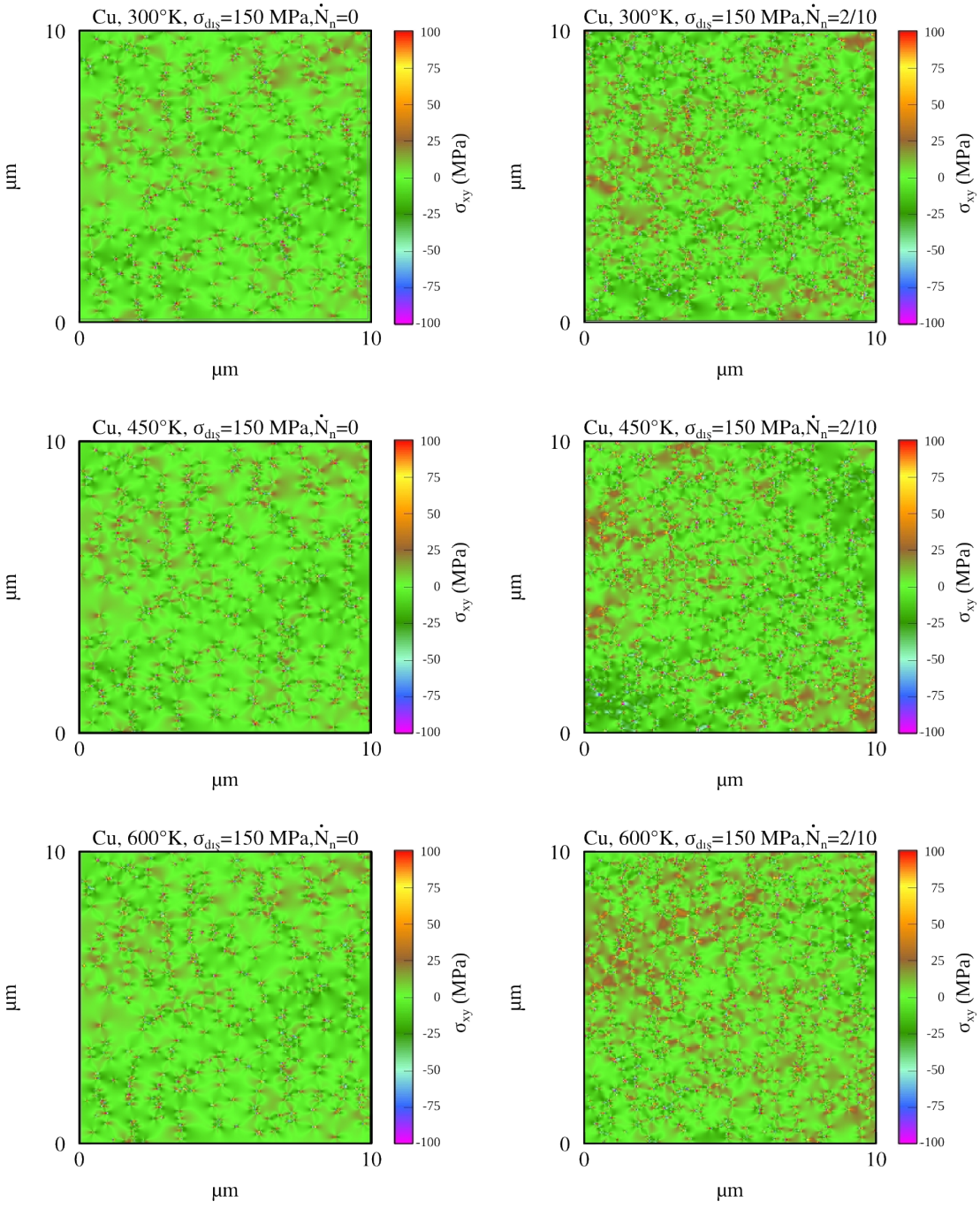
Şekil 5.26 ve 5.27'de görüldüğü gibi alüminyumda durum daha farklıdır. Burada dislokasyon duvarlarının oluşumu her sıcaklık ve gerilme durumunda net olarak gözlenmektedir. Yüksek sıcaklık ve gerilme durumunda en fazla duvar oluşmaktadır.



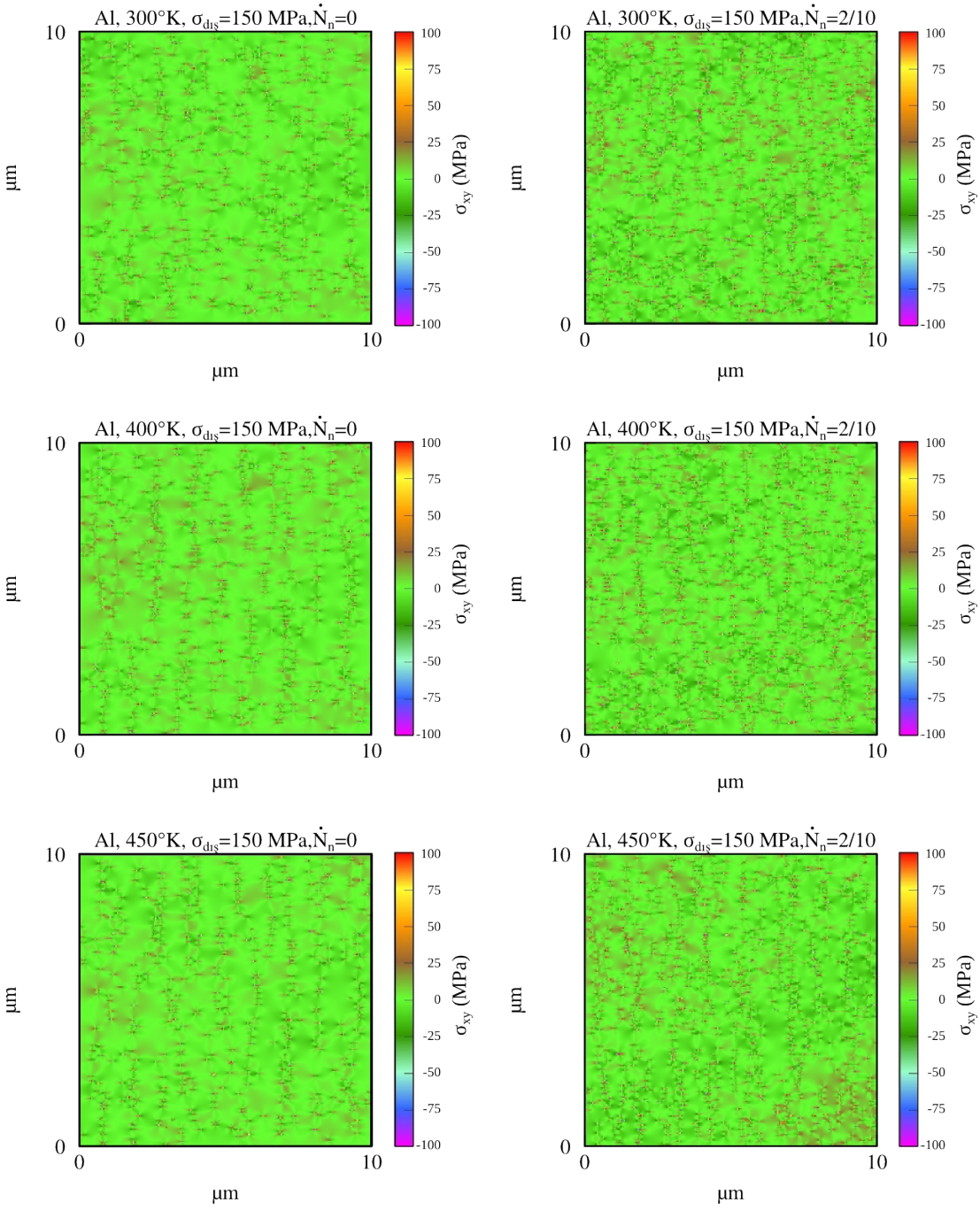
Şekil 5.26. Alüminyumda $\dot{N}_n$=0, 300°K ve 450°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları



Şekil 5.27. Alüminyumda $\dot{N}_n$=2/10, 300°K ve 450°K sıcaklıklarda ve 50, 100 ve 150 MPa dış gerilmeye bağlı olarak 4000 benzetim adımı sonucunda oluşan dislokasyon dağılımları



Şekil 5.28. Bakırda $\dot{N}_n$=0 ve $\dot{N}_n$=2/10 durumlarında 150 MPa dış gerilmede 300°K, 450°K ve 600°K sıcaklıklarda oluşan gerilme alanının σ_{xy} bileşeni



