T.C.
İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ-CERRAHPAŞA
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BİYOMEDİKAL UYGULAMALAR İÇİN ŞEKİL BELLEKLİ ALAŞIMLARIN ÜRETİLMESİ VE KARAKTERİZASYONU

Yağmur ESEN

DANIŞMAN
Prof. Dr. İlven MUTLU

Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı

Metalürji ve Malzeme Mühendisliği, Tezli Yüksek Lisans Programı

Nisan, 2025

TEZ KABUL VE ONAYI

Yağmur ESEN tarafından, **Prof. Dr. İlven MUTLU** danışmanlığında hazırlanan **" BİYOMEDİKAL UYGULAMALAR İÇİN ŞEKİL BELLEKLİ ALAŞIMLARIN ÜRETİLMESİ VE KARAKTERİZASYONU "** başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından **25/04/2025** tarihinde yapılan sınav sonucunda **oy birliği** ile başarılı bulunarak **Yüksek Lisans Tezi** olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

3

BEYAN

Bu tez çalışmasının kendi çalışmam olduğunu, tezin planlanmasından yazımına kadar bütün aşamalarda etik dışı davranışımın olmadığını, bu tezdeki bütün bilgileri akademik ve bilimsel etik kuralları içinde elde ettiğimi, bu tez çalışmasıyla elde edilmeyen bütün bilgi ve yorumlara kaynak gösterdiğimi ve bu kaynakları da kaynaklar listesine aldığımı, yine bu tezin çalışılması ve yazımı sırasında patent ve telif haklarını ihlal edici bir davranışımın olmadığını ve her türlü hukuki sorumluluğu aldığımı kabul ederim.

Yağmur ESEN

(İmza)

Aileme ithaf ediyorum…

BÜTÇE DESTEKLERİ

BİYOMEDİKAL UYGULAMALAR İÇİN ŞEKİL BELLEKLİ ALAŞIMLARIN ÜRETİLMESİ VE KARAKTERİZASYONU

Bu tez çalışması için herhangi bir kurumdan bütçe desteği alınmamıştır.

TEŞEKKÜR

Hayatım boyunca akademik kariyer hedeflerime olan çabalarımda beni sürekli motive eden, maddi ve manevi desteklerini eksik etmeyen ve her zaman sabırla yanımda olan aileme teşekkürü bir borç bilirim.

Nisan 2025 **Yağmur ESEN**

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

TEZ KABUL VE ONAYI ..... **ii**
BEYAN ..... **iii**
BÜTÇE DESTEKLERİ ..... **v**
TEŞEKKÜR ..... **vi**
İÇİNDEKİLER ..... **vii**
ŞEKİL LİSTESİ ..... **ix**
TABLO LİSTESİ ..... **xi**
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ ..... **xii**
ÖZET ..... **xiii**
ABSTRACT ..... **xv**
1. GİRİŞ **1**
2. KAVRAMSAL ÇERÇEVE **2**
2.1. BİYOMALZEMELER 2
2.2. AKILLI MALZEMELER 5
2.3. ŞEKİL BELLEKLİ ALAŞIMLAR ..... **Hata! Yer işareti tanımlanmamış.**
2.4. HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ 9
2.5 LİTERATÜR TARAMASI 15
3. YÖNTEM **19**
3.1. TOZ METALURJİSİ İLE NUMUNE ÜRETİMİ ... **Hata! Yer işareti tanımlanmamış.**
3.2. HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ 27
3.3. KARAKTERİZASYON 28
4. BULGULAR **32**
4.1. MİKROYAPI 32
4.2. MEKANİK ÖZELLİKLER 36
4.3. İYON SALIM SONUÇLARI 41
4.4. ELEKTROKİMYASAL KOROZYON SONUÇLARI 42
4.5. ŞEKİL BELLEK SONUÇLARI 43
4.6. HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ SONUÇLARI 45
5. TARTIŞMA **59**

6. SONUÇ VE ÖNERİLER 63
KAYNAKLAR 65
İNTİHAL RAPORU İLK SAYFASI 68
ETİK KURUL İZİN YAZISI 69
KURUM İZNİ YAZILARI 70
ÖZGEÇMİŞ 71

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 2.1. İltihaplanma ve biyolojik tamirin zamana bağlı gelişimi……..……..7
Şekil 2.2. Elementlerin vücuttaki davranışlarına göre gruplandırılması……8
Şekil 2.3. Akıllı malzemelerin uyarı türüne göre sınıflandırılması……..……10
Şekil 2.4. Geleneksel şekil bellek mekanizması…….…..……11
Şekil 2.5. Şekil bellek alaşımlarda sıcaklık-yük grafiği…….……..……12
Şekil 2.6. Şekil bellekli malzemelerde dönüşüm prosesi……..……..….14
Şekil 2.7. Hesaplamalı malzeme biliminde zaman-ölçek skalası……..……...…17
Şekil 2.8. Moleküler dinamik model…….……...……17
Şekil 2.9. İlk prensipler modeli…….……..……..……17
Şekil 2.10. Yoğunluk fonksiyonel teorisi…….…..……..……..18
Şekil 3.1: a) Mekanik alaşımlama cihazı, b) pres, c) sinterleme fırını……....……19
Şekil 3.2: Sinterlenmiş numunelerin fotoğrafları……..……..…….20
Şekil 3.3: Bilyeli değirmen……..…….21
Şekil 3.4: Pres cihazı……..…….……..22
Şekil 3.5: Sinterleme fırını……..……..……23
Şekil 3.6: Şekil bellek eğitimi……..…….……24
Şekil 3.7: Geometrik olarak şekil bellek (% toparlanma) ölçümü……..….27
Şekil 3.8: a) Sertlik cihazı, b) basma cihazı, c) aşınma cihazı…….…28
Şekil 3.9: Ultrasonik test cihazı…….…..……28
Şekil 3.10: Girdap akımları cihazı……..……..……..…….29
Şekil 3.11: Diferansiyel Taramalı Kalorimetre Cihazı……..…….30
Şekil 3.12 Elektrokimyasal korozyon testi çalışma prensibi ve korozyon hücresi…..……..…31
Şekil 4.1: Ni-Ti alaşımı hammaddelerinin SEM fotoğrafları ……32
Şekil 4.2: Alaşım elementlerinin SEM fotoğrafları ……..…...33
Şekil 4.3: NiTi Alaşımının SEM fotoğrafları……...…34
Şekil 4.4: Ni-Ti alaşımlarının optik mikroskop fotoğrafları……35

Şekil 4.5: Ni-Ti alaşımlarının sertlik değerleri……..…36
Şekil 4.6: Ni-Ti alaşımlarının iletkenlik değerleri…….……37
Şekil 4.7: Ni-Ti alaşımlarının yoğunluk değerleri…….38
Şekil 4.8: Ni-Ti alaşımlarının aşınma değerleri……...….39
Şekil 4.9: Ni-Ti alaşımlarının elastisite modülü değerleri……....40
Şekil 4.10: Ni-Ti alaşımlarının Ni iyon salım değerleri……..…..41
Şekil 4.11: Ni-Ti alaşımlarının korozyon hızı değerleri…….…42
Şekil 4.12: Ni-Ti alaşımlarının toparlanma değerleri……..…..43
Şekil 4.13: Ni-Ti alaşımlarının dönüşüm sıcaklığı değerleri…….44
Şekil 4.14: Ni-Ti ikili faz diyagramı ve serbest enerji diyagramı…….45
Şekil 4.15: Pourbaix (V-pH) diyagramı ……..….46
Şekil 4.16. NiTi a) Birim kafes ve b) süperlatis ……..……48
Şekil 4.17. Alaşımların hesaplanan teorik elastiklik modülleri …….49
Şekil 4.18. Alaşımların hesaplanan teorik mekanik özellikleri …….54
Şekil 4.19: TiNi sisteminde B2, B19 ve B19’ yapıları……..…...57

TABLO LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 4.1: Ni-Ti esaslı alaşımların kafes parametreleri……..49
Tablo 4.2: Ni-Ti esaslı alaşımların elastik parametreleri……..…..51
Tablo 4.3: Ni-Ti esaslı alaşımlar8n enerji seviyeleri…….…..56
Tablo 4.4: Ni-Ti esaslı alaşımlarının faz dönüşüm sıcaklıkları……59
Tablo 5.1: Alaşım elementlerinin özelliklere etkileri……..62
Tablo 5.2: Alaşımların deneysel ve hesaplamalı elastisite modülleri……...63
Tablo 5.3: Alaşımların deneysel ve hesaplamalı dönüşüm sıcaklıkları……...64

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
C	**:** Celsius
º	**:** Derece

Kısaltmalar	Açıklama
B	**:** Bulk modülü
CALPHAD	**:** Hesaplamalı faz diyagramları
CASTEP	**:** Cambridge sıralı toplam enerji paketi
DFT	**:** Yoğunluk fonksiyonel teorisi
Co	**:** Kobalt
Cu	**:** Bakır
G	**:** Kayma modülü
GPa	**:** Giga Pascal
IACS	**:** Uluslararası tavlanmış bakır standardı
Fe	**:** Demir
Mn	**:** Manganez
Ta	**:** Tantalyum
rpm	**:** Dakikadaki devir sayısı
SBF	**:** Yapay vücut sıvısı
Sn	**:** Kalay

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BİYOMEDİKAL UYGULAMALAR İÇİN ŞEKİL BELLEKLİ ALAŞIMLARIN ÜRETİLMESİ VE KARAKTERİZASYONU

YAĞMUR ESEN

İstanbul Üniversitesi-Cerrahpaşa

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı

Metalürji ve Malzeme Mühendisliği, Tezli Yüksek Lisans Programı

Danışman : Prof. Dr. İlven MUTLU Bir öğe seçin.

Bu tez kapsamında, biyomedikal uygulamalar için şekil bellekli alaşımların üretimi ve karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir. Öncelikle, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımlar geleneksel toz metalurjisi (peresleme-sinterleme) yöntemi ile üretilmiştir. Ayrıca hesaplamalı malzeme bilimi esaslı çalışmalar çeşitli yazılımlar ve teoriler kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Teorik çalışmalarda ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel teorisi kullanılmış, alaşımların elastiklik özellikleri, mekanik özellikleri ve faz dönüşüm sıcaklığı hesaplanmıştır. Genel olarak şekil bellekli alaşımlar, belirli bir deformasyona uğratıldıktan sonra, uygulanan sıcaklık veya gerilmelere (kuvvet) bağlı olarak önceki şeklini hatırlayan ve ilk şekline geri dönebilen malzemelerdir. Tez kapsamında, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımların koroner stent uygulamaları için geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Karakterizasyon kapsamında, toz metalurjisi yöntemi ile üretilen şekil bellekli alaşımların mikroyapısı ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Şekil bellekli alaşımların sertlik, mukavemet, aşınma, elastisite modülü gibi temel mekanik özellikleri belirlenmiştir. Şekil bellekli alaşımların elektrokimyasal korozyon testleri yapay vücut sıvısı içerisinde gerçekleştirilmiştir. Son olarak ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel

teorisi ile belirlenen mekanik özellikler ve faz dönüşüm sıcaklıkları deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır

Nisan 2025 , 87. sayfa.

