

NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA

Aytuğ ARIKAN, Erhan ALTAN *

Yüksek teknolojinin ihtiyaçlarını karşılamak için mikro ve nano (mikroaltı) ölçekte talaşlı imalat yapmak zorunlu hale gelmiştir. Günümüzde, tezgahların pozisyonlama hassasiyetlerinin gelişimi sonucu, sabit diskler, teleskop ve laser aynaları ile mercekleri, mikro-elektromekanik parçalar gibi yüksek hassasiyet isteyen ürünlerin tek kesen ağızlı elmas takımlar ya da çok kesen ağızlı elmas taşlama taşları kullanılarak mikro ve nano ölçekte imalatının gerçekleştirilmesi mümkündür.

Nano ölçekte, malzemelerin plastik akış ve kırılmalarının atomistik olması nedeniyle, analizlerde sürekli ortamlar mekaniği ilkeleri kullanılamamaktadır. Nano ölçekte talaş kaldırma mekanizmalarını ve parametrelerini incelemek için moleküler dinamik modelleme ve simülasyon kullanılmaktadır.

Bu çalışmada, nanoteknoloji ve nano ölçekte talaş kaldırma konu edilmektedir. Moleküler dinamik kullanılarak nano ölçekte talaş kaldırma modellemesi ve simülasyonu konusundaki araştırmalar literatür bazlı verilmektedir.

Anahtar sözcükler: Nanoteknoloji, Nano Ölçekte Talaş Kaldırma, Moleküler Dinamik

Micro and nano (sub-micro) scale machining have become a necessity to provide the needs of high technology. Nowadays, as a result of the progresses of machine tool positioning accuracies, it is possible to produce high precision products like hard disks, telescope and laser mirrors and lenses, micro-electromechanic components, by using single-point diamond tools or multi-point grinding diamond tools.

Principles of continuum mechanics cannot be applied to the analysis in nano-scale, because plastic flow and fracture of the materials are atomistic. Molecular dynamics modeling and simulation are used to investigate nano-scale machining mechanisms and parameters.

In this paper, nanotechnology and nano-scale machining are devoted. Researches on the modeling and simulation of nano-scale machining by using molecular dynamics are given as a review literary based.

Keywords: Nanotechnology, Nano-Scale Machining, Molecular Dynamics

* Yıldız Teknik Üniversitesi, Makina Müh. Bölümü

GİRİŞ

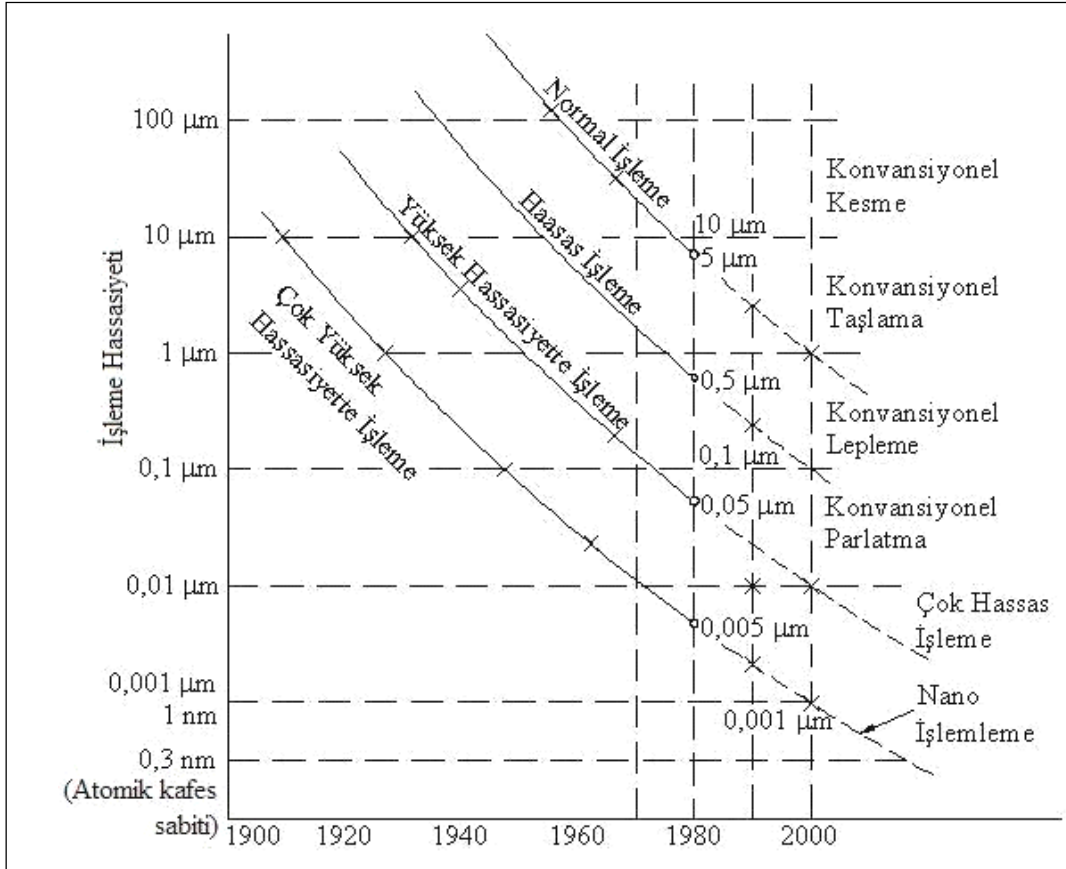
Ünlü fizikçi Richard Feynman'ın 1959 yılında atomik boyutta yapılabilecek teknolojik gelişmeleri ortaya koymasının [1] ardından başlayan minyatürleştirme akımı sonrası, nanoteknoloji terimi, ilk defa, 1974 yılında Taniguchi tarafından tanımlanmıştır [2]. Taniguchi'ye göre nanoteknoloji, "nanometre altı çözünürlük ile nanometre hassasiyetinde konum kontrol, boyutsal ölçüm ve malzeme işleme teknolojileriyle bütünleşik işleme sistemleri" teknolojileridir [3]. Sabit diskler, teleskop ve laser aynaları ile mercekleri, mikro-elektromekanik parçalar (MEMs) gibi yüksek hassasiyet isteyen ürünlerin imalat tekniklerini içine alan nanoteknoloji için en güncel tanımlama, 2000 yılında McKeown v.d. tarafından "boyutu 100 nm'den küçük olan ve istenilen fonksiyonel performansı sağlamak için gerekli yapıların çalışmaları, gelişimi ve malzemelerin, araçların ve sistemlerin işlenmesi" şeklinde verilmiştir [4].