Şekil 5.29. Alüminyumda $\dot{N}_n$=0 ve $\dot{N}_n$=2/10 durumlarında 150 MPa dış gerilmede 300°K, 400°K ve 450°K sıcaklıklarda oluşan gerilme alanının σ_{xy} bileşeni

5.3. Dislokasyon Hücrelerinin Oluşumuna Gerilmenin Ve Sıcaklığın Etkisi

Dislokasyon hücrelerinin oluşumuna uygulanan dış gerilmenin ve sıcaklığın etkisi incelenmiştir. Bu kapsamda kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$
\begin{aligned}
DÇ_{DDM-4} \;=\; & \Big\langle G, \Big\lfloor \{(1000,0,0)\} \times (Cu) \times \Big\lfloor \langle sabit, (50,100,150\,MPa), \\
& [112],0,0,0 \Big\rfloor \times (5\,MPa) \times (25\mathrm{b}) \times (300\mathrm{b}) \\
& \times (300,600^{\circ}K) \times (evet) \times (evet) \times (200) \\
& \times (10\,\mu m) \times (25\,ps) \Big\rfloor, Ç, \{t > 10000\}, veriTopla \Big\rangle
\end{aligned}
\tag{5.5}
$$

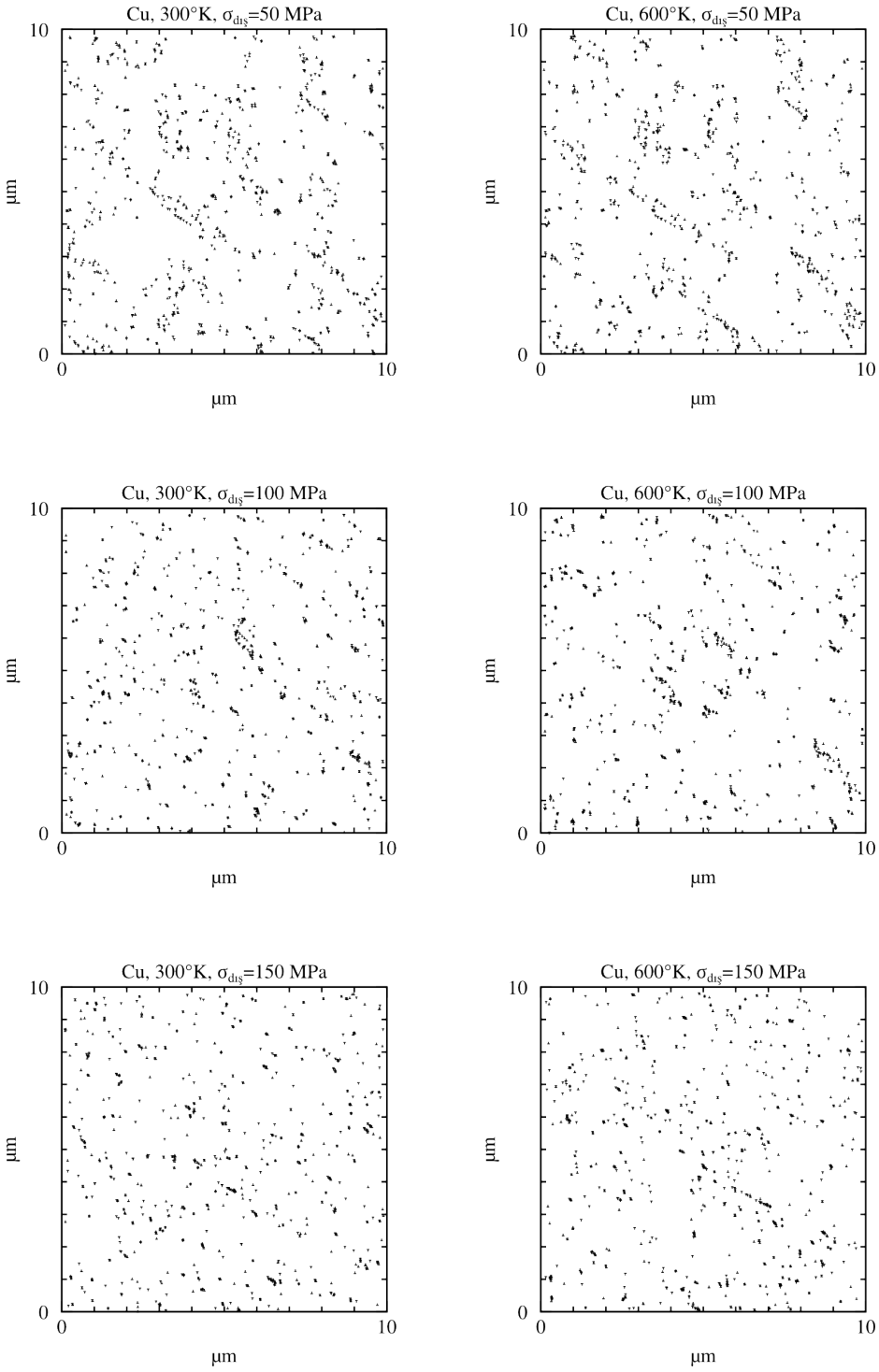
Dislokasyon etmenleri için Denklem (5.2)'de verilen deneysel çerçeve kullanılmıştır.

Şekil 5.30'da 10000 benzetim adımı sonucunda 300°K ve 600°K sıcaklıklardaki 50, 100, 150 MPa dış gerilmede oluşan dislokasyon yapıları verilmiştir. Burada sıcaklık artışıyla hücre oluşumunda artış görülmekle brlikte, gerilmenin arttırılmasıyla hücre yapılarının oluşumu azalmaktadır.

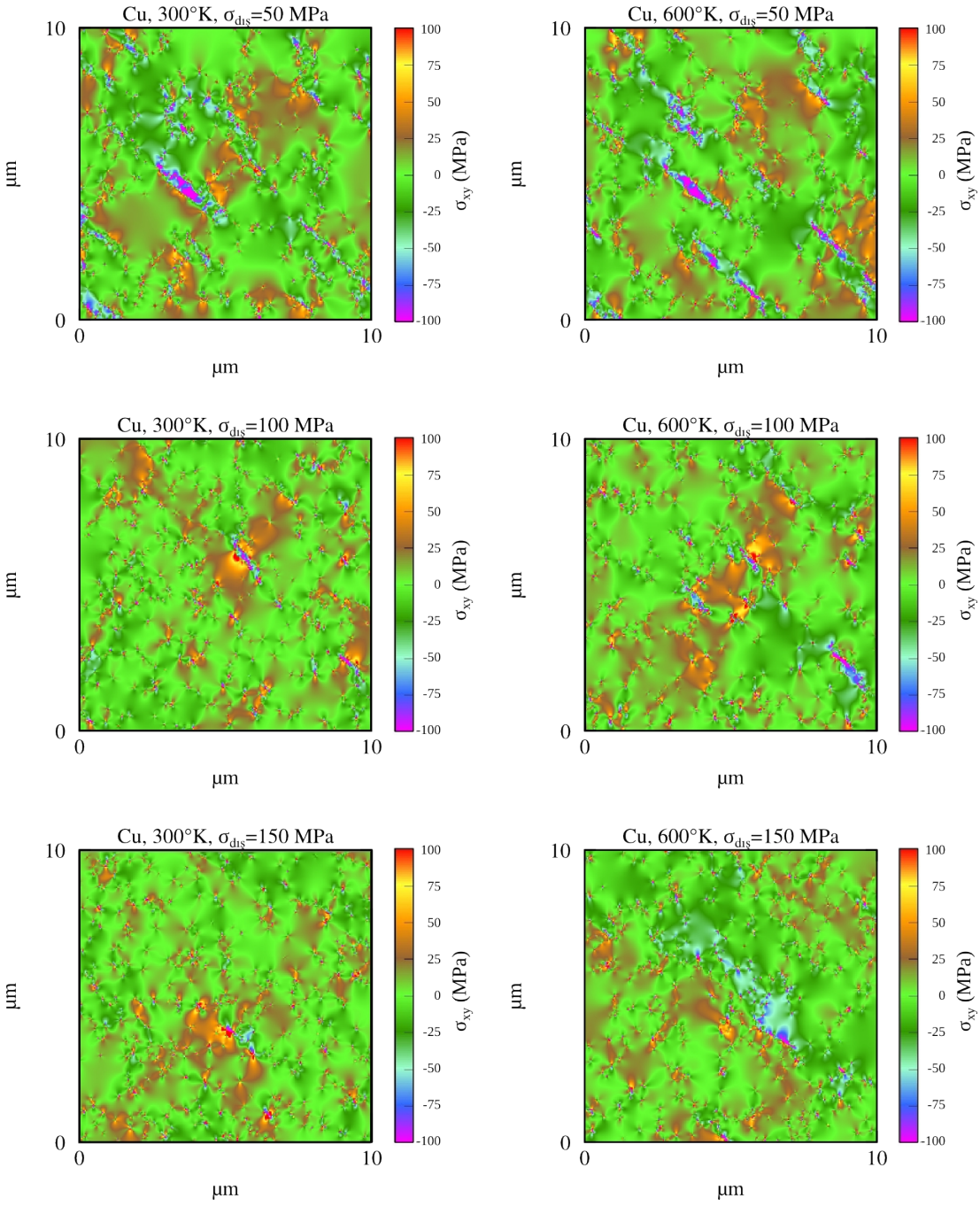
Şekil 5.31'de 10000 benzetim adımı sonucunda 300°K ve 600°K sıcaklıklardaki 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni verilmiştir.