Anahtar kelimeler: NiTi alaşımı, Korozyon, İlk prensipler, Şekil bellek, Toz metalurjisi

ABSTRACT

M.Sc. THESIS

PRODUCTION AND CHARACTERIZATION OF SHAPE MEMORY ALLOYS FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

YAĞMUR ESEN

İstanbul University-Cerrahpaşa

Institute of Graduate Studies

Department of Metallurgy and Materials Engineering

Metalurgical and Materials Engineering

Supervisor : Prof. Dr. İlven MUTLU

In this thesis, production and characterization of shame memory alloys was carried out for biomedical implant applications. Inıtially, metalic shape memory Ni-Ti (nitinol) based alloys, were produced by traditional powder metallurgy (press-sinter) method. In additon, computational materials science based studies were carried out by using several softwares and theories. First principles based density functional theory was used for calculations. Elastic properties, mechanical properties, phase transformation temperatures of the alloys were determined by software. In general, shape memory alloys are materials which after application of a specific plastic deformation can remember and transform to their first shape (geometry) by using temperature or stress (force). In this thesis, shape memory Ni-Ti (nitinol) based alloys were produced for coronary stent applications. In the characterization section, microstructure and mechanical properties of the powder metallurgy shape memory alloys were investigated. Fundamental mechanical properties such as hardness, wear, strength, elastic modulus of the shape meory alloys were determined. Electrochemical corrosion tests of the shape memory

alloys were carried out in simulated body fluid solution. Lastly, mechanical properties and phase transformation temperatures of the alloys were compared with experimental vaşues..

April 2025, 87 pages.

Keywords: NiTi alloy, Corrosion, First principles, Shape memory, Powder metallurgy

1. GİRİŞ

Bu tez kapsamında, biyomedikal uygulamalar için şekil bellekli alaşımların üretimi ve karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir. Öncelikle, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımlar geleneksel toz metalurjisi (peresleme-sinterleme) yöntemi ile üretilmiştir. Ayrıca hesaplamalı malzeme bilimi esaslı çalışmalar çeşitli yazılımlar ve teoriler kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Teorik çalışmalarda ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel teorisi kullanılmış, alaşımların elastiklik özellikleri, mekanik özellikleri ve faz dönüşüm sıcaklığı hesaplanmıştır. Genel olarak şekil bellekli alaşımlar, belirli bir deformasyona uğratıldıktan sonra, uygulanan sıcaklık veya gerilmelere (kuvvet) bağlı olarak önceki şeklini hatırlayan ve ilk şekline geri dönebilen malzemelerdir. Tez kapsamında, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımların koroner stent uygulamaları için geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Karakterizasyon kapsamında, toz metalurjisi yöntemi ile üretilen şekil bellekli alaşımların mikroyapısı ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Şekil bellekli alaşımların sertlik, mukavemet, aşınma, elastisite modülü gibi temel mekanik özellikleri belirlenmiştir. Şekil bellekli alaşımların elektrokimyasal korozyon testleri yapay vücut sıvısı içerisinde gerçekleştirilmiştir. Son olarak ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel teorisi ile belirlenen mekanik özellikler ve faz dönüşüm sıcaklıkları deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır .

2. KAVRAMSAL ÇERÇEVE

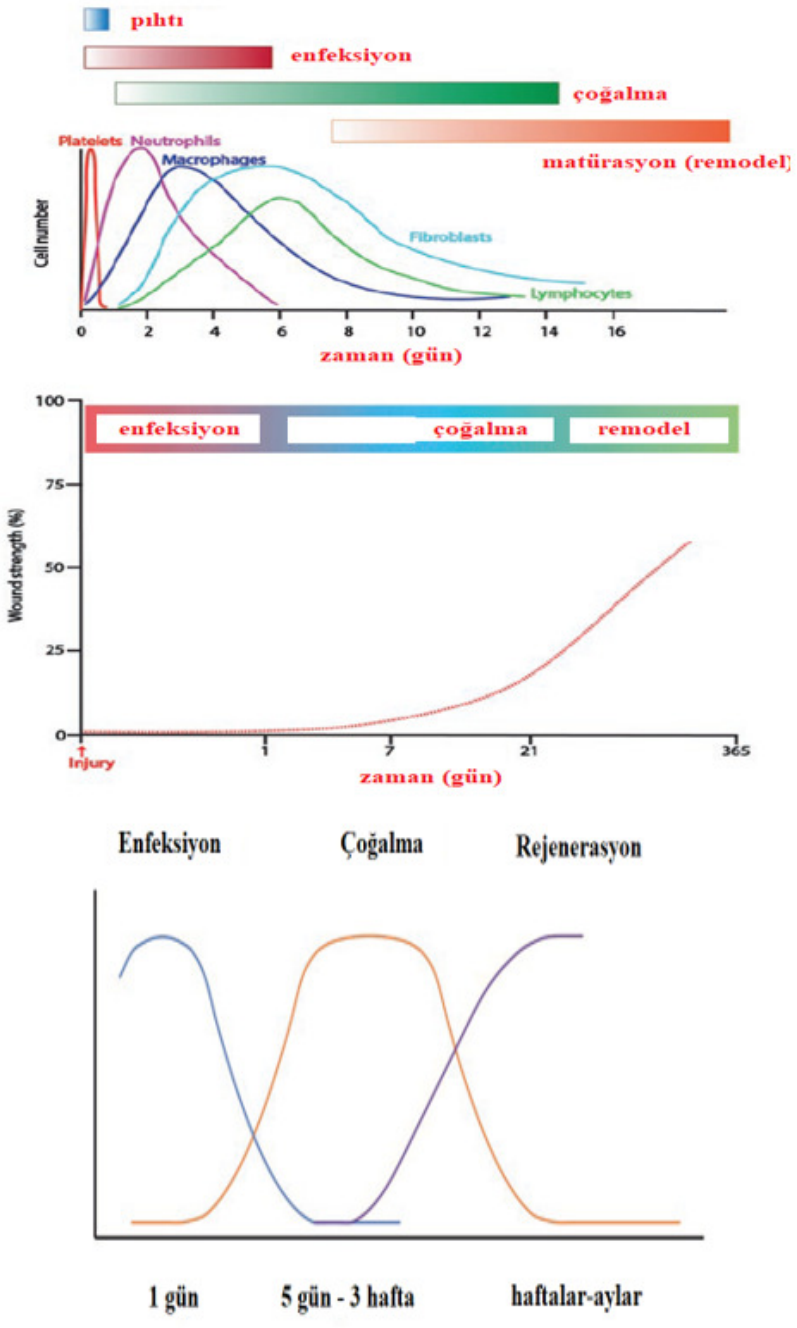
2.1 BİYOMALZEMELER

Biyomalzemeler, canlı vücudu içerisinde kullanılan çeşitli alet (implant) ve ekipmanların yapımında kullanılan metal, seramik, polimer veya kompozit esaslı cansız malzemeleri kapsamaktadır [1-5].

Genel olarak biyomalzemelerden beklenen özellikler aşağıdadır:

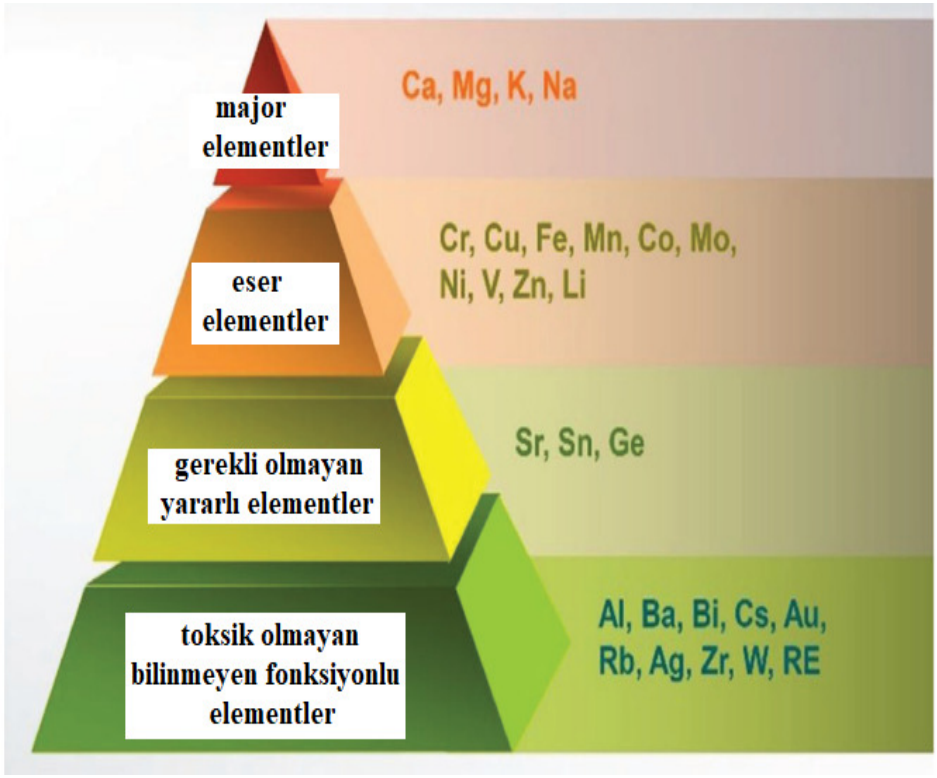
- Biyomalzemeler biyouyumlu olmalıdır,
- Biyomalzemeler çevre canlı dokuda uygun doku cevabı oluşturabilmelidir,
- Biyomalzemeler toksik özellikte olmamalıdır (örneğin Hg, V, Al ve Ni gibi elementler toksik özelliktedir),
- Biyomalzemelerin mekanik özellikleri uygun değerde olmalıdır (ortopedik sert doku implantlarında elastisite modülü değeri gerilim gevşemesini engellemek için kemiğe yakın olmalı düşük veya yüksek olmamalıdır),
- Biyomalzemelerin elektrokimyasal korozyon direnci yeterli seviyede olmalıdır (özellikle ağız ortamı gibi asidik olabilen ortamlarda)
- Biyomalzemelerin yeterli bir aşınma direnci olmalıdır (özellikle sürtünme kuvvetlerine maruz kalan sert doku amaçlı ortopedik implantlarda).
- Biyomalzemelerin yeterli bir yorulma direnci olmalıdır (özellikle değişken mekanik yüklere maruz kalan sert doku amaçlı ortopedik implantlarda).
- Biyomalzemelerin üretimi ve kullanımı makul olmalıdır. Metalik malzemelerin ve polimer malzemelerin üretimi kolay olmakla beraber seramik esaslı malzemeler gevrek yapılarından dolayı üretimleri ve şekillendirilmeleri zordur.
- Biyomalzemelerin makul bir maliyeti olmalıdır.
- Biyomalzemeler ulaşılabilir ve temin edilebilir olmalıdır.
- Biyomalzemelerin sterilizasyon işlemi kolaylıkla ve malzemeye zarar vermeden uygulanabilmelidir. Örneğin metalik biyomalzemeler sıcak su ile sterilize edilebilirken, polimer malzemeler düşük sıcaklıklardan bile etkilenmektedir.

Aşağıdaki şekilde iltihaplanma ve biyolojik tamirin zamana bağlı gelişimi görülmektedir. Görüldüğü gibi zaman ilerledikçe pıhtı, enfeksiyon, çoğalma ve matürasyon evrelerinden geçilmektedir.