Nanoteknoloji uygulamaları, genelde, "yukarıdan-aşağı" ya da "aşağıdan-yukarı" şeklinde iki yaklaşımla ele alınabilir. "Yukarıdan-aşağı" yaklaşımı, atomların dolaylı olarak kontrol edilerek nano boyutta yapıların üretiminin sağlandığı teknikler olarak ele alınırken, "aşağıdan yukarı" - ya da "moleküler nanoteknoloji", nano boyutta yapıların atom-atom ya da molekül-molekül oluşturulması teknikleri olarak ele alınabilir [5]. Günümüz endüstrisinde yukarıdan aşağı yaklaşımına dayanan birçok teknikle, nano ölçekte imalat yapılmaktadır. Bunlara örnek olarak X ışını litografisi, karbon nanotüplerinin sentezlenmesi teknikleri gibi makro yapıların mikro parçalarının imalatı yöntemleri verilebilir. Fakat aşağıdan yukarı yaklaşımına dayalı uygulamalar, henüz kuramsal niteliktedir ve şimdilik uygulama çok azdır. Bu uygulamalara buharlaştırma, difüzyon ya da çözünme yoluyla atomik mertebede malzeme taşınımı örnek verilebilir [3].

Büyük bir hızla gelişen yüksek hassasiyette imalat ve işleme teknikleri, yukarıdan aşağı yaklaşımı ile ele alındığında, oldukça klasik bir teknolojidir. Tezgahların konumlandırma doğruluğunun gelişmesiyle beraber, nanometrik ölçekte üretim teknikleri de, büyük bir ilerleme göstermiştir. Şekil 1'de, 2000'li yıllara kadar zamanla gelişen işleme hassasiyeti grafiği görülebilir. Teknolojinin gelişmesiyle beraber talaş

kaldırma tekniklerindeki gelişmeler, konumlandırma doğruluğunun artmasıyla toplam işleme hassasiyetinde artışa izin vermiştir. Konumlandırma doğruluğunun artması, konvansiyonel talaş kaldırma tekniklerinin yanı sıra çok hassas işleme tekniklerinin ve nano ölçekte işlemlerin gelişmesini sağlamıştır.

Bu tip operasyonlar için geliştirilen tezgahlar, silindirik ya da düzlemsel formlar oluşturmak için tipik olarak sadece bir adet doğrusal hareket eksenini gerektiriyordu. Tezgahlarda genellikle hava yastıklı iş mili ve granit taban üzerine kurulu lineer kızaklar kullanılıyordu. Tezgahlar, daha sonra CNC kontrol ve konum geri besleme



Şekil 1. 2000'li Yıllara Kadar İşleme Hassasiyetinin Gelişimi [3]

NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMA

Yüksek hassasiyette işleme teknikleri, sabit disk sürücülerde kullanılan hafıza disklerinin ve fotokopi makinalarında kullanılan fotoreseptörlerin üretilmesinde 1970'lerde başarıyla uygulanmaya başlandı. Bu tip uygulamalar, çok düzgün yüzeyler söz konusu olduğunda çok yüksek geometrik doğruluk gerektirmektedir. Bu yüzeyler frezeleme, lepleme ve parlatma gibi çoklu işlemlerden başka tek kesen ağızlı elmas takımlarla yüksek hassasiyette tornalama ile elde edilebilmektedir.

teknolojisi ile birlikte çok eksenli sistemler kullanılarak geliştirildi. Bu dönemde gelişim, yüksek hassasiyette işleme teknolojisini temel alan tek kesen ağızlı elmas takımla tornalama konularında görüldü. Bu yüzden işlem, elmas takımlarla işlenebilen malzemelerle sınırlı kaldı. Bu tür malzemeler, hemen hemen tüm yüzey merkezli kübik kafes yapıları, temel olarak alüminyum, bakır, nikel, altın ve bronz gibi demir bulundurmeyen metal ve alaşımlardır. Bunlara ek olarak, elmas takımla işleminin germanyum, silisyum gibi kristal malzemelerin ve polimetilmetakrilat,

polistiren, polikarbonat gibi polimerlerin talaş kaldırılmasında da uygun olduğu görüldü.

Günümüzün daha gelişmiş takım tezgahları teknolojileriyle, özellikle silisyum kristal yapıları parçalar, tek kesen ağızlı elmas takımlarla son derece verimli bir şekilde işlenebilmektedirler. Bunun yanı sıra, geliştirilen taşlama teknolojileriyle, parlatma yapmaya gerek kalmadan son derece iyi yüzey kalitesine sahip parçalar elde edilebilmektedir.

Nano ölçekte talaş kaldırmada öncü çalışmalar, tek kesen ağızlı elmas tornalama (SPDT) alanında Lawrence Livermore Ulusal Laboratuvarı (LLNL) tarafından gerçekleştirilmiştir [4]. Bunu takiben ABD, İngiltere, Uzak Doğu ve Avrupa'da elektronik, optik ve manyetik alanlarında yüksek hassasiyette talaş kaldırma uygulamaları gerçekleştirilmiştir. Şekil 2.a'da görülen Ito v.d. tasarladığı çevresel şartların kontrol edilebildiği yüksek hassasiyette torna tezgahı 'Capsule', 2-3 nm ortalama yüzey pürüzlülüğü sağlamaktadır [6]. Şekil 2.b'de görülen Cranfield Üniversitesi'nde geliştirilen yüksek hassasiyette taşlama tezgahı 'Tetraform C', işlenmiş yüzeyin altındaki deformasyonu