Şekil 5.32'de 10000 benzetim adımı sonucunda 300°K ve 600°K sıcaklıklardaki 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında dislokasyonların kayma hızlarının dağılımı verilmiştir. Kayma hızları artan sıcaklık ve gerilmeyle beraber artmaktadır.

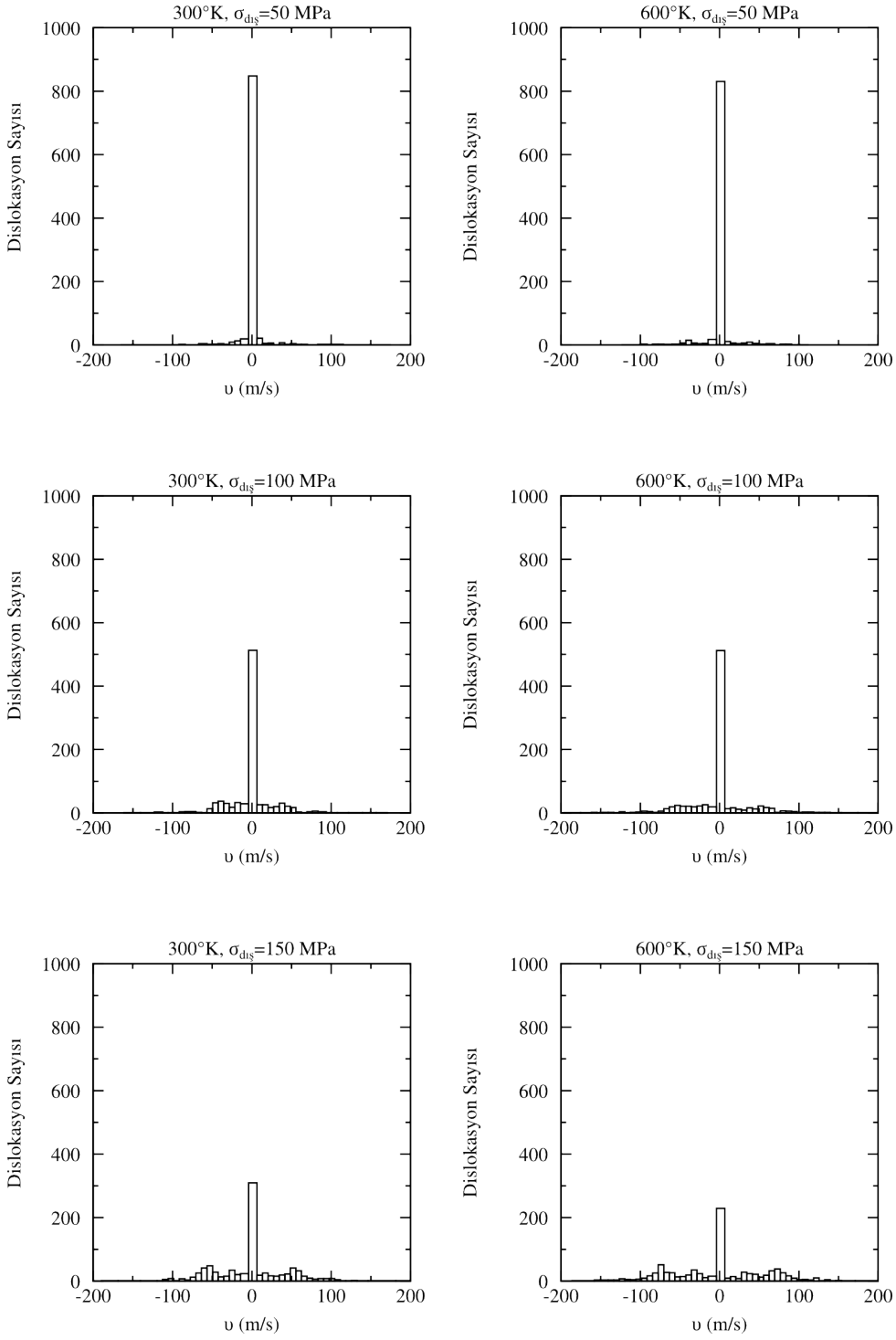
Hücre oluşumunun artan sıcaklık ve gerilmeyle azalmasının dislokasyonların hızlarının artması nedeniyle gerçekleştiği değerlendirilmektedir.



Şekil 5.30. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucunda dislokasyon yapıları



Şekil 5.31. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucundaki dislokasyonların gerilme alanının σ_{xy} bileşeni



Şekil 5.32. Bakırda 300°K ve 600°K sıcaklıklarda, 50, 100, 150 MPa dış gerilme altında ve 10000 benzetim adımı sonucundaki dislokasyonların kayma hızları dağılımı

5.4. Yok Olma Mesafesinin Etkisi

Yok olma mesafesi dislokasyonların etkileşimlerini farklılaştırarak benzetimde kalmalarını veya yok olmalarını belirlemektedir. Bu anlamda yok olma mesafesinin desen oluşumuna yoğun bir etkisi bulunmaktadır. Bu etkileşim değerinin incelenmesi amacıyla kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$
\begin{aligned}
DÇ_{DDM-5} \;=\; & \langle G, \{\{(500,0,0)\} \times (Cu, Al) \times \{\langle tekrarlı, 100\,MPa, [112], 5, 200, \\
& 0\rangle\} \times (5{,}2{,}5\,MPa) \times (40\text{b}, 60\text{b}, 130\text{b}) \times (300\text{b}) \times (0) \\
& \times (evet) \times (hayır) \times (200) \times (10\,\mu m) \times (50{,}500\,ps)\}, \\
& Ç, \{t > 4000\}, veriTopla\rangle
\end{aligned}
\tag{5.6}
$$