Şekil 2.1. İltihaplanma ve biyolojik tamirin zamana bağlı gelişimi [2]

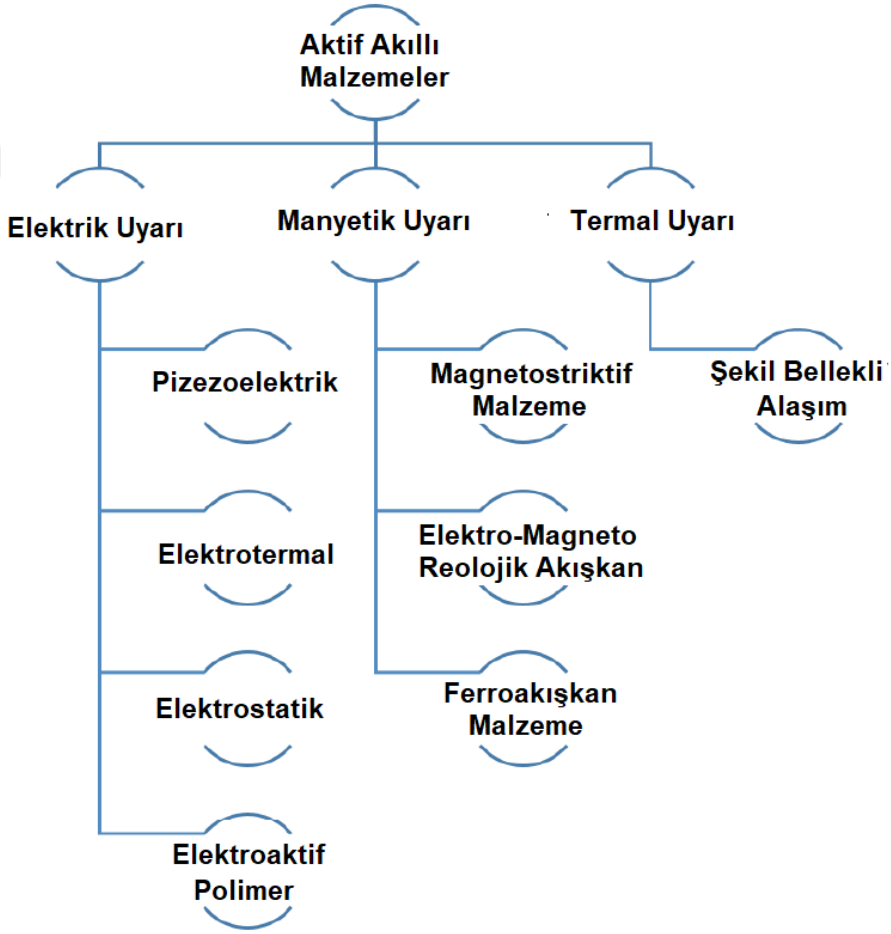
Aşağıdaki şekilde elementlerin vücuttaki davranışlarına göre grupandırılması görülmektedir. Görüldüğü gibi majör (temel) elementler, eser miktarda bulunan elementler, vücut için gerekli olmayan (mutlaka alınması gerekmeyen) fakat yararlı olan elementler ve vücuda toksik etkisi olmayan aynı zamanda vücuda etkisi bilinmeyen fonksiyonlara sahip elementler olarak dört ana grupta sınıflandırılmaktadır. Görüldüğü gibi, kalsiyum, potasyum, sodyum ve magnezyum vücut için gerekli temel metalik elementlerdir.



Şekil 2.2. Elementlerin vücuttaki davranışlarına göre gruplandırılması [3]

2.2 AKILLI MALZEMELER

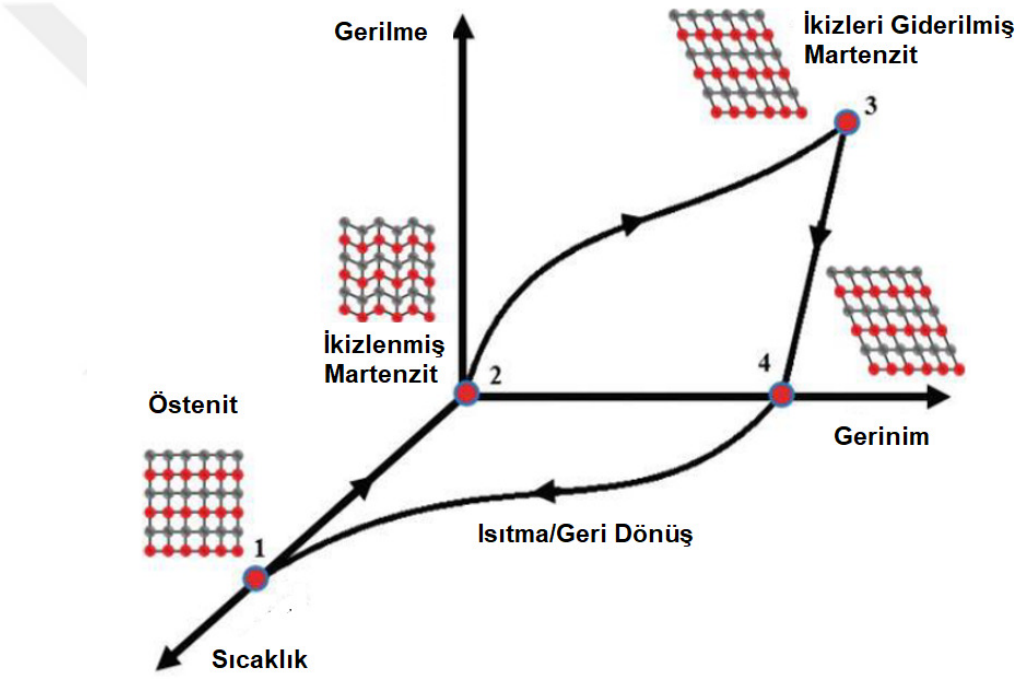
Genel olarak tanımlamak gerekirse, akıllı malzemeler belirli bir uyarıya veya dış etkiye belirli (istenen seviyede ve özellikte) bir tepki veren metal, polimer, seramik esaslı ileri mühendislik malzeme grubudur. Akıllı malzemeler, piezoelektrik, elektrostriktif, termoelektrik, şekil bellekli, magnetostriktif, kromojenik gibi farklı özelliklere sahip çeşitleri bulunmaktadır. Akıllı malzemeler genel olarak uygulanan dış uyarının çeşidine göre sınıflandırılmaktadır. Şekil bellekli akıllı malzemeler termal bir dış uyarıya cevap veren (şekil değişimi gösteren) akıllı malzeme türüdür. Piezoelektrik malzemeler, elektrotermal malzemeler, elektrostatik malzemeler, elektroaktif polimerler elektriksel bir dış uyarıya cevap veren akıllı malzeme grubudur. Örneğin piezoelektrik malzemeler elektriksel uyarıya mekanik bir etki göstermektedir (mikrofon). Magnetostriktif malzemeler, elektro-manyeto reolojik akışkanlar, ferroakışkan malzemeler manyetik bir dış uyarıya cevap veren akıllı malzeme grubudur. Aşağıdaki şekilde akıllı malzemelerin uyarı türüne göre sınıflandırılması görülmektedir.



Şekil 2.3. Akıllı malzemelerin uyarı türüne göre sınıflandırılması [8]

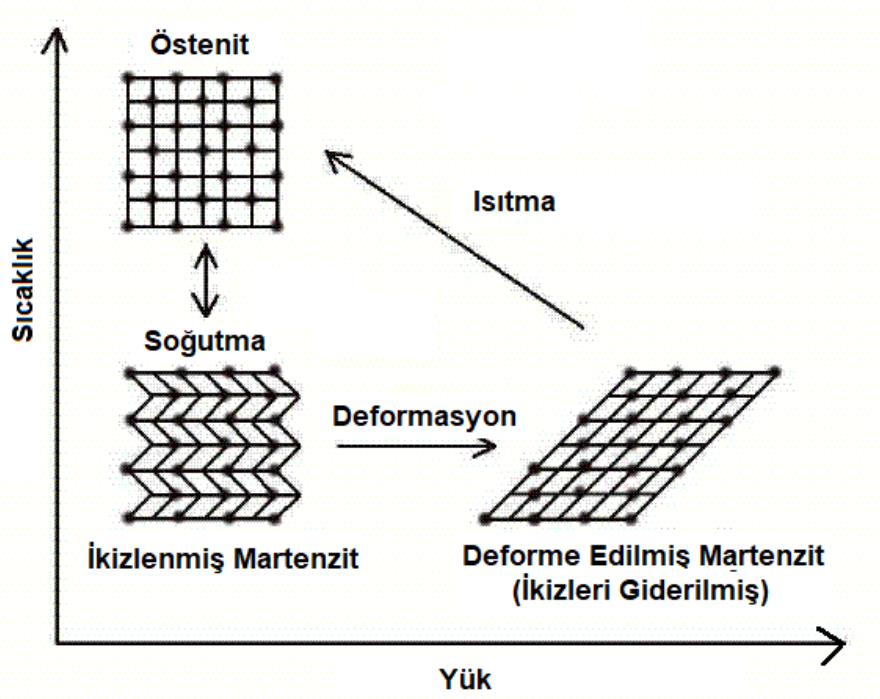
2.3 ŞEKİL BELLEKLİ MALZEMELER

Akıllı malzemeler belirli bir uyarıya veya dış etkiye belirli (istenen seviyede ve özellikte) bir tepki veren metal, polimer, seramik esaslı ileri mühendislik malzeme grubudur. Akıllı malzemeler uygulanan dış uyarının çeşidine göre sınıflandırılmaktadır. Şekil bellekli akıllı malzemeler genel olarak termal bir dış uyarıya belirli bir cevap veren (şekil değişimi gösteren) akıllı malzeme türüdür (geleneksel şekil bellek davranışı). Diğer yandan, gerilim etkisi ile şekil değişim gösteren süperelastik malzemeler de şekil bellekli malzeme sınıfında değerlendirilmektedir. Aşağıdaki şekilde sıcaklık etkisiyle uyarılan geleneksel şekil bellek mekanizması görülmektedir.



Şekil 2.4. Geleneksel şekil bellek mekanizması [9]

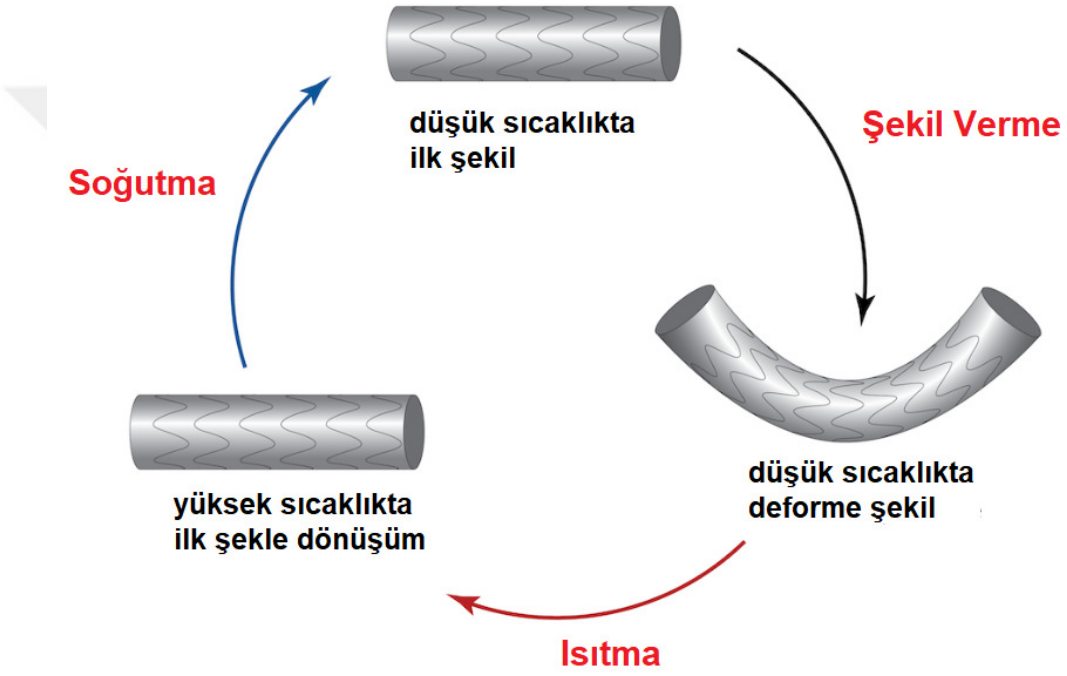
Aşağıdaki şekilde geleneksel şekil bellekli alaşımlarda sıcaklık-yük (gerilme) grafiği görülmektedir. Öncelikle östenit faz bölgesinde bulunan malzeme (ilk şekil), hızlıca soğutularak ikizlenmiş martenzit faz yapısı elde edilmektedir. Daha sonra ikizlenmiş martenzit faz yapısındaki düşük sıcaklıkta bulunan malzemeye plastik deformasyon uygulanmakta ve ikinci şekil elde edilmektedir. Son aşamada martenzit-östenit dönüşüm sıcaklığının (östenit başlangıç sıcaklığı) üzerine ısıtılan ikinci şekildeki şekil bellekli malzeme ilk şeklini hatırlayarak ilk şekline geri dönmektedir.