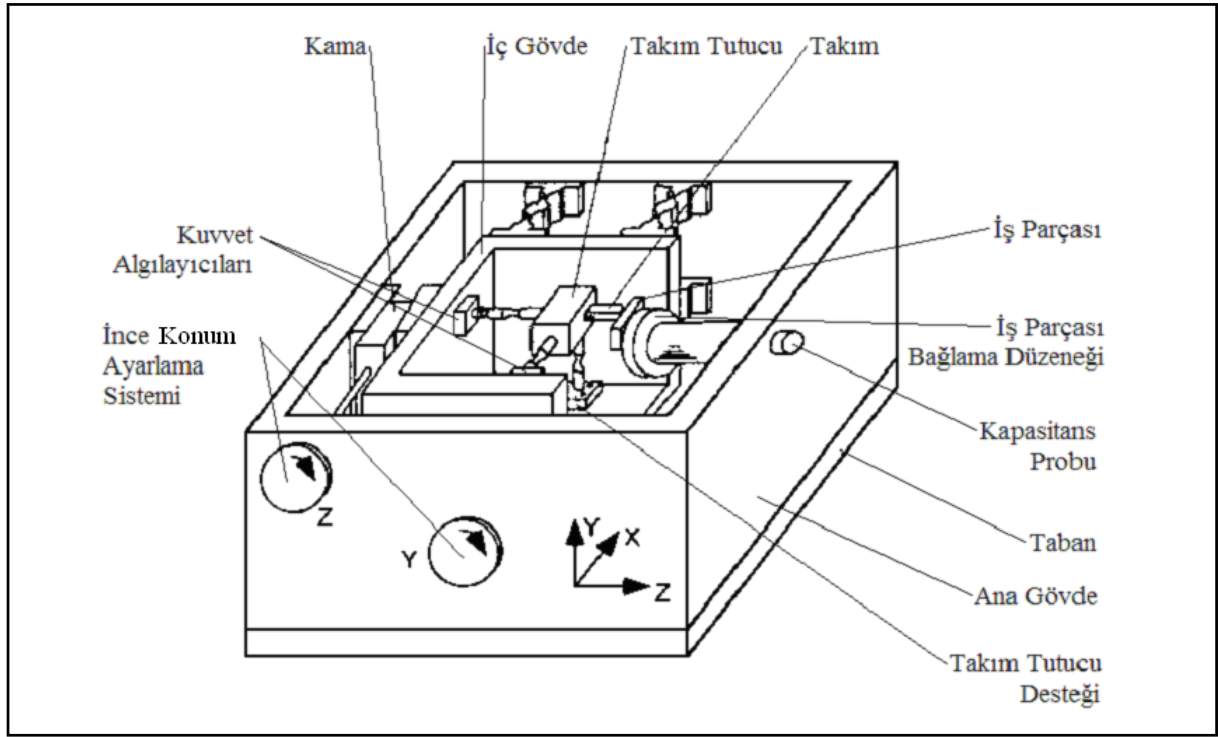
oldukça düşük seviyelerde tutarak kaliteli yüzey elde ederken parlatma/lepleme işlemlerini elimine ya da minimize etmek yoluyla hassas seramik ve optik parçaların ekonomik üretimini sağlamak için geliştirilmiştir [7].

Ikawa v.d. tasarladığı yüksek hassasiyette torna tezgahı ile, manyetik etkileşim esaslı bir tahrik sistemi kullanılarak birkaç nanometre hassasiyette yüzey pürüzlülüğü elde edilebilmekte ve tek kristal silisyum iş parçası işlenebilmektedir [10]. Wei Gao v.d. tasarladığı nano-işleme tezgahında ise dalma, gevrek malzemelerin nano ölçekte talaş kaldırma deneyleri yapılmış ve nano ölçekte işlemler için kuvvet ölçme düzenekleri uygulanmıştır [11, 12]. Şekil 3'te, Wei Gao v.d. deneylerinde kullandıkları deneysel tezgahın bir şeması görülmektedir.

Günümüzde, tek kesen ağızlı elmas takımlar ya da çok kesen ağızlı elmas taşlama taşları kullanan, bilgisayar kontrollü, yüksek hassasiyette işleme tezgahları ile iş parçasına bağlı olarak 1 nm çözünürlük ve konumlama doğruluğu sağlanabilmektedir [4].



Şekil 2 a) Ito vd. Tarafından Geliştirilen Yüksek Hassasiyette Elmas Takımlı Torna Tezgahı "Capsule". [8]
b) Cranfield Üniversitesi'nde Geliştirilen "Tetraform C" [9]



Şekil 3. Wei Gao v.d. Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İçin Tasarladıkları Deneysel Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Tezgahtı [11]

Nano Ölçekte Talaş Kaldırma Yöntemleri

Nano ölçekte talaş kaldırma, tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma, çok kesen ağızlı takımlarla nano ölçekte taşlama ve honlama, lepleme ve parlatma gibi yöntemlerle yapılır. Bu yöntemlerde işleme birkaç on nanometre kadardır, bu yüzden atom kümesi bölgesinde dalma ve çizme hareketleri, sadece noktasal hatalardan kaynaklanan kayma mekanizmasına bağlıdır.

Çok kesen ağızlı takımlarla nano ölçekte taşlama ve honlama, sert ve kırılğan malzemelerin sünek işlenmesinde elmas aşındırıcı tanelerden oluşan taşlar kullanılarak uygulanırken; tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma yumuşak ve sünek malzemelerde tek kesen ağızlı elmas takımlar ile kayma mekanizmasına dayalı olarak gerçekleştirilir. Nano ölçekte lepleme ve parlatmada, sert ve kırılğan malzemelerin işlenmesi amacıyla serbest aşındırıcılar kullanılır. [13]

Tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma birkaç on nanometrelik işlemeyi kapsar, fakat kesici takımın talaş kaldırma esnasında yenmesi gereken atomik bağ kuvveti yüksek olduğundan, kesici takımın ucuna

etkiyen kayma gerilimi çok yüksektir. Bu sebeple, tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırmada kullanılabilen takımlar, günümüzde elmasla sınırlanmıştır. Tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırma ile elde edilen iş parçası, işlenmiş yüzeyin ve yüzey altının deformasyonunun çok az olduğu pürüzsüz ve ayna gibi yüzeylere sahiptir.