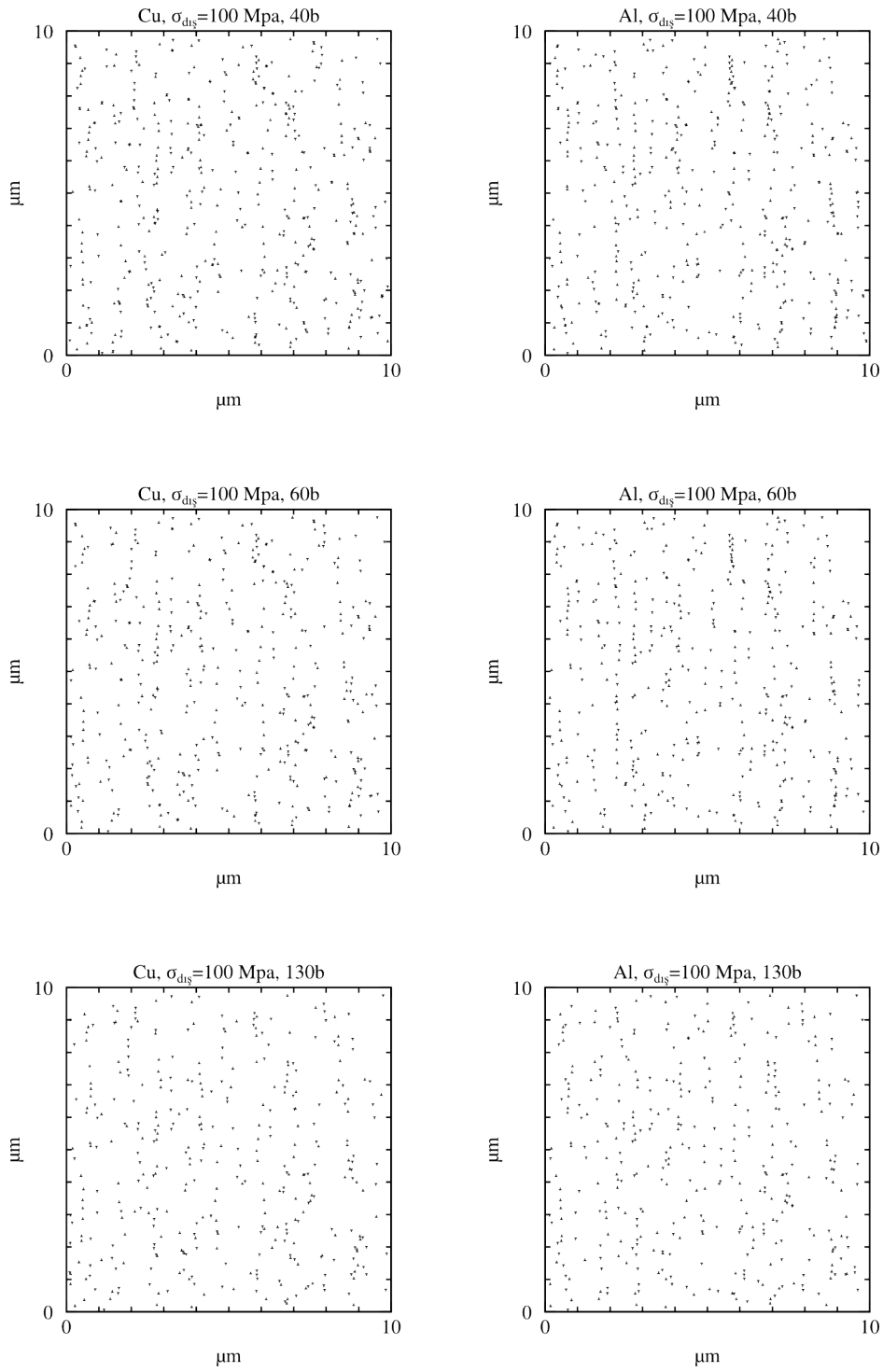
Dislokasyon etmenleri için Denklem (5.2)'de verilen deneysel çerçeve kullanılmıştır.

Elde edilen sonuçlar Şekil 5.33'te gösterilmiştir. Artan yok olma mesafesi ile dislokasyon duvarlarının daha belirsiz hale geldiği, duvarları oluşturan dislokasyon sayılarının azaldığı gözlenmektedir.

5.5. Dislokasyon Birikimlerinin Oluşumu

Çeşitli tipte engeller karşısında dislokasyonlar birikerek dislokasyon dizileri oluşturmaktadır. Bu kapsamda noktasal engellerin dislokasyon hareketini etkilemesi ve birikmelere neden olması incelenmiştir. Bakır ve alüminyum tek kristallerinde, artımlı yükleme ile iki farklı yükleme hızında ve iki farklı engel sayısı ile model çalıştırılmıştır. Kullanılan deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

$$
\begin{aligned}
DÇ_{DDM-6} \;=\; & \langle G, \{\{(500{,}2/10, (100{,}200))\} \times (Cu, Al) \times \{\langle artımlı, 0, [112], 0, \\
& 0, (2{,}0\,x\,10^{5,}\, 1{,}0\,x\,10^{6} GPa\ s^{-1})\rangle\} \times (5{,}2{,}5\,MPa) \times (25\text{b}) \times (300\text{b}) \\
& \times (0) \times (hayır) \times (hayır) \times (0) \times (10\,\mu m) \times (50{,}500\,ps)\}, \\
& Ç, \{t > 4000\}, veriTopla\rangle
\end{aligned}
\tag{5.7}
$$



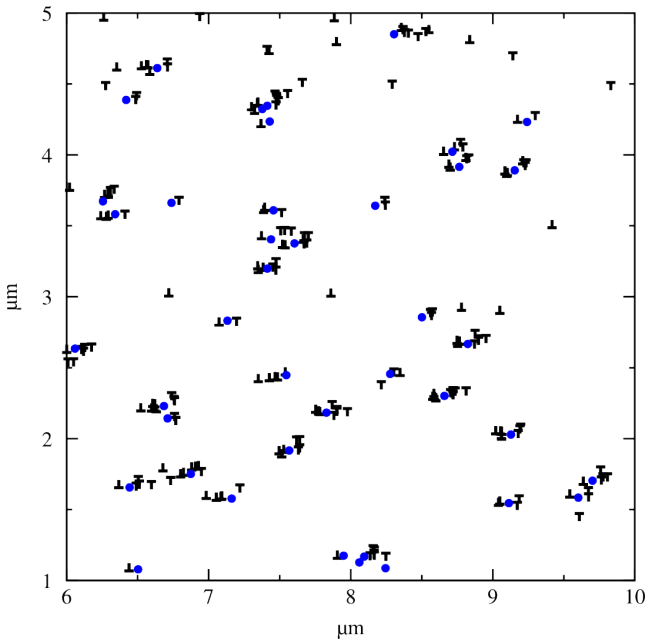
Şekil 5.33. 100 MPa tekrarlı yükleme altında bakırda ve alüminyumda 40b, 60b ve 130b yok olma mesafesi değerleri ile oluşan dislokasyon dağılımları

Dislokasyon etmenleri için Denklem (5.2)'de verilen deneysel çerçeve kullanılmıştır.

Noktasal engele ilişkin deneysel çerçeve aşağıda verilmiştir.

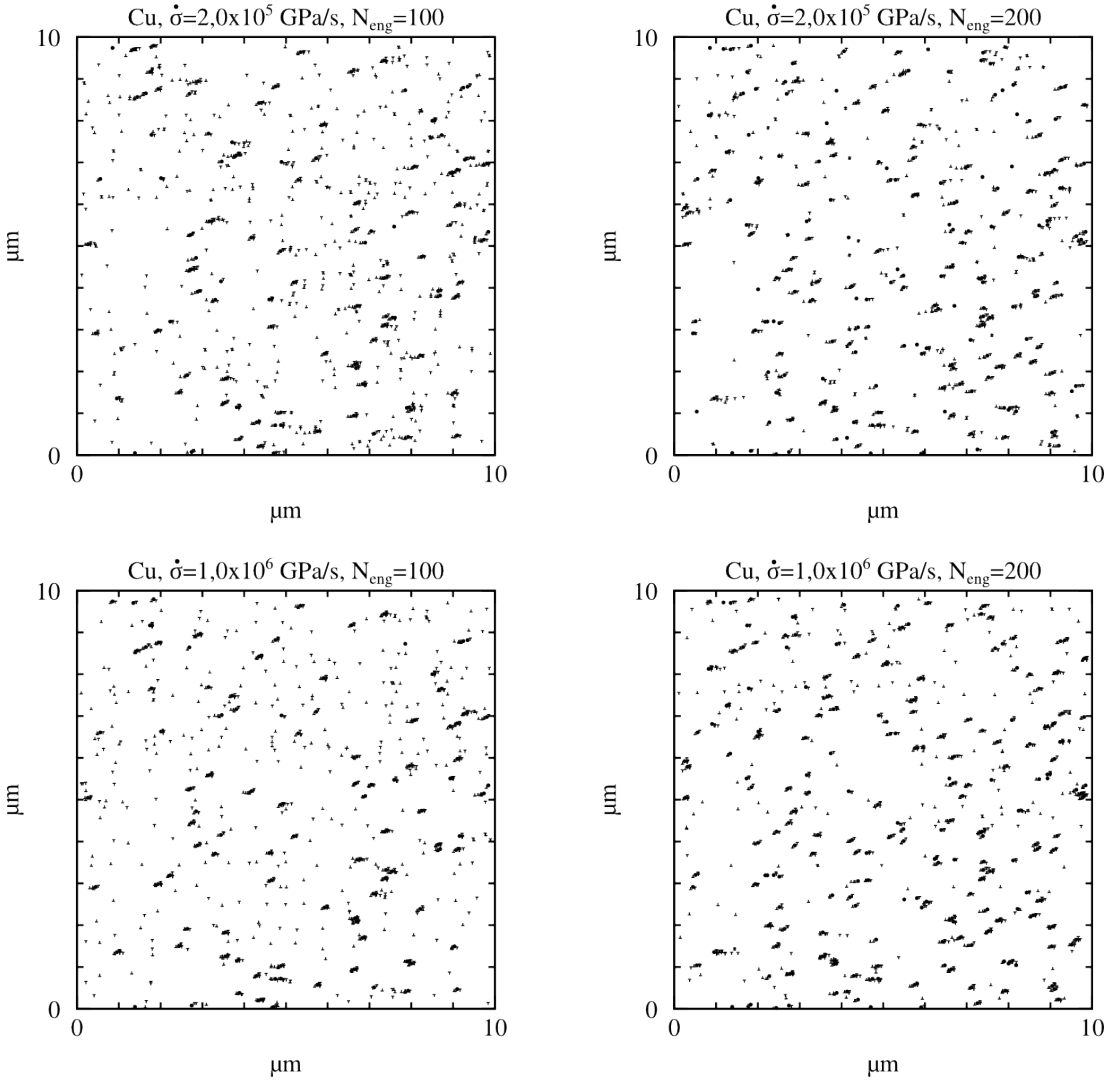
$$DÇ_{eng-1} = \langle AM_{eng}, \{konum, engelÇapı\}, \{rastgeleKonum, 1000b\} \rangle \quad (5.8)$$