Şekil 2.5. Şekil bellek alaşımlarda sıcaklık-yük grafiği [11]

]

Aşağıdaki şekilde şekil bellekli malzemelerde dönüşüm prosesi temel aşamaları bir koroner stent örneği üzerinden şematik olarak görülmektedir. Görüldüğü gibi öncelikle östenit sıcaklığında (yüksek sıcaklık) ilk şeklinde (tıkalı damar noktasında damar açıldıktan sonra ulaşması istenen çapta) bulunan malzeme ani ve hızlı olarak düşk sıcaklığa soğutularak ikizlenmiş martenzit elde edilir. Daha sonra bu malzemeye plastik deformasyon uygulayarak (şekil verme), ikinci şekil elde edilir (tıkalı damarın mevcut darklmış çapı). Son aşamada malzeme östenit sıcaklığına ısıtılarak ilk şekline dönüşmesi sağlanır (stent tıkalı damar noktasında genişleyerek damarı açar).



Şekil 2.6. Şekil bellekli malzemelerde dönüşüm prosesi [10]

2.4 HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ

Hesaplamalı malzeme bilimi ve mühendisliği, malzemeler ile ilgili problemleri çözmek amacıyla atomik seviyeden makro (sürekli) seviyeye kadar çeşitli boyut ve zaman skalalarında malzeme simülasyon (sayısal tahmin), teori, istatistik ve modellemeye (fiziksel ve matematiksel bağıntılar) yönelik hesaplama ve analiz yöntemlerini içermektedir [12-16].

Bir madde etkilendiği zaman, dört temel etkiden birine maruz kaldığını söyleyebiliriz

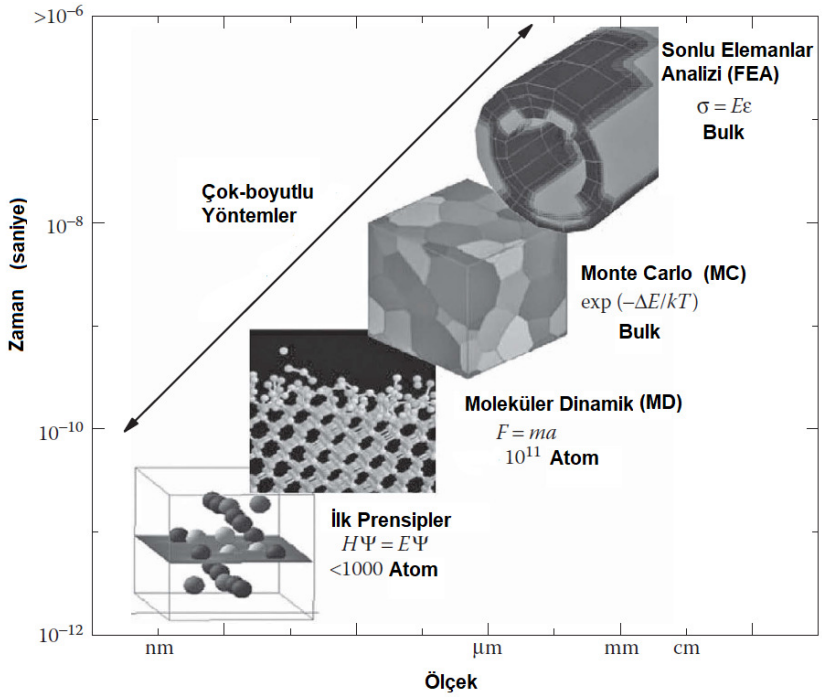
- Elektromanyetik
- Zayıf nükleer
- Kuvvetli nükleer
- Yer çekimi

Malzeme bilimi genellikle elektromanyetik etkileşimler ile ilgilenmekte diğer üç etkileşimi (zayıf nükleer, kuvvetli nükleer ve yerçekimi) içeren durumlarla ilgilenmemektedir. Genel olarak malzemelerin çevreleriyle etkileşimleri çekirdeklerin, elektronların ve atomların arasındaki elektromanyetik etkileşimleri belirler.

Elektromanyetik etkileşimlerin temel etki olmasına göre, genel olarak hesaplamalı malzeme biliminde temel prensipler aşağıdaki gibidir:

- Ne hesaplanacağının belirlenmesi
- Gerçek sistemi temsil edecek bir model sistem oluşturulması
- Uygun kuralların seçimi (klasik mekanik, kuantum mekaniği, teoriler, algoritmalar)
- Sistem için istenen işlemleri yapacak uygun kod/model/program/paket seçimi
- Simülasyonun çalıştırılması, sonuçların analizi ve iyileştirilmiş koşullarda işlemin hassasiyetinin artırılması
- Veri üretilmesi ve diğer çalışmalardan elde edilmiş verilerle karşılaştırma yapılması

Aşağıdaki şekilde hesaplamalı malzeme biliminde zaman-ölçek skalası görülmektedir. Genel olarak en küçük ölçekte (elektron ölçeği) kuantum yasaları esaslı ilk prebsipler (ab initio) yöntemi kullanılmaktadır. Atom ölçeğinde Newton yasalarına dayanan moleküler dinamik (MD) metodu uygulanmaktadır. Bulk malzemelerde istatistik yöntemler kullanan Monte Carlo (MC) tekniği kullanılmaktadır. Bulk malzeme incelemelerinde ayrıca sonlu elemanlar yöntemi (FEA) da kullanılmaktadır.



Şekil 2.7. Hesaplamalı malzeme biliminde zaman-ölçek skalası [13]

Sonlu Elemanlar Yöntemi (FEA)

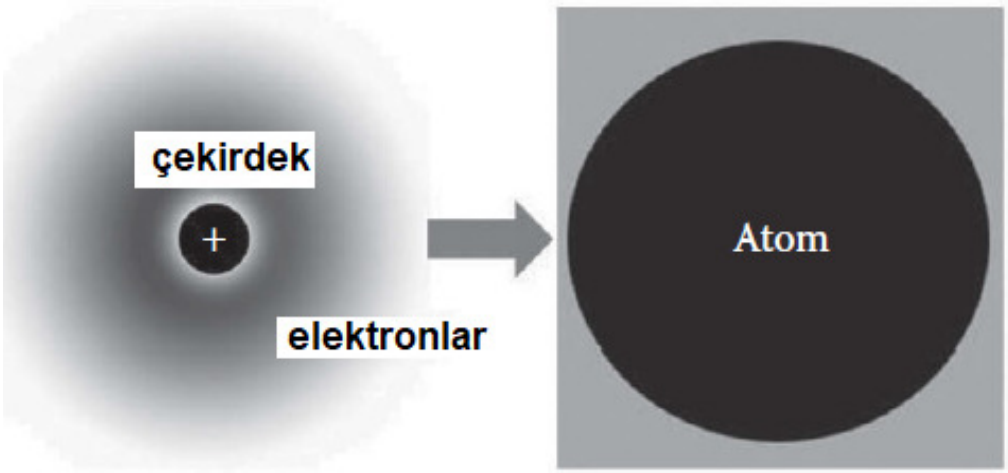
Sonlu elemanlar yöntemi (FEA) sistemi çok sayıda küçük elemana bölmeyi ve çeşitli değişkenleri (gerilme, deformasyon, sıcaklık, basınç) ölçmeyi kapsamaktadır. Çeşitli cebirsel, diferansiyel ve integral denklemler bilgisayar destekli sayısal yöntemler kullanılarak çözülmektedir. Sonlu elemanlar yöntemi (FEA) malzeme özelliklerinin tespit edilmesi ve olaylar (elastik ve plastik deformasyon, kırılma, ısı iletimi, kütle iletimi) gibi çok sayıda karmaşık mühendislik problemine çözümler sağlamaktadır.

Monte Carlo Yöntemi

Monte Carlo (MC) yöntemi numune alımı için ayrık ve rastgele örnekleme içeren bir istatiksel yöntemdir. Monte Carlo (MC) yöntemi problemleri çözmek için gerekli olasılık için Boltzmann faktörünü ($\exp(-U/kBT)$) kullanır. Burada U durum enerjisi, kB ise Boltzmann sabiti, T ise sıcaklıktır. Monte Carlo (MC) yöntemi oldukça basit olup sadece atomların etraflarında rastgele sıçramaları ve minimum enerji seviyesini yakalamalarını içerir. Monte Carlo (MC) yöntemi genel olarak sadece istatistiksel mekaniğe dayandığı için herhangi bir dinamiğe gerek duymaz. Metropolis Monte Carlo (MC) yöntemi genel olarak termodinamik durumları simule etmekte olup sistemin enerji minimizasyonunu kullanmaktadır.Kinetik Monte Carlo (MC) yöntemi sadece difüzyon, atom akışı gibi aktive edilmiş prosesler için çalışmaktadır. Monte Carlo (MC) yöntemi mikron ölçeğinde olup malzemelerin mikroyapılarını inceleyebilir.

Moleküler Dinamik (MD) Yöntemi

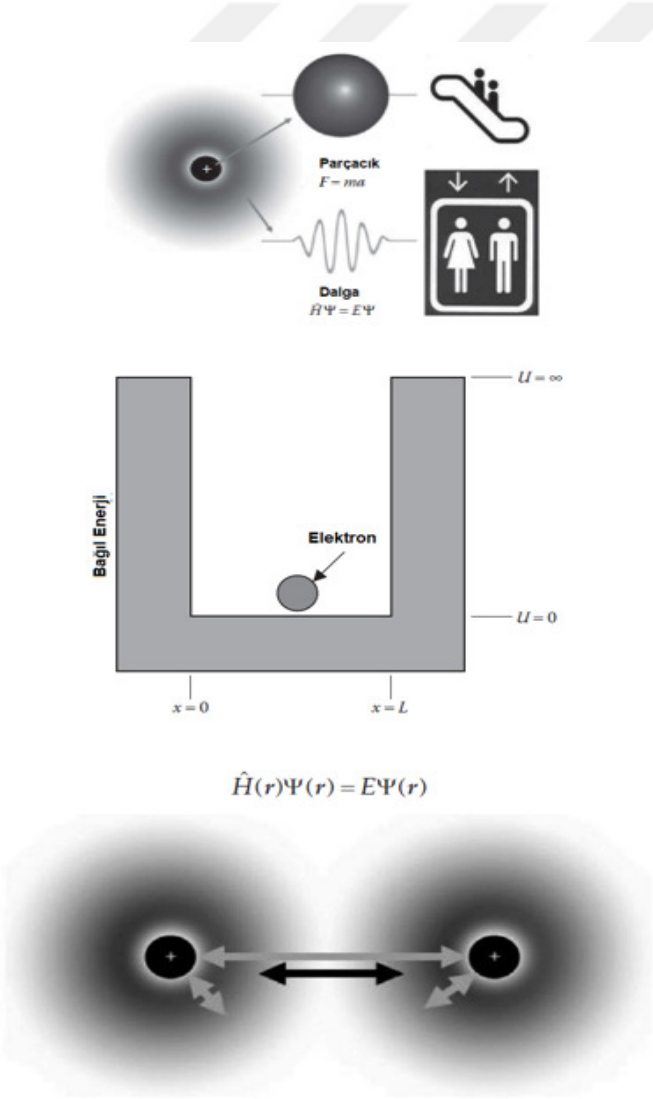
Moleküler dinamik (MD) yöntemi atomları temel parçacık olarak dikkate almakta ve çekirdek ve elektronları dikkate almamaktadır. Böylece, moleküler dinamik (MD) yönteminde sistem sadece atom-atom etkileşimleri için nispeten kolay diferansiyel denklemler içeren Newton hareket yasaları kullanılarak klasik olarak tanımlanabilir. Aşağıdaki şekilde moleküler dinamik (MD) modeli prensipleri şematik olarak görülmektedir.