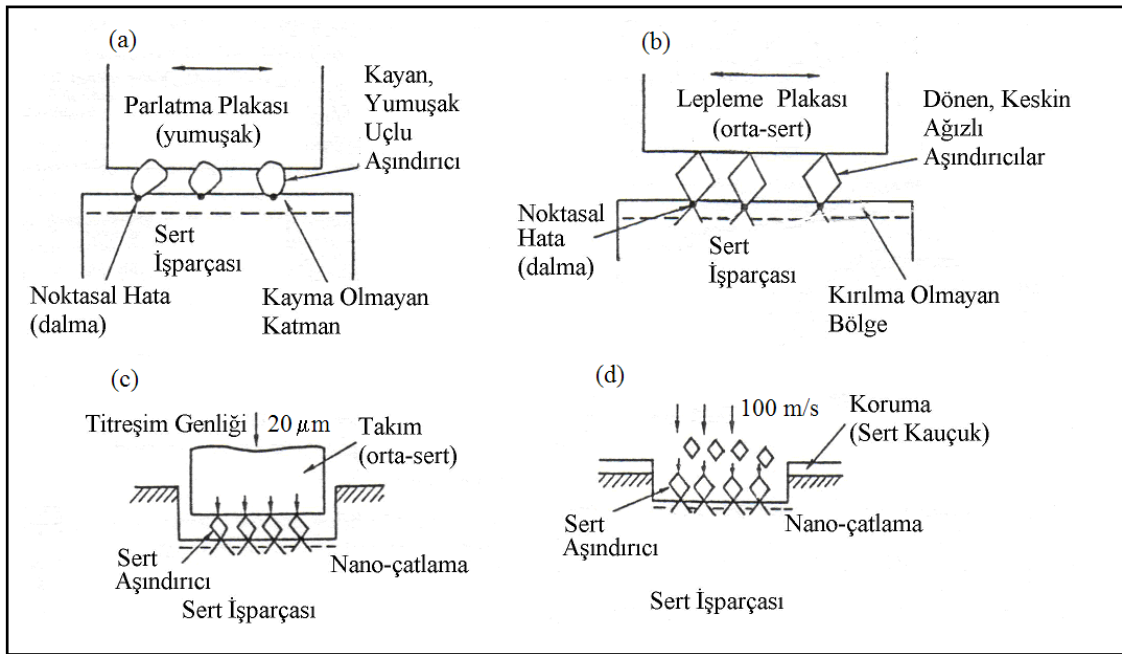
Nano ölçekte taşlama ve honlama, birkaç on nanometrelik bir kesme derinliğiyle kayma oluşturur ve çoğunlukla cam ve seramik gibi sert ve kırılğan malzemelerde çatlaksız yüzeyler elde etmek için kullanılır. Aşındırıcı tanelerin kesici ucuna etkiyen gerilmeler son derece yüksektir. Bu yüzden, nano ölçekte taşlama ve honlamada sadece bir tabana bağlı çok ince taneli elmas aşındırıcılar (bağlı-aşındırıcılar) kullanılabilir.

Bağlı-aşındırıcı işlemlerden farklı olarak, atom kümesi düzeyinde düzlem leplemesinde ve ayna parlatmada yeniden kullanılabilir ince taneli serbest aşındırıcılar kullanılır, fakat bu iki yöntemin mekanizmaları, şekil 4'te gösterildiği gibi oldukça farklıdır. Ayna parlatma, Şekil 4.a'da gösterildiği gibi, Fe_2O_3 , Cr_2O_3 , CeO_2 veya MgO

gibi yumuşak ama ısıya dayanıklı ve keskin ağızlı olmayan ince taneli aşındırıcılar kullanılarak kayma veya parlatma hareketleri ile yapılır. Bu yöntemde aşındırıcılar, iş parçasının yüzeyine bağlı olarak hareket eden yumuşak parlatma tabakasına gömülürler ve noktasal hata etkisiyle kayma mekanizması ile iş parçasının yüzeyini parlatırlar. Diğer yandan, düzlem leplemede, Şekil 4.b'de gösterildiği gibi, elmas, CBN, SiC, SiO₂ veya B4C gibi sert ve aynı zamanda kırılğan, keskin ağızlı, ince taneli aşındırıcılarla talaş kaldırma işlemini gerçekleştirmek için orta-sertlikte bir lepleme plakası kullanılır. Düzlem lepleme yönteminde, Şekil 4.c ve 4.d'de gösterildiği gibi, çok ince taneli aşındırıcılar ile ultrasonik etkiyle veya darbeli olarak gerçekleştirilen teknikler de uygulanmaktadır.

zamanı gibi maliyeti etkileyen hataların önlenmesi yönünden önemlidir. Gevrek malzemelerin sünek işlenmesi talaş kalınlığını kritik bir değerin altında tutarak, rijit bağlama düzenekleriyle bağlanmış özel takımlar kullanarak sağlanır. Elmas takımların kullanımıyla, gevrek malzemelerin işlenmesinde plastik şekil değiştirmeye uğramış talaş oluşumu görülebilir [3, 4]. Bu işlem, sünek veya kayma mekanizmalı bir işleme olarak bilinir ve 50 nm veya daha küçük yüzey altı deformasyonları ile optik ve seramik parçaların verimli şekilde imalatları için önemlidir.

Sünek rejimde işleme, deformasyon çok küçük olduğunda her malzemenin plastik deformasyona uğrayacağı ilkesine dayanır (Sreejith, 2001[14]). Gevrek malzemelerde, gevrek rejimden sünek rejime geçiş,



Şekil 4. Cam, Seramik, Gibi Gevrek Malzemelerin Düzlem Leplenmesi ve Parlatılması. (a) Ayna Parlatma, (b) Düzlem Lepleme, (c) Ultrasonik İşleme, (d) Darbeli İşleme [13]

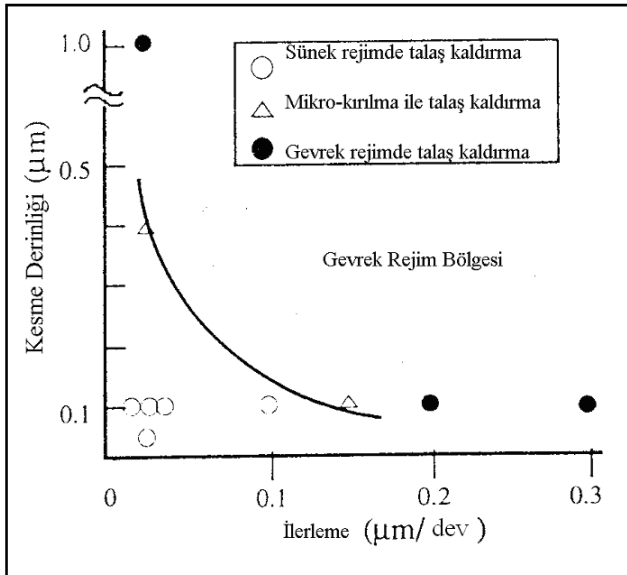
Nano Ölçekte Talaş Kaldırmada İş Parçası Malzemesi Özellikleri

Talaş kaldırma operasyonları sadece tezgaha ve takıma değil, ayrıca iş parçası malzemesine de bağlıdır. Nano ölçekte talaş kaldırma operasyonlarında, malzemenin, uygun takım ve işleme yöntemiyle işlenmesi yüzey hassasiyeti, yüzey altı deformasyonları, takım ömrü, işleme

gerilme enerjisi ve yüzey enerjisindeki enerji dengesi yoluyla açıklanabilir. Yükün uygulanmasıyla oluşan bölgesel kırılmalar gevrek malzemenin işlenmesinde önemlidir. Bu kırılmalar, etkin kesme derinliğiyle başlayacak ve ortalama bir derinlikte devam edecektir. Eğer ortalama bozulma derinliği kesme derinliğini aşmazsa, sünek rejim şartları sağlanır.