Yapılan incelemede engel sayısının ve yükleme hızının artmasıyla engeller etrafında biriken dislokasyonların da arttığı gözlenmiştir. Şekil 5.34'de bakırda 200 engel ve $1.0x10^6$ GPa/s yükleme hızıyla elde edilen birikimlerin büyütülmüş dağılımı verilmiştir.



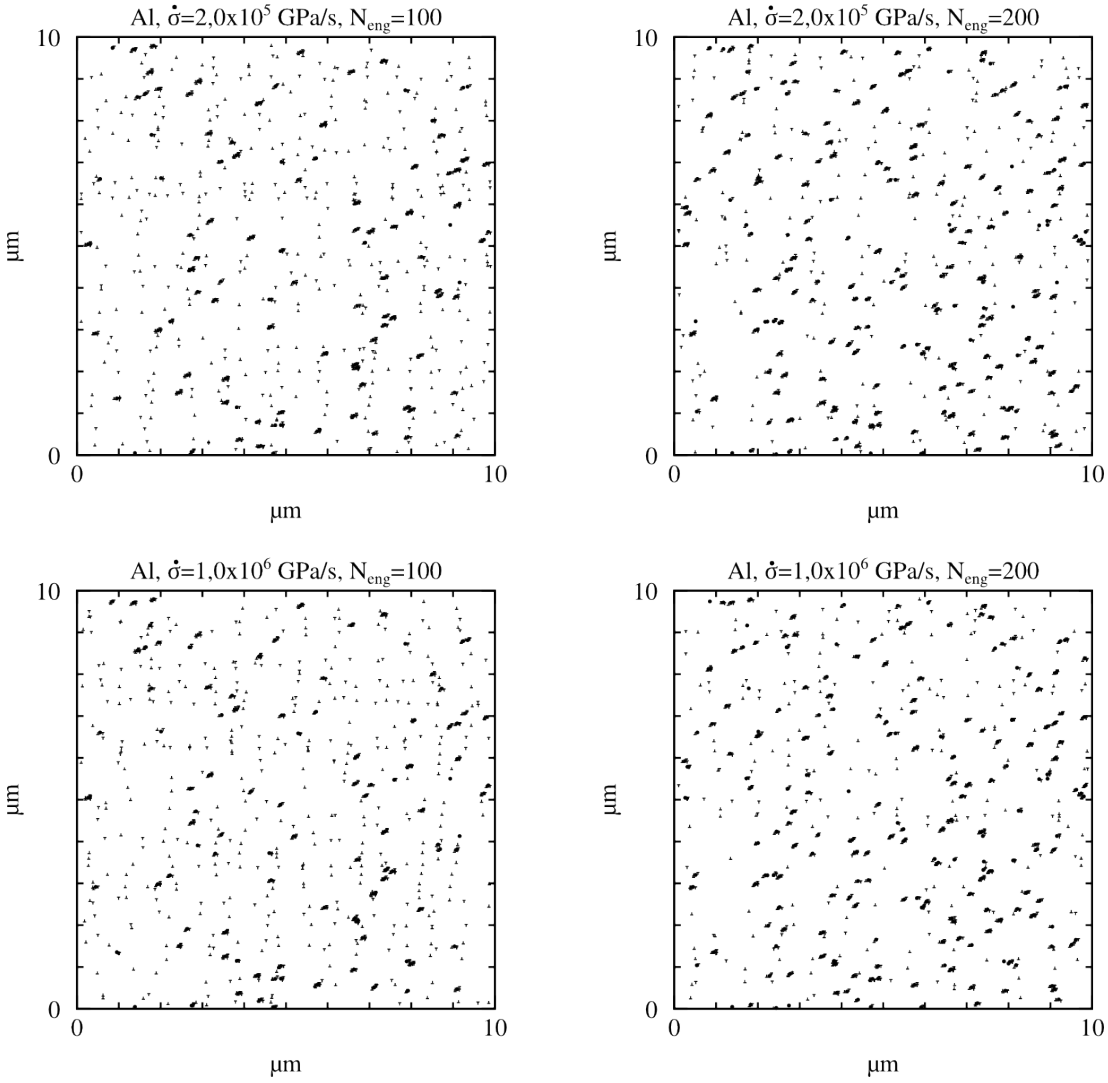
Şekil 5.34. Bakırda, 200 engelle ve $1,0x10^6$ GPa/s yükleme hızıyla elde edilen dislokasyon birikimlerinin büyütülmüş dağılımı

Şekil 5.35 ve 5.36'da bakır ve alüminyum tek kristallerinde elde edilen birikimler, Şekil 5.37 ve 5.38'de dislokasyon dağılımlarına bağlı olarak gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni verilmiştir. Gerilmenin artan engel sayısı ile birlikte arttığı gözlenmiştir.

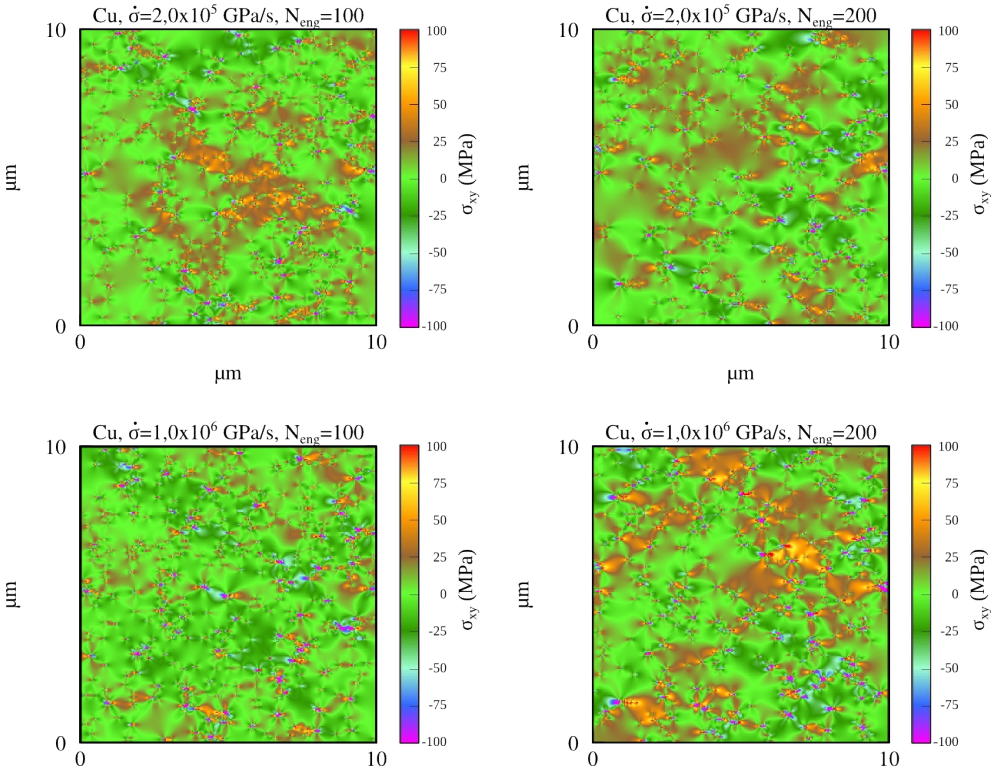


Şekil 5.35. Bakırda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların konumları