Şekil 2.8. Moleküler dinamik model [13]

İlk Prensipler Yöntemi (ab initio)

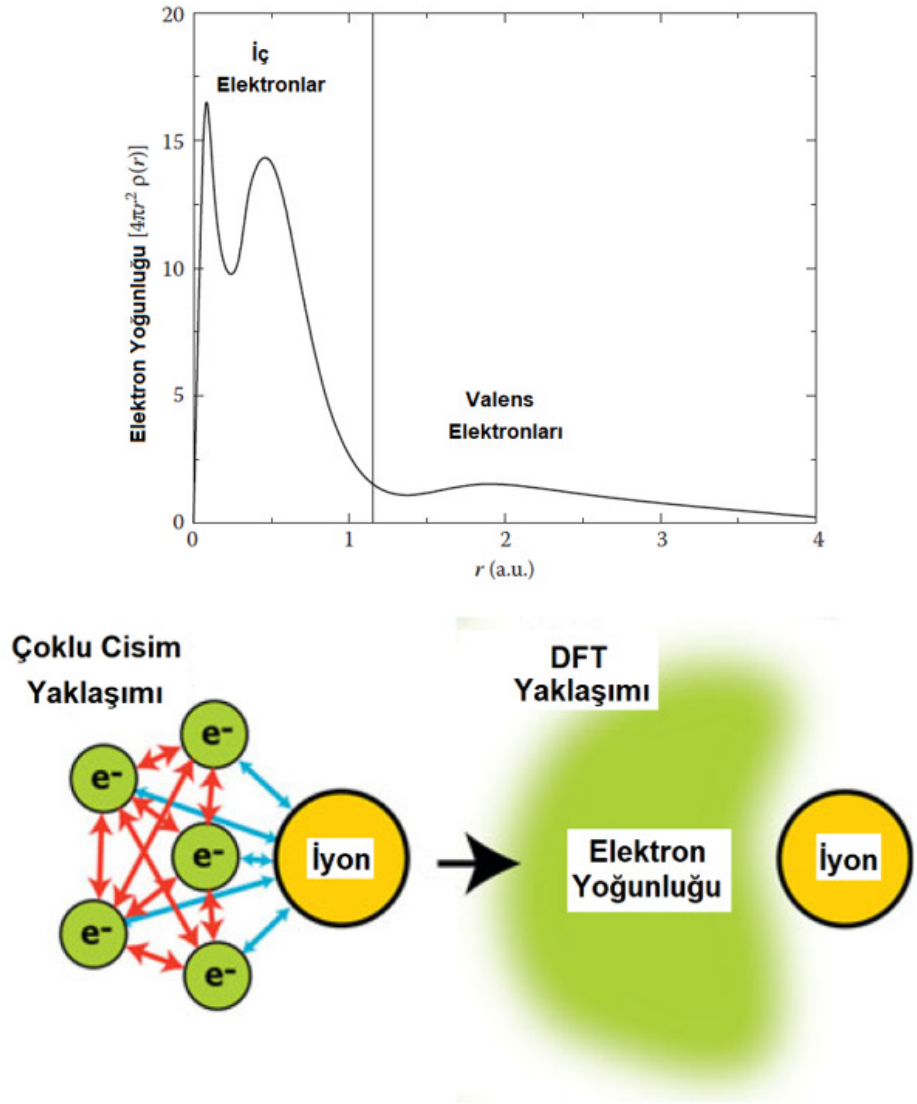
İlk prensipler yöntemi temel parçacık olarak çekirdek ve elektronları dikkate almaktadır ve olayları atom altı ölçeğinde değerlendirmektedir. Böylece, sistem sadece oldukça zor kısmi diferansiyel denklemler içeren kuantum mekaniği ile tanımlanabilmektedir. İlk prensipler yöntemi hesaplamaları simule edilecek malzemenin atom numarası dışında dış parametrelere bağlı değildir. Eskiden sadece hidrohen benzeri atomlar kuantum mekaniği yöntemleri ile incelenebilmekte iken, günümüzde yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yaklaşımı ile tüm atomlar incelenebilmektedir. Aşağıdaki şekilde genel olarak ilk prensipler modeli şematik olarak görülmektedir.



Şekil 2.9. İlk prensipler modeli [13]

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), hesaplamalı malzeme bilimde kullanılan kuantum mekaniği temelli bir yöntemdir. Aşağıdaki şekilde genel olarak yoğunluk fonksiyonel teorisi şematik olarak görülmektedir.



Şekil 2.10. Yoğunluk fonksiyonel teorisi [13, 14]

CASTEP Yazılımı

CASTEP yazılımı, katı-hal malzeme bilimi için kullanılan kuantum mekaniği temelli bir programdır. CASTEP yazılımı, ilk prensipler kuantum mekaniği hesaplamalarının kullanıldığı yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) düzlem-dalga psödopotansiyel metodunu kullanmaktadır. CASTEP yazılımı ile yarıiletken, seramik, metal, mineral ve zeolit gibi krsitallerin ve yüzeylerin özellikleri araştırılmaktadır. CASTEP yazılımının tipik uygulamaları yüzey kimyası, yapısal özellikler, bant yapısı, yoğunluk, optik özelliklerin incelenmesidir. Ayrıca, CASTEP yazılımı ile kristallerin ikinci mertebe elastik sabitlerin tensörleri ve mekanik özellikleri hesaplanabilmektedir. Ayrıca, poisson oranı, bulk modülü de hesaplanabilmektedir. Ayrıca, CASTEP yazılımı ile bulk ve yüzey difüzyon prosesi araştırabilmektedir. CASTEP yazılımı yarıiletken veya diğer malzemelerde sıfır boyutlu noktasal hataların (kafes boşluğu, arayer ve yeralan) ve bir/iki/üç boyutlu hataların (tane sınırı, dislokasyon) incelenmesinde de kullanılmaktadır [15, 16]. Ayrıca, CASTEP yazılımı ile katıların titreşim özellikleri (fonon dispersiyonu, fonon projeksiyon yoğunluğu, termodinamil özellikler) incelenebilmektedir. Böylece, yüzeydeki adsorbanlar, yüksek sıcaklık ve yüksek basınçta faz kararlılığı incelenebilmektedir. Malzemelerin IR cevabı tahmin edilebilmektedir. CASTEP yazılımı bir malzeme yapısında atomların optimum düzenini geometri optimizasyonu prosesi ile hesaplamakta ve ayrıca bir sistemin dinamik özelliklerini moleküler dinamik (MD) formları ile inceleyebilmektedir.

CASTEP yazılımının kullandığı geometri optimizasyon teknikleri

- LBFGS
- BFGS
- TPSD
- DMD

CASTEP yazılımı sistem yapısını optimize etmek için kuvvetlerin kullanımı yerine atomları hızlandıran kuvvetleri kullanarak dinamik özellikleri simule etmektedir (Moleküler Dinamik (MD) metodu.

2.5 LİTERATÜR TARAMASI

Gou ve diğ. [17] şekil bellekli Ti-Ni-Cu alaşımlarında Cu ilavesinin alaşımına etkisini ve alaşımın kristal yapısını CASTEP programı ile incelemişlerdir. Düşük Cu ilavelerinde B2-$B19^1$ dönüşümünün, orta Cu ilavelerinde B2-B19-$B19^1$ dönüşümünün, yüksek Cu ilavelerinde B2-B19 dönüşümünün meydana geldiğini ifade etmişlerdir. Cu ilavesinin martensit latis parametrelerine (a, b ve c) ve monolitik kafes açısına etkisini incelemişlerdir. Yüksek Cu ilavelerinde monolitik yerine ortorombik martenzit meydana gelmiştir.

Kumar ve diğ. [18] şekil bellekli NiTi alaşımlarında martenzit faz dönüşümlerini DFT ile incelemişlerdir. Şekil bellek özelliğinin kübik östenitten düşük simetrili martenzite difüzyonsuz dönüşümle kaynaklandığını ifade etmişlerdir. Kübik B2 (uzay grup Pm3m), ortorombik B19 (uzay grup Pmma), monoklinik $B19^1$ (uzay grup P2/m), hacim-merkezli ortorombik BCO (Cmcm), trigonal R (P3) yapılarını gösterebildiğini ifade etmişlerdir.

Jabur ve diğ. [20] şekil hafızalı TiNi alaşımı mekanik alaşımlama-toz metalurjisi tekniği ile üretmişler ve karakterize etmişlerdir. Şekil hafızalı TiNi alaşımına ilave edilen Cr ve Al oranının alaşımın mekanik davranışına etkilerini araştırmışlardır. Cr ve Al katkısının sertliğe ciddi bir etkisinin olmadığını ifade etmişlerdir. Şekil hafızalı TiNi alaşımına yapılan Cr ve Al katkılarının faz dönüşüm sıcaklığını arttırdığı tespit edilmiştir. Şekil hafızalı TiNi içerisine katılan Cr ve Al ilavelerinin gözenekliliği azalttığını ifade etmişlerdir.

Eda ve diğ. [21] mekanik alaşımlama-toz metalurjisi ile şekil hafızalı nitinol (NiTi) alaşımını üretmiş ve karakterize etmişlerdir. Alaşıma mekanik özelliklerini geliştirmek için % 2-3 kobalt katmışlardır. Co katkılı Ni-Ti-Co alaşımı yüksek şekil hafıza özelliği göstermiştir.

Yaşar [22], şekil hafızalı TiNi alaşımlarının toz metalürjisi ile üretmiş ve karakterize etmiştir. Numunelere 900 °C sıcaklıkta yarım saat çözeltiye alma işlemi uygulanıp su verilmiştir. NiTi esaslı alaşımların ısıl işlem sonrası şekil hafıza davranışı gösterdiği belirtilmiştir.

Aydoğmuş [23], yüksek oranda gözenek içeren şekil hafızalı Ti-Ni alaşımını üretmiş ve karakterize etmiştir. Tez kapsamında sinterlenmiş alaşımlara 400 °C sıcaklıkta 1 saat süre ile

yaşlandırma ısıl işlemi uygulanmıştır. Çözeltiye almaya uygulanmamıştır. Ni oranının % 51 değerinden düşük olduğu durumlarda yaşlandırma mümkün olmadığını ifade etmişlerdir.

Wang [24] termomekanik esaslı şekil hafıza eğitim işleminin işlem sıcaklığının alaşımın 2-yönlü şekil hafıza davranışına etkisimi araştırmıştır. Çalışma şekil hafızalı NiTi ve 45Ni50Ti5Cu şekil hafızalı alaşımından mamul yaylar kullanılarak gerçekleştirmişlerdir.

Aköz [25] şekil hafızalı TiNi alaşımını mekanik alaşımlama-toz metalurjisi tekniği ile üretmiş ve şekil hafıza özelliklerini incelemiştir.

Tanış [26], şekil hafızalı TiNi tozlarına % 6 bakır ilave ederek alaşımlar üretmiştir. Ham numuneler 1000 °C sıcaklıkta sinterlenmiştir. Alaşımların mikroyapısında şekil hafıza özelliği açısından gerekli martenzit, östenitik, ve Ni_4Ti_3 fazlarının varlığı tespit edilmiştir. 250, 350, 450 ve 550 °C sıcaklıkta yapılan yaşlandırmanın mikroyapı ve faz dönüşüm sıcaklığına etkisini araştırılmıştır. Yaşlandırma ile mikroyapının martenzit ve Ti_2Ni içerdiği sonucuna varılmıştır.

Young [27] kalay katkısının şekil hafızalı TiNiSn alaşımlarına etkisini araştırmıştır. Şekil hafızalı TiNiSn alaşımlarının düşük sıcaklıklarda ekonomik bir şekil hafızalı alaşım grubu olacağı sonucuna varılmıştır.