Gevrek malzemelerin sünek rejimde işlenebilirliğini etkileyen bir diğer faktör de ilerlemedir. Şekil 5'te görüldüğü gibi, ilerleme hızı arttıkça gevrek malzemenin sünek rejimde işlenmesi için gerekli kritik nüfuz derinliği azalmaktadır.

Bu tür işleme, parçaların performanslarını ve dayanımlarını farkedilir derecede artırır ve sonradan parlatma ihtiyacını ortadan kaldırır veya minimum kılar. Ayrıca, malzemedeki ve tane sınırları içindeki yabancı maddeler ve homojensizlik, yüzey bitirmede kötü bir sonuç veren, kesici takımın küçük titreşimlerine neden olurlar [3]. Bu yüzden, yüksek hassasiyette işleme için, bu karakteristikler göz önüne alınmalıdır.



Şekil 2.14. İlerleme ve Kesme Derinliğine Bağlı Kalarak Gevrek Malzemelerin Sünek – Gevrek Talaş Kaldırma Bölgeleri [14]

Nano Ölçekte Talaş Kaldırmada Kesici Takım Malzemesi Özellikleri

Yüksek hız çeliği gibi alışılmış metal malzemelerden yapılmış talaş kaldırma takımları, yüksek ısı dayanıma sahip kaplamalı takımlar ve aşındırıcı taşlama taşları, kesici ucun çabuk ve aşırı aşınması sebebiyle, nano ölçekte talaşlı işleme için uygun değildirler. Nano ölçekte ve yüksek hassasiyette talaş kaldırma sistemlerinde kesici takım, mikronaltı/nanometre bölgesinde işleme operasyonlarında, uzun işleme boylu çalışmalarda

yüksek kararlılık göstermelidir. Elmas kesici takımlar Al, Cu gibi sünek malzemelerin tornalanmasında ve Ge, cam gibi gevrek malzemelerin taşlanmasında başarıyla kullanılmaktadırlar.

Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşlemleri İçin Tezgah Özellikleri

Yüksek hassasiyet ve konum doğruluğu isteyen nano ölçekte talaş kaldırma operasyonlarında kullanılacak tezgahlar için şu özellikler aranır:

- titreşimden arınmış, rijit bir yapı
- rijit iş parçası bağlama düzeneği
- yüksek çözünürlükte hareket kontrolü
- ısı kararlılık
- geri-besleme kontrol
- tezgahla bütünleşik fakat işleme sırasında tezgahtan gelecek etkilere karşı izole edilmiş yüksek hassasiyette bir ölçme sistemi
- sıcaklık, titreşim, rutubet ve toz kontrolü sağlayan çevresel kontrol üniteleri

Nano Ölçekte Görüntüleme ve Metroloji

Nano ölçekte görüntüleme yöntemleri, yüzeylerin incelenmesi ve tanımlanması için önemli teknolojilerdir. Malzemelerin metalurjik, topografik, tribolojik özelliklerinin ve yüzey etkileşimlerinin incelenebilmesi için gerek fiziksel gerekse de kimyasal tekniklere başvurulmaktadır. Kimyasal incelemeler, çok gelişmiş spektroskopik tekniklerle yapılırken, fiziksel incelemelerin yapılmasında elektron ve sonda mikroskopisi teknikleri yaygın olarak kullanılmaktadır.

Görünür ışığın dalga boyunun yaklaşık 0,5 µm olması sebebiyle, ışık mikroskoplarının, 0,5 µm'den daha küçük yapıları görüntülemesi mümkün değildir [16]. Ancak, temel işleyiş mantığı ışık mikroskopuyla aynı olan elektron mikroskobu, görünür ışıktan daha küçük dalga boyuna

sahip elektron ışınlarıyla görüntüleme yapar. Elektron mikroskopunda, uygun potansiyeller altında hızlandırılan elektron demeti, incelenecek örnek malzemenin ya içinden geçirilir ya da yüzeyinden yansıtılır. Elektron demetinin, örnek malzemenin içinden geçerek gözlemlenmesine olanak tanıyan mikroskoplar, geçirmeli elektron mikroskopu-TEM (Transmission Electron Microscope), örnek malzeme yüzeyinden yansıtma yaparak görüntü elde eden mikroskoplar ise taramalı elektron mikroskopu-SEM (Scanning Electron Microscope) olarak adlandırılırlar. TEM ile cisimlerin içyapılarını görüntülemek mümkündür [17]. SEM ile inceleme yapabilmek için incelenecek cismin iletken olması ya da özel tekniklerle iletkenlik kazandırılması gereklidir. Gelişen teknolojiyle birlikte görece yeni bir tür diyebileceğimiz taramalı sondaj yapma tekniğine dayanan taramalı sonda mikroskopu teknikleri SPM (Scanning Probe Microscope) de yaygın olarak kullanılmaktadır.

SPM ile görüntüleme tekniği, çok ince uçlu ve keskin

bir sondanın, incelenecek örnek yüzeyinde düzenli aralıklarla hareket ettirilerek taranmasıyla elde edilen verilerin değerlendirilmesi ilkesine dayanır. Sonda, yüzey üzerinde hareket ederken, yüzey üzerinde bulunan topolojiyi algılar. SPM'ler, numune yüzeyi algılamada kullanılan yöntemlere göre farklı tasarlanırlar ve farklı adlar alırlar. Bunların en yaygın kullanılanları taramalı tünelleme mikroskopu, STM (Scanning Tunneling Microscope), ve atomik kuvvet mikroskopudur, AFM (Atomic Force Microscope). STM yüzeye çok yakın bir uzaklıkta ve yüzey üzerine tungsten sondayla dokunmadan tarama yaparken, AFM hem dokunarak hem de dokunmadan yüzey taraması yapar [18]. STM'lerde sadece iletken ya da iletken hale getirilmiş malzeme örnekleri incelenebilirken, AFM'ler yalıtkan malzemelerin incelenmesine de olanak tanırlar. Tablo 1'de takım tezgahları ve takım konumlama ekipmanları ile birlikte ölçüm cihazları ve konumlama doğrulukları görülmektedir.