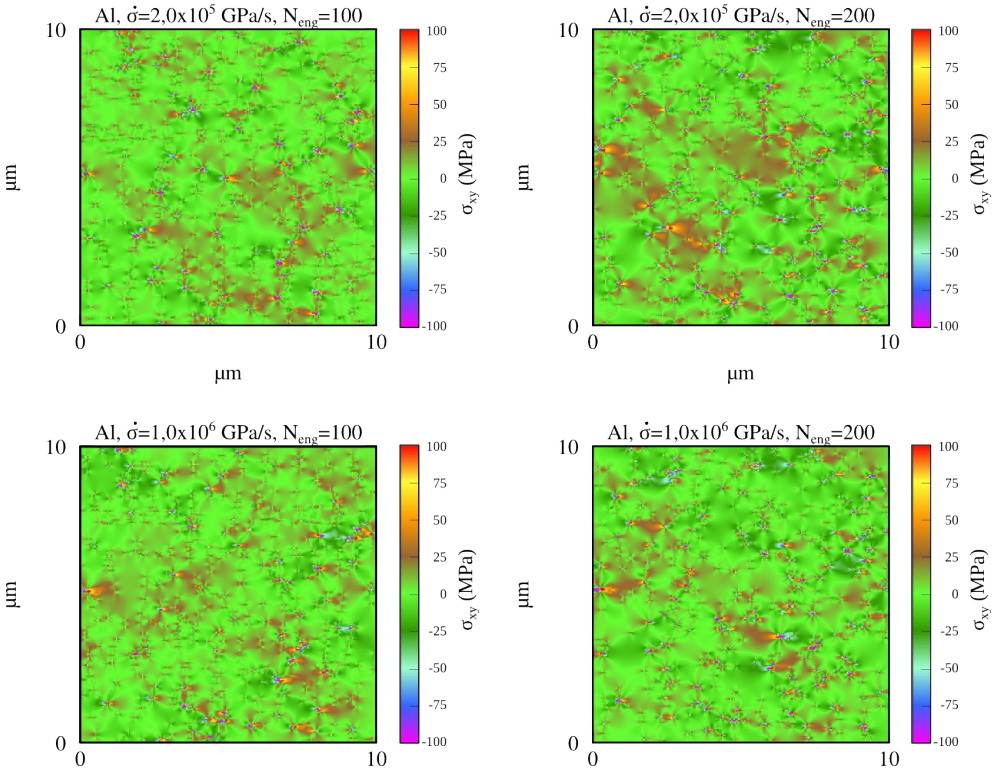
Alüminyum tek kristalinde Şekil 5.36'da görüldüğü gibi engel sayısının az olması durumunda duvar yapılarının oluştuğu, engel sayısının artması durumunda ise bu duvarların bozulduğu tespit edilmiştir. Bakırda yapılan incelemelerde ise duvar oluşumu gözlenmemiştir.



Şekil 5.36. Alüminyumda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların konumları



Şekil 5.37. Bakırda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni



Şekil 5.38. Alüminyumda engel sayısı ve yükleme hızına bağlı olarak dislokasyonların gerilme alanlarının σ_{xy} bileşeni

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışma iki ana aşamadan oluşmaktadır. Birinci aşama, özellikle biyoloji ve sosyolojide geniş bir kullanım alanı bulan etmen tabanlı modelleme yaklaşımının dislokasyon desen oluşumu problemine uygulanmasıdır. İkinci aşama ise geliştirilen modelin kullanımı ile bazı desen oluşumuna ilişkin durumların incelenerek uygulanan yaklaşımın etkinliğinin değerlendirilmesidir.

Birinci aşamada, uygulanabilirliğin sınanması amacıyla etmen tabanlı yaklaşım mezo ölçekte 2 boyutlu tekli veya ikili kayma sistemli dislokasyon desen oluşumu problemine uygulanmıştır. Etmen tabanlı yaklaşımın kullanılmasıyla elde edilen sonuçlar aşağıda verilmiştir:

- Molekül dinamiği, dislokasyon dinamiği ve C.A. gibi diğer modelleme yaklaşımlarıyla karşılaştırıldığında etmen tabanlı yaklaşım, dislokasyonların hareketini gerçeğine daha yakın kavramlarla modelleyebilmektedir. Bu durum, modelleme çalışmalarını kolaylaştırmakta ve altta yatan mekanizmaların daha iyi incelenmesini ve anlaşılmasını sağlamaktadır.

- Çevre kavramının birinci dereceden soyutlanması ve dislokasyonların özerk hareket eden etmenler olarak ele alınması ile modelleme ve kural oluşturma çalışmaları kolaylaştırılmış ve benzetimin gerçekçiliği arttırılmıştır.

- Etmen tabanlı yaklaşım, uzayın sürekli olarak modellenmesine olanak tanıyarak sonuçların doğruluğunun ve dolayısıyla sadakat seviyesinin yükseltilmesini sağlamaktadır. Etmenlerin sürekli uzayda hareketleri seçilen zaman adımına bağlıdır. Bu adım etmenlerin düzgün bir şekilde etkileşime girebilecekleri kadar düşük olurken, aynı zamanda benzetim koşumunun makul sürelerde tamamlanmasını sağlayacak kadar yüksek olmalıdır.

- Sıradüzensel yapılanma karmaşık sistemlerin en temel özelliklerinden biridir. Etmen tabanlı yaklaşım, sahip olduğu nesneye dayalı tasarım özelliği ile sıradüzensel yapıların modellenmesini kolaylaştırmaktadır. U.M.L. kullanılarak

oluşturulan yapısal ve davranışsal diyagramlar sisteme biçimsel bir şekilde yaklaşma olanağı sunarak özellikle çok ölçekli modelleme çalışmalarında etmen tabanlı yaklaşımın başarı ile kullanılabileceğini göstermektedir. Bu çalışma kapsamında ele alınmamakla birlikte, nano ölçekten başlayarak, mikro, mezo ve makro ölçeklerde etmen yapılarının ve aralarındaki ilişkilerin tanımlanmasıyla en üst düzeyde malzeme özelliklerinin elde edilmesi mümkün görünmektedir.

- Etmen tabanlı yaklaşım, bir modelleme yöntembilimi ile birlikte uygulandığında sistematik bir yaklaşım sağlanabilmektedir. Bu çalışma kapsamında, basit modellerden başlayarak kapsamlı modellere ulaşılmasını sağlayan bir yöntembilim izlenmiştir.

- Aşağıdan yukarı kurulan D.D.M. yine aynı doğrultuda oluşturulan bir doğrulama ve geçerleme yaklaşımı ile değerlendirilmiştir. Üç seviyeye ayrılan geçerleme yaklaşımında, tekil etmenlerin davranışları birinci seviyeyi, ikili etmen davranışları ikinci seviyeyi ve çoklu etmen davranışları da üçüncü seviye geçerlemeyi oluşturmaktadır. Bu şekilde model sonuçlarının deneysel çalışmalarla ve diğer bilgisayar benzetimleri ile paralellik gösterdiği belirlenmiştir. Seviyelendirilmiş geçerleme yönteminin etmenlerin birbirleri ve çevre ile olan etkileşimlerinin belirlenmesinde etkin olduğu ve buna bağlı olarak beliren özellikleri yaratan mekanizmaların daha kolay ortaya çıkarılabildiği değerlendirilmiştir.

- Açık kaynak olarak bulunan E.T.M.B. araçları ile karmaşık sistemlerin modellenmesi yazılım programlama bilgisi gerektirmektedir. Bu şekilde programlama ile esnek ve ayrıntılı modeller oluşturulabilmektedir. Repast Symphony aracı, bu bakımdan oldukça iyi bir altyapı sunmaktadır.

İkinci aşamada, geliştirilen modelle desen oluşumuna yükleme ve sıcaklık çevresel değişkenlerinin, yok olma mesafesi etkileşim değişkeninin ve kaynak olarak engel varlığının etkileri incelenmiştir. Bu kapsamda çeşitli deneysel çerçeveler kullanılarak model çalıştırılmış ve sonuçlar irdelenmiştir. Yükleme tekrarlı, sabit ve artımlı olarak değiştirilmiş bu şekilde çevrenin desen oluşumuna etkisi, tekli ve ikili kayma sistemlerinde gözlenmiştir.

İkinci aşamada elde edilen sonuçlar aşağıda verilmiştir:

- Dislokasyon desenlerinin oluşumu uygulanan tekrarlı dış gerilmeyle bağlantılıdır. Gerilme değeri arttıkça duvarları oluşturan dislokasyonların sayısı artmakta ve duvarlar daha belirgin hale gelmektedir. Cu ve Al tek kristallerinde, uygulanan dış gerilme 50 MPa iken dislokasyon duvarları 6-7 dislokasyondan oluşurken, 100 MPa'da 20-30 dislokasyona çıkmakta ve 150 MPa'da tüm matrise yayılmaktadır.