Sui [28] şekil hafızalı TiNiNbCo alaşımını üretmiş ve incelemiştir. Kobalt katkısının şekil hafıza davranışı, mikroyapı, faz dönüşüm sıcaklığına etkileri araştırılmıştır. Kobalt oranının artışı ile TiNiCo alaşımının faz dönüşüm sıcaklığının azaldığı tespit edilmiştir. Şekil hafızalı alaşımın akma mukavemetinin kobalt katkısı ile arttığı ifade edilmiştir.

Young [29] şekil hafızalı 50Ni30Ti20Hf alaşımını üretmiş ve yüksek sıcaklıklarda kullanılma potansiyelini araştırmıştır. NiTi alaşımlarına göre tokluğunun kötü olduğunu ifade etmişlerdir.

Salvetr [30] Mg katkısının şekil hafızalı TiNi alaşımına etkilerini araştırmıştır. Magnezyum katkısının Ni-Ti-5Mg alaşımının kararlılığını geliştirdiği tespit etmiştir.

Keskin [31] şekil bellekli TiNiCu, TiNiNb, TiNiFe alaşımlarını üretmiş ve TiNi alaşımına bakır, niyobyum ve demir ilavesinin etkilerini incelemiştir. Alaşımlar kendiliğinden ilerleyen

yüksek sıcaklık sentezi yöntemi ile üretilmiştir. Bakır en çok %25, demir ve niyobyum en çok %10 değerine kadar çeşitli oranlarda ilave edilmiştir.

Yang ve diğ. [33] Ti-Ni-Pt şekil bellekli alaşımlarını ilk prensipler temelli yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi ile teorik olarak incelemişlerdir. Pt oranı arttıkça latis parametresinin arttığını tespit etmişlerdir. %12 Pt ilavesinde B19' monoklinik martenzit fazını oluştuğunu %15 Pt değerinde ortorombik martenzit B19 fazının daha kararlı olduğunu tespit etmişlerdir. Östenit-martnezit faz dönüşüm sıcaklığının (Tm) ana faz (östenit) ile martenzit fazı arasındaki oluşum enerjisi farkına (ΔE) bağlı olduğunu tespit etmişlerdir. ΔE değerinin artması ile faz dönüşüm sıcaklığının (Tm) arttığını tespit etmişlerdir. B2 östenit (hacim merkezli tetragonal), B19' monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit birim hücre (latis) ve 2x2x3 boyutlarında süperhücre yapıları oluşturulmuş ve DFT esaslı VASP yazılımı ile fazların oluşum enerjileri hesaplanarak analiz edilmiştir. En yüksek oluşum enerjisine yüksek sıcaklık fazı olan B2 östenit fazının sahipolduğu, B19' monoklinik martenzit fazının en düşük oluşum enerjisine sahip olduğu bulunmuştur. NiTi ve NiTiPt alaşımlarının durum yoğunluğu (DOS) grafiklerinde, fermi enerji seviyesi üzerinde Ti atomlarının de seviyeleri, fermi enerji seviyesinin altında ise Ni atomlarının d seviyelerinin etkin olduğu tespit edilmiştir.

Yang ve diğ. [34] şekil bellekli $Ti_{50}Ni_{50-x}Zr_x$ ve $Ti_{50}Ni_{50-x}Cu_x$ alaşımlarını ilk prensipler esaslı yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi ile teorik olarak CASTEP kodu ile incelemişlerdir. 2x2x3 boyutlarında 48 atom içeren B2 östenit (hacim merkezli tetragonal), B19' monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit fazı süperhücreleri oluşturulmuş ve hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Artan Zr oranı ile B19' monoklinik martenzit fazının kararlılığının arttığını tespit etmişlerdir. Östenit ve martenzit fazları arasındaki enerji farkının Cu<10 değerlerinde azaldığını daha sonra ise az da olsa artığını tespit etmişlerdir. Aynı şekilde östenit ve martenzit fazları arasındaki enerji farkının Zr<10 değerlerinde azaldığını daha sonra hızla artığını tespit etmişlerdir. Zr ilavesinin dönüşüm sıcaklığını arttırdığını ifade etmişlerdir.

Yang ve diğerleri [35] $Ti_{50}Ni_{50-x}Nb_x$ şekil bellekli alaşımlarını üretimişler ve ilk prensipler esaslı yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yöntemi ile teorik olarak incelemişlerdir. % 0, 2.08, 6.25, 8.33, 10.42, 12.5 ve 18.75 oranlarında Nb ilavesi gerçekleştirilmiştir. 2x2x3 boyutlarında 48 atom içeren B2 östenit (hacim merkezli tetragonal), B19' monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit fazı süperhücreleri oluşturulmuş ve hesaplamalar gerçekleştirilmiştir.

Artan Nb oranı ile beraber B2 östenit (hacim merkezli tetragonal), B19’ monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit fazının oluşum enerjisinin arttığı tespit edilmiştir.

Kim ve diğ. [36] şekil bellekli Ti-(50-2X)Ni–XSn (X = 5, 8, 10, 12.5) alaşımlarını ark ergitme yöntemi ile üretmişler ve incelemişlerdir. Alaşımların soğutma sırasında B2-R-B19’ faz dönüşümlerini ısıtma sırasında ise B19’-B2 faz dönüşümlerini gösterdiklerini ifade etmişlerdir. Toparlanma oranın şekil bellek eğitiminden önce % 81 şekil bellek eğitiminden sonra ise % 95 olduğunu bulmuşlardır. Fe, Mo, Co, Cr, Al elementlerinin trigonal R fazı oluşumunu sağladıkları tespit edilmiştir. B2-R faz dönüşüm sıcaklığı DSC analizi ile 314 K olarak tespit edilmiştir.

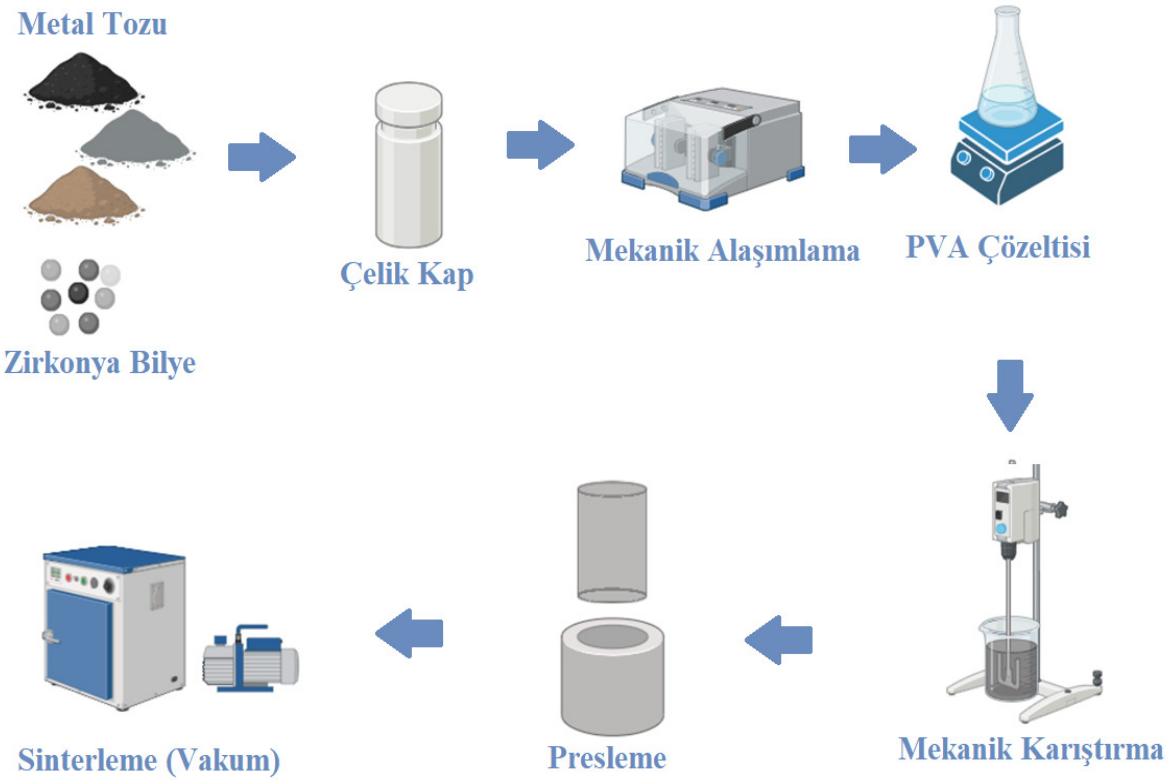
Ishida ve diğ. [37] şekil bellekli Ti-Ni-Cu incel filmleri üretmişler ve Cu katkısının şekil bellek özelliklerine etkisini incelemişlerdir.

Dang ve diğ. [38] şekil bellekli Ti-Ni-Co alaşımlarını üretmişler ve % 6 Co katkısının şekil bellek özelliklerine etkisini incelemişlerdir. Ti-Ni-Co alaşımlarının %6 süperelastik toparlanma gösterdiği tespit edilmiştir.

3. YÖNTEM

3.1 TOZ METALURJİSİ İLE NUMUNE ÜRETİMİ

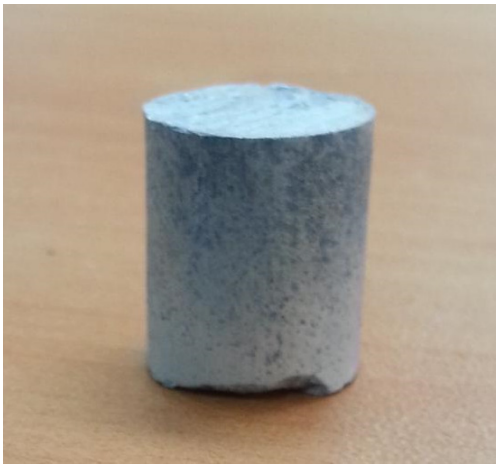
Bu tez çalışmasında şekil bellekli Ni-Ti esalı alaşımlar mekanik alaşımlama-toz metalurjisi (presleme-sinterleme) yöntemi ile üretilmiş ve çeşitli alaşım elementlerinin etkileri incelenmiştir. Numune üretiminde başlangıç malzemesi (hammadde) olarak metal tozları kullanılmıştır. Mekanik alaşımlama kademesinde bilyeli değirmende içerisinde 6 mm zirkonya bilye içeren kavanozlar içerisinde hazırlanan şekil bellekli Ni-Ti esaslı alaşım tozları 350 MPa basınçta sıkıştırılarak (presleme) ham numuneler elde edilmiş ve ardından ham numuneler yatay boru tipi fırın içinde 1 saat vakum atmosferinde sinterlenmiştir.