Tablo 1. Takım Tezgahları ve Takım Konumlama Ekipmanları ile Ölçüm Cihazlarının ve Veri İşleme Ekipmanlarının Çözünürlüğü ya da Konumlama Doğruluğu [3]

Ölçüm Çözünürlüğü ya da Konumlama Doğruluğu	Takım Tezgahları ve Takım Pozisyonlama Ekipmanları	Ölçüm Cihazları ve Veri İşleme Ekipmanları
10 µm	Geleneksel Torna ve Freze Tezgahları	Kumpas
	Hassas Torna, Taşlama Tezgahı, Lepleme ve Honlama Tezgahı	Mekanik Komparatör, Mikrometre, Kadranlı Gösterge
1 µm	Aparat Delik İşleme Tezgahı, Aparat, Taşlama Tezgahı, Superfiniş Tezgahı	Elektrikli ya da Pnömatik Mikrometre, Optik Komparatör
0,1 µm	Hassas Taşlama Tezgahı, Hassas Lepleme Tezgahı, Optik Mercek Taşlama Tezgahı, Elmas Takımlı Hassas Torna Tezgahı	Optik ya da Manyetik Skalalar, Elektrikli Komparatör, Elektronik Komparatör (temassız), X Işını Mikroskobu
0,01 µm	Optik Mercek Finiş Taşlama, Alıştırma Tezgahı, Elmas Taşlı Hassas Taşlama Tezgahı	Laserli Ölçme Araçları, Optik Fiber Sistemleri, (Talyurf, Talyrond)
0,001 µm 1 nm	Süper Yüksek Hassasiyette Taşlama, Lepleme ve Parlatma Tezgahı, Tek Kesen Ağzılı Elmas Takım İle Tornalama (SPDT)	Yüksek Hassasiyette Laserle Ölçme Enstrümanları (Doppler ve Hiposs), Çoklu Yansıtımlı Laser Araçları, Heterodin Pürüzlülük Ölçme Araçları (Zygo, Wypo)
	Nano-servo Pozisyonlama Sistemi, Atom ya da Molekuler ve İyon Işını İşleme Aparatı	SEM, TEM, X Işını Mikroskobu (2 nm), STM, AFM, Auger Analyser, X Işını Mikroanalizör

MOLEKÜLER DİNAMİK İLE NANO ÖLÇEKTE TALAŞ KALDIRMANIN MODELLENMESİ

Metal malzemelerin nano ölçekte şekillendirilmelerindeki mekanizmalar, makro ölçekte gösterdikleri sürekli yapılardan ihmal edilemez derecede sapmalar gösterirler. Nano ölçekte talaş kaldırma analizlerinde, malzemelerin plastik akış ve kırılmalarının atomik boyutta oluşması nedeniyle sürekli ortamlar mekaniği ilkeleri kullanılamamaktadır [19]. Moleküler dinamik (MD) teknikleri, yüksek hassasiyette, elmas kesici takımlarla donatılmış yüksek maliyette tezgahlar kullanmadan, nano ölçekte talaş kaldırmanın modellenmesini, simüle edilmesini sağlar. Çalışma bölgesinin bilgisayar kapasitesine bağlı olarak sınırlı olduğu modelleme çalışmalarında, takım-iş parçası etkileşimleri gözlenebilmekte, yüksek çözünürlükte analiz yapılabilen, uç yarıçapı, talaş açısı gibi takım geometrisi ve kesme derinliği gibi işleme etki eden değişkenler kolaylıkla ve etkin olarak değiştirilebilmekte, malzemenin kristal yapısının işleme esnasındaki etkileri gözlenebilmektedir.

Moleküler dinamik, temel olarak Newton fiziğine ve istatistiksel mekaniğin atomik uygulamalarına dayanır. Dengedeki ya da denge dışı Hamiltonian sistemlerle ifade edilebilen nano ölçekte talaş kaldırmada moleküler dinamik uygulamaları, 1990'ların başında LLNL'de Belak v.d. çalışmaları ile başlamıştır [20, 21]. Moleküler dinamik modellemelerde, atomlar birbirleriyle etkileşim halinde ve belli bir termodinamik dengededir. N adet atomun V sabit hacimdeki izole sistemlerde, dengesi söz konusudur [22].

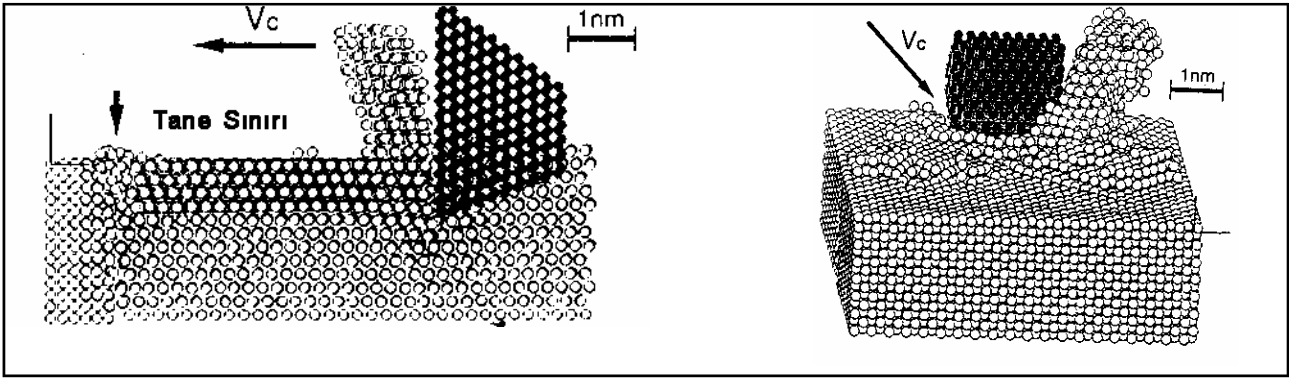
$$H = \sum E_k + \sum U \quad (1)$$

Burada, atomların pozisyonları, potansiyel enerjilerini (U), hızları ise kinetik enerjilerini (E_k) belirlemektedir. H, Hamiltonian sistemi simgeler. Atomlararası etkileşimlerin, yani potansiyellerin, atomların pozisyonlarının fonksiyonu olarak veren deneye dayalı denklemlerle belirlenmesi mümkündür. Atomlararası potansiyelleri bilmekle, birbirinden bağımsız olan atomlara etkiyen kuvvetler belirlenebilmekte, böylece zaman içindeki hareketler de belirlenebilmektedir.