- Duvar oluşumu arttıkça dislokasyonların ortalama hızları sıfıra yaklaşmaktadır.

- Dislokasyon çoğalma hızı uygulandığında duvar oluşumunun arttığı ve hızın sıfır olduğu duruma göre duvarların matrise daha düşük dış gerilmelerde yayıldığı gözlenmiştir.

- Bakırda $\dot{N}_n$=0 iken uygulanan dış gerilmeye bağlı olarak dislokasyon duvarlarının oluşumu 150 MPa dış gerilmede, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda az sayıda gözlenmiştir. Diğer gerilme değerlerinde duvar oluşumu bulunmamaktadır. $\dot{N}_n$=2/10 iken dislokasyon duvarlarının oluşumunu 150 MPa dış gerilmede, 300°K ve 600°K sıcaklıklarda $\dot{N}_n$=0'a göre daha fazla olduğu gözlenmiştir. Alüminyumda durum daha farklıdır. Burada dislokasyon duvarlarının oluşumu her sıcaklık ve gerilme durumunda net olarak gözlenmiştir.

- Artan yok olma mesafesi ile dislokasyon duvarlarının daha belirsiz hale geldiği, duvarları oluşturan dislokasyon sayılarının azaldığı gözlenmektedir.

- Engel sayısının ve yükleme hızının artmasıyla engeller etrafında biriken dislokasyonların da arttığı gözlenmiştir. Alüminyumda engel sayısının az olması durumunda duvar yapılarının oluştuğu, engel sayısının artması durumunda ise bu duvarların bozulduğu tespit edilmiştir. Bakırda yapılan incelemelerde ise duvar oluşumu gözlenmemiştir.

Gelecekteki çalışmalar açısından modelin iyileştirme alanları aşağıda verilmiştir:

- Vida dislokasyonlarının eklenmesiyle model geliştirilebilir.

- Engellerin matris içerisindeki hareketi modellenebilir.

- Uzay ölçeğinde sıradüzensel yapıların kurulmasıyla genel malzeme özelliklerinin tespiti gerçekleştirilebilir.
- Yüksek performanslı hesaplama tekniklerinin uygulanması ile daha yüksek sayıda etmenin yer aldığı ve daha geniş alanı kapsayan modeller kullanılabilir.
- 3. boyutun eklenmesi ile özellikle dislokasyon etkileşimleri daha gerçekçi hale getirilebilir.
- Isı denklemi çözülerek daha gerçekçi sıcaklık etkileri incelenebilir.

KAYNAKLAR

[1] Çapan, L., *Metallere Plastik Şekil Verme*, Çağlayan Kitabevi, İstanbul, 2010.

[2] Minor, A. M., Syed Asif, S. A., Shan, Z., Stach, E. A., Cyrankowski, E., Wyrobek, T. J., Warren, O. L., A new view of the onset of plasticity during the nanoindentation of aluminium, *Naturematerials*, 2006, **5**, 697-702.

[3] Oh, S. H., Legros, M., Kiener, D., Dehm, G., In situ observation of dislocation nucleation and escape in a submicrometre aluminium single crystal, *Naturematerials*, 2009, **8**, 95-100.

[4] Ananthakrishna, G., Statistical and Dynamical Approaches to Collective Behavior of Dislocations, Editors: Nabarro, F. R. N., Hirth, J. P., *Dislocations in solids*, Elsevier, 81-223, 2007.

[5] Osetsky, Y. N., Bacon, D. J., Atomic-level interaction of an edge dislocation with localized obstacles in fcc and bcc metals, *International Union of Theoretical and Applied Mechanics*, Osaka, Japonya, Mayıs 2003.

[6] Osetsky, Y. N., Bacon, D. J., An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, **11**, 427-446.

[7] Kubin, L. P., Fressengeas, C., Ananthakrishna, G., Collective Behaviour of Dislocations in Plasticity, Editors: Nabarro, F. R. N., Duesbery, M. S., *Dislocations in Solids*, Elsevier, 103-111, 2002.

[8] Nicolis, G., Prigogine, I., *Exploring Complexity*, R. Piper GmBH & Co. KG Verlag, 1989.

[9] Louchet, F., From individual dislocation motion to collective behaviour, *Journal of Materials Science*, 2006, **41**, 2641-2646.

[10] D'Inverno, M., Howells, P., Montagna, S., Roeder, I., Saunders, R., Agent-Based Modeling of Stem Cells, Editors: Uhrmacher, A. M., Weyns, D., *Multi-agent systems: simulation and applications*, CRC Press, 389-418, 2009.

[11] Dembele, J, Cambier, C, Contribution to the modeling of complex physical systems described by PDE: a 2D multi-agent model for convection-diffusion, *International Conference on Complex Systems*, Quincy, MA, ABD, 28 Ekim - 7 Kasım 2007.

[12] Bertelle, C., Olivier, D., Jay, V., Tranouez, P., Cardon, A., A Multi-Agent System integrating Vortex Methods for Fluid Flow Computation, *16th IMACS World Congress on Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation*, Lozan, İsviçre, 21-25 Ağustos 2000.

[13] Blikstein, P., Wilensky, U., MaterialSim: An Agent-Based Simulation Toolkit for Learning Materials Science, *International Conference on Engineering Education*, Gainesville, Florida, ABD, 16-21 Ekim 2004.

[14] Bay, B., Hansen, N., Hughes, D. A., Kuhlmann-Wilsdorf, D., Evolution of f.c.c. deformation stuructures in polyslip, *Acta Metallurgica et Materialia*, 1992, **40**, 205-219.

[15] Sangi, D., Steck, E. A., Bross, S., Simulation of self-organised dislocation structures in f.c.c. and b.c.c single crystals, *Acta Mechanica*, 1999, **132**, 93- 112.

[16] Macal, C. M., North, M. J., Tutorial on Agent-Based Modeling and Simulation, *Proceedings of the 2005 Winter Simulation Conference*, Orlando, Florida, ABD, Aralık 2005.

[17] Nabarro, F. R., Fifty-year study of the Peierls-Nabarro stress, *Materials Science and Engineering*, 1997, **234**, 67-76.

[18] Wouters, O., Plasticity in Aluminum Alloys at Various Length Scales, Doktora Tezi, Groningen Universitesi, Lahey, 2006.

[19] Mughrabi, H., Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically deformed metal crystals, *Revue De Physique Appliquée*, 1988, **23**, 367-379.

[20] Zaiser, M., Haehner, P., The flow stress of fractal dislocation arrangements, *Materials Science and Engineering*, 1999, **A270**, 299-307.

[21] Clouet, E., The vacancy–edge dislocation interaction in fcc metals:A comparison between atomic simulations and elasticity theory, *Acta Materialia*, 2006, **54**, 3543–3552.

[22] Bullough, R., Newman, R.C., The kinetics of migration of point defects to dislocations, *Rep.Prog.Phys.*, 1970, **33**, 101-148.

[23] Bako, B., Stochastic Dislocation Dynamics, Doktora Tezi, *Eötvös Üniversitesi*, Budapeşte, 1999.

[24] Kuhlmann-Wilsdorf, D., LEDS Theory Of Workhardening Stages And "Planar" Versus "Distributed" Glide, *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1994, **31**, 729-734.

[25] Holt, D., Dislocation Cell Formation in Metals, *Journal of Applied Physics*, 1970, **41**, 3197-3201.

[26] Lepinoux, J., Kubin, L. P., The Dynamic Organization of Dislocation Structures: A Simulation, *Scripta Metallurgica*, 1987, **21**, 833-838.

[27] Schweitzer, F., *Browning Agents and Active Particles*, Springer, 2003.

[28] Güllüoğlu, A. N., Srolovitz, D. J., LeSar, R., Lomdahl, P. S., Dislocation Distributions in Two Dimensions, *Scripta Metallurgica*, 1989, **23**, 1347-1352.

[29] Amodeo, A. J, Ghoniem, N. M, Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics, *Physical Review B*, 1990, **41**, 6958-6967.

[30] Bross, S., Steck, E. A., Simulation of selforganised dislocation structures in b.c.c. single crystals, *Computational Materials Science*, 1998, **13**, 16-22.

[31] Chiu, Y., Veyssiere, P., Dislocation self-organization under single slip straining and dipole properties, *Materials Science and Engineering*, 2008, **A483-484**, 191-194.