Şekil 3.1: Üretim akış şeması

Geleneksel toz metalurjisi tekniği (presleme-sinterleme) ile numune üretim temel aşamaları aşağıdaki gibidir:

- Mekanik Alaşımlama: Metal toz karışımları planlanan alaşımın kimyasal bileşimine göre belirlenen miktarlarda hassas teraziyle tartılmıştır. Mekanik alaşımlama yapabilmek için bilyeli değirmen ve öğütücü olarak 6 mm çapında zirkonya bilyeler kullanılmıştır. Metal tozu/zirkonya bilye oranı tüm karışımlarda 1/10 olacak şekilde yükleme yapılmıştır. Numuneler bilyeli değirmende 17-20 saat boyunca 400 rpm dönme hızında çalıştırılmıştır.
- Presleme: Mekanik alaşımlama işlemi sonrasında, ham numunelerde yeterli düzeyde mukavemet elde etmek için metal tozlarına yaklaşık olarak ağırlıkça % 1 polivinilalkol bağlayıcı çözeltisi eklenilip, homojen bir şekilde karıştırılmıştır. Sürtünmeyi engellemek amacıyla kalıp ve üst/alt zımba duvarları Zn-stearat esaslı yağlayıcı madde ile yağlanmıştır. Metal toz karışımları tek yönlü hidrolik preste, 350 MPa basınç altında preslenip ham numuneler elde edilmiştir.
- Sinterleme: Presleme işleminden sonra elde edilen silindirik ham numuneler 1200 ºC sıcaklıklarda sinterlenmiştir. Sinterleme işlemi boru tipi yatay fırında (MTI, GLS-1500X, USA) vakum ortamında gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.2: Sinterlenmiş numunelerin fotoğrafları

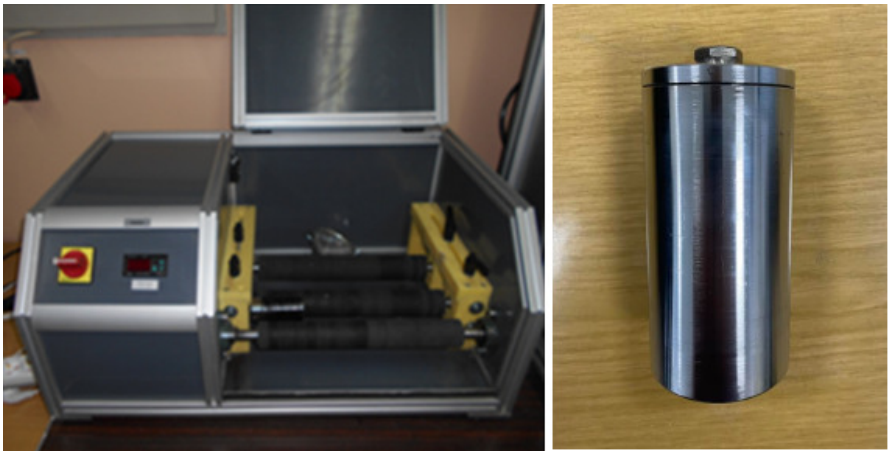
Aşağıdaki tabloda tez kapsamında üretilen Ti-Ni esaslı şekil bellekli alaşımların kimyasal bileşimleri görülmektedir.

Tablo 3.1: Ni-Ti esaslı alaşımlar.

Alaşım	Ti	Ni	Co	Nb	Ta	Mo	Fe	Cu	Sn	Mn
Ti-Ni	50	50								
Ti-Ni-8Co	46	46	8							
Ti-Ni-8Nb	46	46		8						
Ti-Ni-8Ta	46	46			8					
Ti-Ni-8Mo	46	46				8				
Ti-Ni-8Fe	46	46					8			
Ti-Ni-8Cu	46	46						8		
Ti-Ni-16Cu	42	42						16		
Ti-Ni-24Cu	38	38						24		
Ti-Ni-8Sn	46	46							8	
Ti-Ni-16Sn	42	42							16	
Ti-Ni-24Sn	38	38							24	
Ti-Ni-8Mn	46	46								8
Ti-Ni-16Mn	42	42								16
Ti-Ni-24Mn	38	38								24

Mekanik Alaşımlama

Belirlenen miktarlarda tartılan metal tozları, uygun bir kap içerisine metal tozu/bilye oranı 1/10 olacak şekilde konulmuştur. Öğütme ortamı olarak 6 mm zirkonya bilye kullanılmıştır. Mekanik alaşımlama işlemi toplam 20 saat boyunca 400 rpm dönme hızında gerçekleştirilmiştir. Çalışma kapsamında bilye olarak 6 mm çaplı ZrO_2 (zirkonya) bilye kullanılmıştır. Genel olarak, ağır bilyeler daha fazla çarpışma enerjisini tozlara ileteceğinden, öğütme ve mekanik alaşımlamada büyük boyutlu bilyelerin kullanılması daha avantajlıdır. Küçük bilyelerin, sürtünme kuvveti meydana getirdiği için amorf faz oluşumunu artırdığı bilinmektedir. Genel olarak, yumuşak mekanik alaşımlama şartlarının (küçük bilye boyutlu, düşük enerjili ve düşük bilye-toz oranı) amorflaşma oluşumunu artırdığı sonucuna varılmıştır. Dönme hızı olarak 400 devir/dakika dönme hızının optimum olduğuna karar verilmiştir. Daha yüksek hızlarda aşırı yüksek merkezkaç kuvvetinin oluştuğu ve istenilen seviyede bilye-toz çarpışmasının meydana gelmediği görülmüştür. Düşük dönme hızlarında ise bilyelerin yeterli enerji kazanamadıkları ve yeterli düzeyde bilye-toz çarpışmasının meydana gelmediği anlaşılmıştır. Döndürme hızının çok artmasıyla bilyelerin hareket hızı da artmakta, bilyeler kavanozun iç duvarlarına çivilenmekte ve aşağıya düşmediklerinden istenilen bilye-toz çarpışmaları meydana gelmemektedir. Bu nedenle dönme hızının, maksimum yükseklikten düşerek maksimum çarpışma enerjisi meydana getirebilmesi için kritik hız değerinin altında olması gerekir. Yüksek hızlar için bir diğer sınırlama ise kavanoz sıcaklığının yüksek hızlara çıkıldıkça artmasıdır. Yüksek sıcaklıklar da tozlardaki kirlenme oranı artabilir. Ayrıca çok yüksek hızlarda olumsuz sonuçlara yol açabilecek aşırı titreşim meydana gelebilmektedir.



Şekil 3.3: Bilyeli değirmen.

Tek Eksenli Presleme

Presleme öncesinde alaşımlar (metal tozları) bağlayıcı ile karıştırılmıştır. Bağlayıcı olarak PVA (polivinilalkol) kullanılmıştır. PVA, toz numunelerinin şekillerini korumaları ve ham numunelerde sinterleme işlemi öncesi yeterli mukavemetin sağlanması amacı ile kullanılmaktadır. Alaşımlar bağlayıcı ile karıştırıldıktan sonra elde edilen homojen karışımlar, pres kaplarının içerisine uygun miktarlar da konulup 350 MPa basınç altında hidrolik preste preslenmiştir ve silindirik ham numuneler üretilmiştir. Toz karışımı ile kalıp yüzeyi arasındaki sürtünmeyi en az seviyeye indirmek için kalıp yüzeyleri yağlayıcı ile yağlanmıştır. Yağlayıcı olarak Zn-stearat/etilalkol çözeltisi kullanılmıştır. Presleme esnasında alt baskı parçası ve dişi kalıp hareketsiz, üst baskı parçası ise hareketlidir. Dişi kalıp içerisinde bulunan toz karışımını düşey yönde sıkıştırmaktadır. Sıkıştırma işleminden sonra dişi kalıp ters çevrilerek ham numune alttan uygulanan kuvvetle kalıbın dışına çıkarılmaktadır.



Şekil 3.4: Pres cihazı

Sinterleme

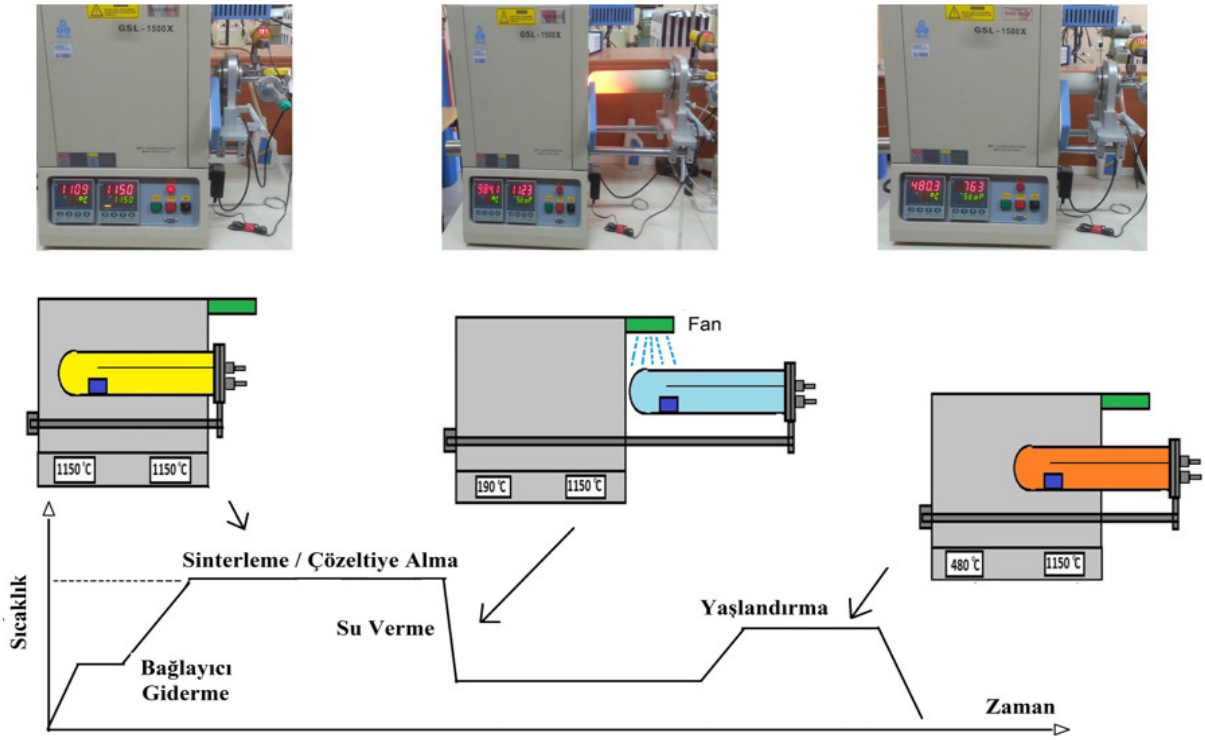
Sinterleme işlemi, ergime sıcaklığının altında ve genellikle malzemenin oksitlenebilme ihtimalinden dolayı vakum ortamında gerçekleştirilir. Sinterleme boru tipi yatay fırında (MTI) 1200 °C sıcaklıkta gerçekleştirilmiştir. Sinterleme işlemi için hazırlanan numuneler alümina kayıkçık içerisine yerleştirilmiştir. Numunelerin kayıkçığa yapışmasını önlemek için kayıkçık içine alümina tozu serpilmiştir. Sinterleme işlemi, ilk olarak 7°C/dk ısıtma hızında bağlayıcı giderme sıcaklığına kadar yapılmış ve bu sıcaklıkta 5 dakika bekletilerek bağlayıcı giderme işlemi yapılmıştır. Isıtma hızı, bağlayıcının parçalanması sırasında çıkan gazdan dolayı, olası çatlamaları önlemek için mümkün olduğunca düşük tutulmuştur. Numuneler daha sonra 12 ºC/dk hızında sinterleme sıcaklığına kadar ısıtılmış ve bu sıcaklıkta 60 dakika bekletilerek sinterlemeleri gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.5: Sinterleme fırını.

Yaşlandırma / Şekil Bellek Eğitimi

Aşağıdaki şekilde tez kapsamında üretilen şekil bellekli alaşımlara sinterleme işlemi sonrasında uygulanan yaşlandırma ısıl işlemi ve şekil bellek eğitimi ısıl işlemi düzeneği görülmektedir. İşlemler esnasında aşağıda görülen kayar flanşlı fırın kullanılmıştır. Sinterleme için belirlenen süre bittiğinde numunelerin içinde bulunduğu alümina tüp hızlı bir şekilde fırının dışına çıkarılmıştır. Soğutucu fan kullanılarak numunelerin hızla soğuması sağlanmıştır. Genel olarak sinterleme sonrası uygulanan bu hızlı soğutma işleminde soğutma hızı 1-3 ºC/s değerleri arasında elde edilmiştir. Daha sonra tüp tekrar belirli bir mesafeye kadar fırın içerisine itilerek 400-550 °C arasında yaşlandırma gerçekleştirilmiştir.