1990'ların başında LLNL'de Belak v.d. önerdiği moleküler dinamik modellemede ortogonal nanometrik talaş kaldırma simüle edilmiştir. Bu çalışmayı, Osaka Üniversitesi'nden Shimada v.d. kesme derinliği, kesme derinliği/uç yarıçapı oranı, minimum kesme derinliği, yüzey pürüzlülüğü, kesmede deformasyon bölgesi, gerinim enerjisi ve kristal yapısı konularında modellemeleri [23 - 26] ve Inamura v.d. atomların minimum enerji pozisyonlarını değiştirerek quasi-statik şartlarda moleküler dinamik simülasyonları ile kesme kuvvetleri, kesme yönüne bağlı kristal oryantasyonu, enerji analizi, gerilim/gerinim analizi konularında modellemeleri [27 - 29] takip etmiştir. Itoh ve Maekawa'nın yaptığı çalışmada, alan sınırlı bir moleküler dinamik model kullanılarak takım aşınması incelenmiştir [19].

Rentsch ve Inasaki'nin yaptıkları çalışmalarda [16, 30, 31], abrazyon prosesleri için MD uygulamaları yapılmış, abrazyon işlemede malzeme yığılması üzerinde durulmuş, sünek işlemede yüzey oluşumu ve dislokasyon oluşumu, yığılma ve dislokasyon oluşumu, gevrek malzemelerde dalma, 2 boyutta monokristalin metallerde talaş kaldırma ve polikristalin metallerde talaş kaldırma konularında uygulamalar yapılmıştır. Şekil 5'te Rentsch ve Inasaki'nin tane sınırlarının nano ölçekte talaş kaldırma işlemine etkilerini inceledikleri moleküler dinamik simülasyonu görülmektedir.

Komanduri v.d. [32 - 37], takım geometrisinin ve talaş kaldırma parametrelerinin tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırmaya etkisi, iş parçası kristal yapısının ve kesme yönünün tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırmaya etkisi, atomik boyutta sürtünme, dalma, çizme ve takım çıkış etkileri konularında MD simülasyonları oluşturarak çalışmalar yapmışlardır. Ayrıca, Komanduri v.d., Toensoff potansiyeli kullanarak geliştirdikleri modelde, silisyum malzemenin nano ölçekte talaş kaldırılmasını incelemişlerdir [38]. Han v.d. yaptığı modellemede [39], takım geometrisinin tek kesen ağızlı takımla nano ölçekte talaş kaldırmaya etkileri gözlenmiştir. Shimizu v.d., alüminyum malzemenin deformasyonu ve talaş oluşum prosesi ile taşlama kuvveti ve takım-iş parçası temas boyu konularında modellemeler yapmışlardır [40]. Lin v.d. yaptığı çalışmada, nano ölçekte taşlama modellenmiş, aşındırıcı tanenin etki bölgesinin



Şekil 5. Retsch ve Inasaki'nin Nano Ölçekte Talaş Kaldırma İşleminde Tane Sınırlarının Etkilerini İnceledikleri Moleküler Dinamik Modeli a) 2 Boyutlu Simülasyon Görüntüsü, b) 3 Boyutlu Simülasyon Görüntüsü [14]

yakınlarındaki mikroskopik bölgedeki talaş kaldırma ve yüzey oluşumu incelenmiştir [41]. Cheng v.d. tarafından geliştirilen teknikle, talaş kaldırmada oluşan ısısının etkileri simülasyona dahil edilerek nano ölçekte talaş kaldırmada takım aşınması incelenmiştir [42].

Moleküler dinamik, bilgisayar kapasitesine bağlı olarak çalışma bölgesinin sınırlı olması, kesme hızlarının çok yüksek olması (200-500 m/s) durumunda ve atom-atom etkileşimlerinin sapmalar gösterdiği çalışma bölgesinin fazla büyük seçilmesi durumunda dezavantajlara sahiptir. Fakat moleküler dinamik, sonlu elemanlar yöntemlerinden farklı olarak, takım-iş parçası etkileşimlerinin incelenebilmesi, yüksek çözünürlükte analiz yapılabilmesi, takım geometrisi ve kesme derinliği gibi işleme etki eden değişkenlerin kolaylıkla ve etkin olarak değiştirilebilmesi ve metal malzemenin kristal yapısının işleme esnasındaki etkilerinin gözlenebilmesi gibi önemli avantajlara sahiptir.

SONUÇ

Günümüzde, nano ölçekte talaş kaldırma işlemlerinde, uygulama açısından sadece elmas takımlara bağlı kalmaktadır. Nanoteknolojinin gelişmesiyle, yeni, ısı dayanımları ve sertlikleri nano ölçekte talaş kaldırma şartlarında kararlı olan takımların geliştirilmesi devam etmekte ve nanometrik konum doğruluğu ve tekrarlanabilirlik sağlayan tezgahların gelişmesiyle beraber, nano ölçekte talaş kaldırma teknikleri de gelişmektedir. Moleküler dinamik modelleme ile bilgisayar ortamında nano boyutta mekanizmaların ve etkilerin anlaşılmasına

yönelik çalışmalar yoğunlukla devam etmektedir. Nano boyutta mekanizmaların ve etkilerin tam olarak anlaşılmasıyla nano ölçekte talaş kaldırma işlemlerinde yüksek verimlilik ve faydalar sağlanacak ve dolayısıyla uygulama alanları da genişleyecektir.

KAYNAKÇA

1. **R. P. Feynman**, "There's Plenty of Room at the Bottom - An Innovation to Enter a New Field of Physics" Ann. Meeting of the APS, California Institute of Technology, December 1959
2. **N. Taniguchi, et. al.**, "On the Basic Concept of Nanotechnology" Proceedings of ICPE, Tokyo, 1974
3. **N. Taniguchi, et al.**, "Nanotechnology: Integrated Processing Systems for Ultra-Precision and Ultra-Fine Products", Oxford University Press, 1996
4. **J. Corbett, P.A. McKeown, G.N. Peggs, R. Whatmore**, "Nanotechnology: International Developments and Emerging Products", Annals of CIRP vol. 49/2/2000, Keynote Papers sf. 523
5. **E. Drexler**, "Unbounding the Future: the Nanotechnology Revolution", Willam Morrow and Company, Inc. New York 1991
6. **H. Shinno, H. Hashizume, Y. Ito**, "Structural Configuration and Performances of Machining Environment-Controlled Ultraprecision Diamond Turning Machine 'Capsule' ", Annals of CIRP 41/1/1992, sf. 425
7. **J. Corbett, et. al.**, "An Ultra Precision Machine Tool Demonstrating a Novel Vibration, Resistant, Structure", Precision Engineering - Nanotechnology, Proceedings fo the 1st International Euspem Conference, Shaker Verlag, Aachen, 1999, sf. 159
8. http://www.upm.pi.titech.ac.jp/capsule_eng.html
9. http://www.cranfield.ac.uk/sims/mem/dave_s/tetraform.html
10. **H. Eda, E. Ohmura, M. Sahashi, T. Kobayashi, N. Ikawa**, "Ultraprecise Machine Tool Equipped with a Giant Magnetostriction Actuator - Development of New Materials, TbxDy1-