[32] Miguel, M. C., Vespignani, A., Zapperi, S., Weiss, J., Grasso, J. R., Complexity in dislocation dynamics: model, *Materials Science and Engineering*, 2001, **A309-310**, 324-327.

[33] Miguel, M. C., Vespignani, A., Zapperi, S., Weiss, J., Grasso, J. R., Intermittent dislocation flow in viscoplastic deformation, *Nature*, 2001, **410**, 667-671.

[34] Hull, D., Bacon, D. J., *Introduction to Dislocations*, Butterworth-Heinemann, 2001.

[35] Fournet, R., Salazar, J. M., Formation of dislocation patterns: Computer simulations, *Physical Review B*, 1996, **53**, 6283-6290.

[36] Roos, A., Fast-moving Dislocations in High Strain Rate Deformation, Doktora Tezi, Groningen Üniversitesi, Lahey, 1999.

[37] Bonabeau, E., Agent-based modeling: Methods and techniques for simulating human systems, *PNAS*, 2002, **99**, 7280-7287.

[38] Castle, C. J., Crooks, A. T., Principles and Concepts of Agent-Based Modelling for Developing Geospatial Simulations, *UCL Working Paper Series***,** Paper 110, 8-40, 2006.

[39] Michel, F., Ferber, J., Drogoul, A., Multi-Agent Systems and Simulation: A Survey from Agent Community's Perspective, Editors: Uhrmacher, A. M., Weyns, D., *Multi-agent systems: simulation and applications*, CRC Press, 3-51, 2009.

[40] Keil, D., Goldin, D., Indirect Interaction in Environments for Multi-agent Systems, Editors: Weyns, D., Van Dyke P., Michel, F., *Environments for multi-agent systems ii*, Springer Berlin / Heidelberg, 68-87, 2006.

[41] Lada, A., SwarmWiki, Michigan Üniversitesi, http://www.swarm.org/index.php/Main_Page (Ziyaret tarihi: 10 Ekim 2009).

[42] North, M., Repast Suite, Argonne National Laboratory, http://repast.sourceforge.net/ (Ziyaret tarihi: 15 Eylül 2011).

[43] Kenneth, D., MASON Multiagent Simulation Toolkit, George Mason Üniversitesi, http://cs.gmu.edu/~eclab/projects/mason/ (Ziyaret tarihi: 15 Ekim 2009).

[44] Wilensky, U., NetLogo Home Page, Northwestern Üniversitesi, http://ccl.northwestern.edu/netlogo/ (Ziyaret tarihi: 11 Ekim 2009).

[45] Klügl, F., Multiagent Simulation Model Design Strategies, *Proceedings of the Second Multi-Agent Logics, Languages, and Organisations Federated Workshops*, Turin, Italya, 7-10 Eylül 2009.

[46] Gomez-Garcia, D., Devincre, B., Kubin, L. P., Dislocation Patterns and the Similitude Principle: 2.5D Mesoscale Simulations, *Physical Review Letters*, 2006, **96**, 125503-1-4.

[47] Hardy, D., Switching Functions, Illinois Üniversitesi, http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/1.5/ug/node52.html (Ziyaret tarihi: 16 Eylül 2011).

[48] Hloucha, M., Deiters, U. K., Fast coding of the minimum image convention, *Molecular Simulation*, 1998, **20**, 239-244.

[49] Klügl, F., Towards a Formal Framework for Multi-Agent Simulation Models, *The Institute of Computer Science Technical Report*, 412, 1-21, 2007.

[50] Laird, C., Charsley P., Mughrabi, H., Low Energy Dislocation Structures Produced by Cyclic Deformation, *Materials Science and Engineering*, 1986, **81**, 433-450.

[51] Jin, N. Y., Winter, A. T., Dislocation Structure In Cylically Deformed [001] Copper Crystals, *Acta Metallurgica*, 1984, **32**, 1173-1176.

[52] Straub, S., Blum, W., Maier, H. J., Ungar, T., Borbely, A., Renner, H., Long-range Internal Stresses In Cell And Subgrain Structures Of Copper During Deformation At Constant Stress, *Acta Metalurgica*, 1996, **11**, 4337-4350.

KİŞİSEL YAYIN VE ESERLER

[1] Öztürk, S., **Uzunali, A.**, Gencer, M., Kılıç, E., Ölmez, Ç., Test Environments for Distributed Simulation Systems, *Test İstanbul 2010*, İstanbul, Türkiye, 2010.

[2] Bacchelli, F., Boury-Brisset, A., Isenor, A., Kuehne, S., Martınez, R.B., Miles, J., Mojtahedzadeh, V., Poell, R., Rasmussen, R., **Uzunali, A.,** Wunder, M., Semantic Interoperability, *NATO Research and Technology Organisation*, July 2010.

[3] Dikenelli, O., Tüm, S., **Uzunali, A.**, Akgün, S., Etmen ve Ontoloji Temelli Ağa Hazır Komuta Kontrol Sistemi Kavramsal Mimarisi, *4. Savunma Teknolojileri Kongresi*, Ankara, Türkiye, 26-27 Haziran 2008.

[4] Aniktar, H., **Uzunali, A.**, Otomotiv Endüstrisinde Akıllı Kokpit Uygulamaları ve Geleceği, *TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezi*, 2003.

[5] **Uzunali, A.**, Büyük Ölçekli Şirketlerde AR-GE Organizasyonu, *Metal ve Makine Dergisi*, Nisan 1996.

[6] Bakan, H.İ., **Uzunali, A.**, Günay, V., C-PEEK Kompozitlerin Mekanik Özellikleri Üzerinde Isıl İşlemin Etkisi, *8. Uluslararası Metalurji ve Malzeme Sempozyumu*, İstanbul, Türkiye, Haziran 1995.

[7] Öktem, Z., **Uzunali, A.**, Çapan, L., 2024 Al Alaşımının Aşınma Özellikleri Üzerinde Isıl İşlemin Etkisi, 8. *Uluslararası Metalurji ve Malzeme Sempozyumu*, İstanbul, Türkiye, Haziran 1995.

[8] Çapan, L., **Uzunali, A.**, Silindirik Kapların Derin Çekmesinde Anizotropinin Etkisi, *6. Denizli Malzeme Sempozyumu*, Denizli, Türkiye, Nisan 1995.

[9] **Uzunali, A.**, Karbon Elyaf Takviyeli Polimer Matris Kompozitler, *TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezi*, 1994.

[10] Kaykayoğlu, C. R., Öztürk, İ., Bayar, C., **Uzunali, A.**, Meto, Ş., Kanat/Dış Yük Aerodinamik ve Yapısal Analizi: Sayısal Simülasyon, *ODTÜ Havacılık Bölümünün 10 uncu Kuruluş Yıldönümü Sempozyumu*, Ankara, Türkiye, Haziran 1991.

[11] **Uzunali, A.**, Kaykayoğlu, C. R., F-16 Uçağı Etrafında 3B Ağ Oluşturma, *7. Ulusal Mekanik Kongresi*, Antalya, Türkiye, 1-8 Eylül 1991.

[12] Kaykayoğlu, C. R., Bayar, C., **Uzunali, A.**, Moving Point Method Simulation of Heat Transfer for Viscous Flows, *Proceeding of the ASME/ESTA İstanbul Conference*, 1992, **47-3**, 131-136.

[13] Kaykayoğlu, C. R., **Uzunali, A.**, Bayar, C., Computer Aided Static Aeroelastic Analysis of Wing/Pylon/Store Combination, *30th Aircraft Symposium*, Japonya, 30 Eylül-2 Ekim 1992.

ÖZGEÇMİŞ

1968 yılında İstanbul'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini İstanbul'da tamamladı. 1985 yılında girdiği İstanbul Teknik Üniversitesi, Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi, Uçak Mühendisliği Bölümü'den 1989 yılında mezun oldu. Ekim 1989 - Mayıs 1993 arasında, İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Uzay Bilimleri Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans öğrenimini tamamladı.

1989 - 1996 yılları arasında TÜBİTAK Marmara Araştırma Merkezi Malzeme Enstitüsünde Araştırmacı ve Uzman Araştırmacı, 1996 - 1997 yılları arasında Işıklar Holding'de ARGE mühendisi olarak çalıştı. 1997 - 2001 yılları arasında serbest olarak bilgisayar programcılığı yaptı.

2001 yılından beri TÜBİTAK BİLGEM Bilişim Teknolojileri Enstitüsü'nde Başuzman Araştırmacı olarak çalışmaktadır. Evli ve iki çocuk babasıdır.