- x(FeyMn1-y)n, and Their Application", *Annals of CIRP* 41/1/1992, sf. 421
11. **W. Gao, R. J. Hocken, J. A. Patten, J. Lovingood**, "Experiments Using a Nano-Machining Instrument for Nano-Cutting Brittle Materials", *Annals of CIRP* 49/1/2000, sf. 439
 12. **Wei Gao, R. J. Hocken, J. A. Patten, J. Lovingood, D. A. Lucca**, "Construction and Testing of a Nanomachining Instrument", *Precision Engineering, Journal of the International Societies for Precision Engineering and Nanotechnology*, 24 (2000), 320-328
 13. **N. Taniguchi**, "Nano-machining or processing systems with nanometre accuracies and sub- nanometre scattering widths or processing resolutions", *Nanotechnology, Integrated Processing Systems for Ultra-Precision and Ultra-Fine Products*, ed. N. Taniguchi, Oxford University Press, 1996, sf.15
 14. **P.S. Sreejith, B.K.A. Ngoi**, "Material Removal Mechanisms In Precision Machining Of New Materials", *IJMT&M* 41, 2001
 15. **T. Sata, Y. Takeuchi**, "Ultraprecision 3D Machining of Glass", *Annals of the CIRP* Vol. 45/1/1996
 16. **R. Rentsch, I. Inasaki, E. Brinksmeier, W. Preuss, O. Riemer**, "Influence of Material Characteristics on the Micromachining Process", *Materials Issues in Machining III and the Physics of Machining III*, 1996, sf. 65
 17. **S. Takashima**, "Electron beam measuring systems: SEM and TEM", *Nanotechnology, Integrated Processing Systems for Ultra-Precision and Ultra-Fine Products*, ed. N. Taniguchi, Oxford University Press, 1996, sf. 79
 18. **T.V. Vorburger, J.A. Dagata, G. Wilkening, K. Iizuka, E.G. Thwaite, P. Lonardo**, "Industrial Uses of STM and AFM", *Annals of CIRP* 46/2/1997, sf. 597
 19. **K. Maekawa, A. Itoh**, "Friction and Tool Wear in Nano-scale Machining - a Molecular Dynamics Approach", *Wear* 188 (1995) 115
 20. **J. Belak, L. F. Stowers**, "A Molecular Dynamics Model of the Orthogonal Cutting Process", *Proceedings of ASPE Annual Conf., Rochester NY*, 1990, sf. 76
 21. **W. G. Hoover, A. J. De Groot, C. G. Hoover, L. F. Stowers, T. Kawai, B. L. Holian, T. Boku, S. Ihara, J. Belak**, "Large Scale Elastic-Plastic Indentation Simulation via Non-equilibrium Molecular Dynamics", *Phys. Rev. A*. 42 (10) (1990), sf. 5844
 22. **J. M. Haile**, "Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods", John Wiley & Sons Inc., 1992
 23. **N. Ikawa, S. Shimada, H. Tanaka, G. Ohmori**, "An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning", *Annals of CIRP* 40/1/1991, sf. 551
 24. **S. Shimada, N. Ikawa, G. Ohmori, H. Tanaka**, "Molecular dynamic analysis as compared with experimental results of micromachining", *Annals of CIRP* 41/1/1992, sf. 117
 25. **S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, J. Uchikoshi, H. Yoshinaga**, "Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation", *Annals of CIRP* 42/1/1993, sf. 91
 26. **S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, J. Uchikoshi**, "Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis", *Annals of CIRP* 43/1/1994, sf. 51
 27. **T. Inamura, N. Takezawa, N. Taniguchi**, "Atomic scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond" *Annals of CIRP* 41/1/1992, sf. 121
 28. **T. Inamura, N. Takezawa, Y. Kumaki**, "Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting", *Annals of CIRP* 42/1/1993, sf. 79
 29. **T. Inamura, N. Takezawa, Y. Kumaki, T. Sata**, "On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting", *Annals of CIRP* 43/1/1994, sf. 47
 30. **R. Rentsch, I. Inasaki**, "Molecular dynamics simulation for abrasive processes", *Annals of CIRP* 43/1/1994, sf. 327
 31. **R. Rentsch, I. Inasaki**, "Investigation of surface integrity by molecular dynamics simulation", *Annals of CIRP* 44/1/1995, sf. 295
 32. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff**, "Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach", *Wear* 219 (1998) sf. 84
 33. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff**, "Orientation effects in nanometric cutting of single crystal materials: an MD simulation approach", *Annals of CIRP* 48/1/1999, sf. 67
 34. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff**, "MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum - effect of crystal orientation and direction of cutting", *Wear* 242 (2000), sf. 60
 35. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff**, "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", *Mat. Sci. and Eng. A311* (2001), sf. 1
 36. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff**, "MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum", *Wear* 240 (2000), sf. 113
 37. **R. Komanduri, N. Chandrasekaran**, "MD simulation of atomic scale friction", *Phys. Rev. B* Vol. 61 (2000), sf. 14007
 38. **Komanduri R., Chandrasekaran N., Raff L.M.**, "Molecular Dynamics Simulation of the Nanometric Cutting of Silicon", *Phys. Rev. B* vol. 81, no. 12, 2001
 39. **X. S. Han, B. Lin, S. Y. Yu, S. X. Wang**, "Investigation of tool geometry in nanometric cutting by molecular dynamics simulation", *Journal of Mat. Proc. Tech.* 129 (2002) sf. 105
 40. **J. Shimizu, L.B. Zhou, H. Eda**, "Simulation and experimental analysis of super high-speed grinding of ductile material", *Journal of Mat. Proc. Tech.* 129 (2002), sf. 19
 41. **B. Lin, S. Y. Yu, S. X. Wang**, "An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding", *Journal of Materials Processing Technology* 138 (2003) 484-488
 42. **K. Cheng, X. Luo, R. Ward, R. Holt**, "Modeling and simulation of the tool wear in nanometric cutting", *Wear* 255 (2003), 1427-1432