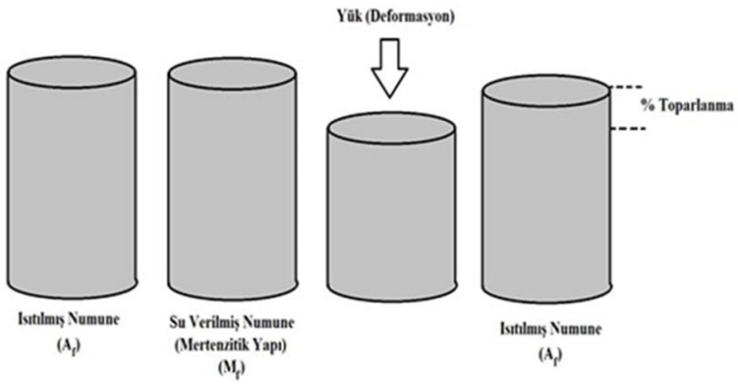
Şekil 3.6: Şekil bellek eğitimi

Alaşımların şerbest şekli bellek davranışı (toparlanma) basma yükü uygulayarak 12 mm çaplı 16 mm başlangıç yüksekliği olan silindir şekilli numunelerin yüksekliğinin belirlenmesiyle incelenmiştir.

- Öncelikle, silindir şekilli numune ısıtılmış ve ardından su verilmiştir.
- İkinci olarak, numunenin yüksekliği ölçülmüştür (h_0).
- Daha sonar, silindir şekilli numunelere basma uygulanmıştır ve yükseklik ölçülmüştür (h_1).
- Son olarak, yük kaldırılmış, numuneler ısıtılmış *(Af)* ve son boy (h_2) ölçülerek toparlanma belirlenmiştir.
-

Geri toparlanma (r) aşağıda görülen bağıntı ile hesaplanmıştır (3.3).

$$r\,(\%) = \left(1 - \frac{h_2 - h_0}{h_1 - h_0}\right) \times 100 \qquad (3.3)$$



Şekil 3.7: Geometrik olarak şekil bellek (% toparlanma) ölçümü

3.2 HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ

İlk Prensipler Temelli Yoğunluk Fonksyonel Teorsi

Alaşım geliştirme kademesinde Cambridge sıralı toplam enerji paketi (CASTEP) hesaplamalı malzeme bilimi yazılımı kullanılmıştır. Ti esaslı alaşımlarda farklı kimyasal bileşimlerin elastisite modülleri ve faz dönüşüm sıcaklığı incelenmiştir. Alaşım elementlerinin yer (kafes pozisyou) tercihleri yoğunluk fonsiyonel teorisi (DFT) ve termodinamik teori ile incelenmiştir. Pseudo-potansiyellerin hesaplanması kübik yapılar için Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) temelli "Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA)" kullanılarak yapılmıştır. Elektron-iyon etkileşimleri için ultrasoft pseudo-potansiyeller kullanılmıştır. Geometrik ve mekanik özellikler için optimize k noktaları ve kesilim kinetik enerjisi kullanılmıştır. Kullanılan kesilim enerjisi (cut-off) 500-600 eV değerindedir. Kullanılan k-noktaları 8x8x8 *değerindedir.* Elektron-iyon etkileşimleri için ultrasoft pseudo-potansiyeller kullanılmıştır. Öncelikle VESTA yazılımı ile birim kristal kafes (hmk, ymk, hsp vb) oluşturulmuştur. Ardından uygun kafes koordinatlarına alaşım atomları eklenmiştir. Kristal kafes türü, kristal kafes parametreleri, atom sayısı ve atom türleri belirlendikten sonra CASTEP hesaplamaları ve analizi gerçekleştirilmiştir.

Hesaplamalı Faz Diyagramları (CALPHAD) Yöntemi ile İnceleme

CALPHAD yöntemi ile inceleme kapsamında kapsamında Thermo-Calc yazılımı kullanılarak ikili ve üçlü faz diyagramları ve termodinamik parametreler hesaplanmıştır.

3.3 KARAKTERİZASYON

Tez kapsamında üretilen demir esaslı alaşımların mikroyapıları optic mikroskop (Olympus) ve taramalı electron mikroskobu (SEM) yardımı ile incelenmiştir.

Numunelerin ham ve sinterlenme sonrası yoğunlukları geometrik yöntem ile belirlenmiştir.

Numunelerin mekanik özellikleri (elastisite modülü) tahribatlı basma testi (Devotrans, Türkiye) ve tahribatsız ultrasonic test (General Electric, USM Go) ile incelenmiştir.

Alaşımların sertlikleri mikro Vickers sertlik yöntemiyle belirlenmiştir (Zwick Roell). Numunelerin aşınma davranışı pin-on disck yöntemiyle 20 m aşınma uzunluğu kullanılarak aşınma cihazında belirlenmiştir (Devotrans, Türkiye).

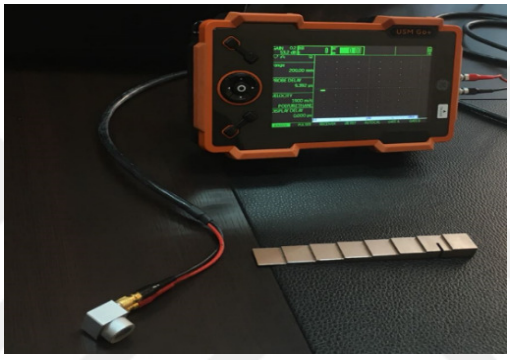


Şekil 3.8: a) Sertlik cihazı, b) basma cihazı, c) aşınma cihazı

Ultrasonik Hız Ölçümü

Tez kapsamında üretilen şekil bellekli alaşımların numunelerin elastisite modüllerini (Young's modülü) belirlemek için her bir alaşımda tahribatsız muayene esaslı ultrasonik hız ölçümü yapılmıştır (General Electric, USM Go). Sinterlenmiş şekil bellekli alaşımların elastisite modülü değerleri aşağıdaki eşitlik ile kullanılarak. Eşitlikte yer alan E elastisite modülünü, V_T ultrasonik enine hızı, V_L ultrasonik boyuna hızı, ρ yoğunluğu ifade etmektedir.

$$E = \rho V_T^{\,2} \frac{3V^2_L - 4V_T^{\,2}}{V_L^{\,2} - V_T^{\,2}} \qquad (3.1)$$



Şekil 3.9: Ultrasonik test cihazı

Girdap Akımları İletkenlik Testi

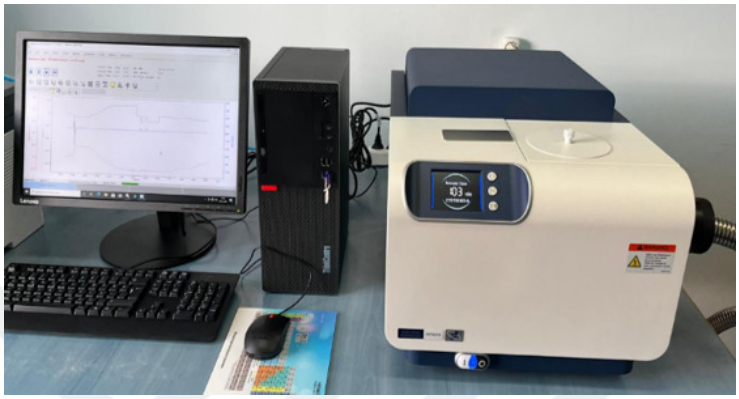
Tez kapsamında üretilen şekil bellekli alaşımların elektirksel iletkenlikleri % IACS (uluslararası tavlanmış bakır standardı) biriminden tahribatsız muayene esaslı girdap akımları cihazı kullanılarak (EtherCheck, Ether NDE) tespit edilmiştir.



Şekil 3.10: Girdap akımları cihazı

DSC Analizi

Tez kapsamında alaşımların dönüşüm sıcaklıkları diferansiyel taramalı kalorimetre cihazı (DSC) ile belirlenmiştir ((Hitachi, Nexta DSC200). DSC cihazı, alaşım ısıtılırken alınan veya verilen enerji miktarını tespit eder. DSC cihazı, ısı akışı esaslı ölçüm yapar.



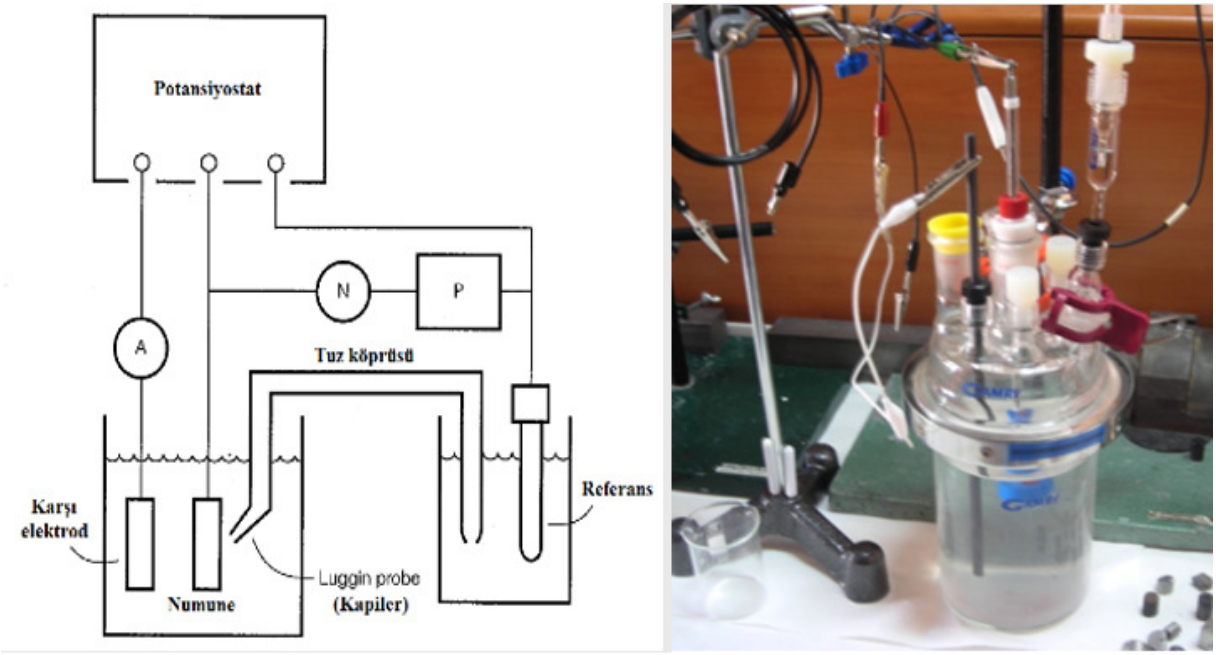
Şekil 3.11: Diferansiyel Taramalı Kalorimetre Cihazı

Metal İyon Salım Testleri (Statik Daldırma)

Tez kapsamında üretilen şekil bellekli alaşımlarının iyon salım davranışı yapay vücut sıvısı çözeltisi içerisinde statik daldırma testleri ile yapılmıştır. Numuneler öncelikle tartılmış ardından taze üretilen yapay vücut sıvısı içerisine daldırılarak belirlenen süre bekletilmiştir. Çözeltiye salınan metal iyon miktarı ICP-MS (Thermo Scientific) analizi ile testip edilmiştir.

Elektrokimyasal Korozyon Testleri

Tez kapsamında üretilen alaşımların elektrokimyasal korozyon deneyleri yapay vücut sıvısı içinde yapılmıştır (pH 6.6). Elektrokimyasal korozyon deneyleri 1litre hacimli korozyon hücresi içinde potansiyostat (Interface 1000, Gamry) ile yapılmıştır. Referans elektrod olarak kalomel elektrot, inert elektrot olarak grafit kullanılmıştır. Çalışma elektrodu olarak incelenen alaşım kullanılmıştır. Deneyler ve analizler yazılım yardımıyla yapılmıştır (Gamry Framework, Analyst). Sırayla, açık devre potansiyel, Tafel ve elektrokimyasal empedans spektroskopisi testleri yapılmıştır.

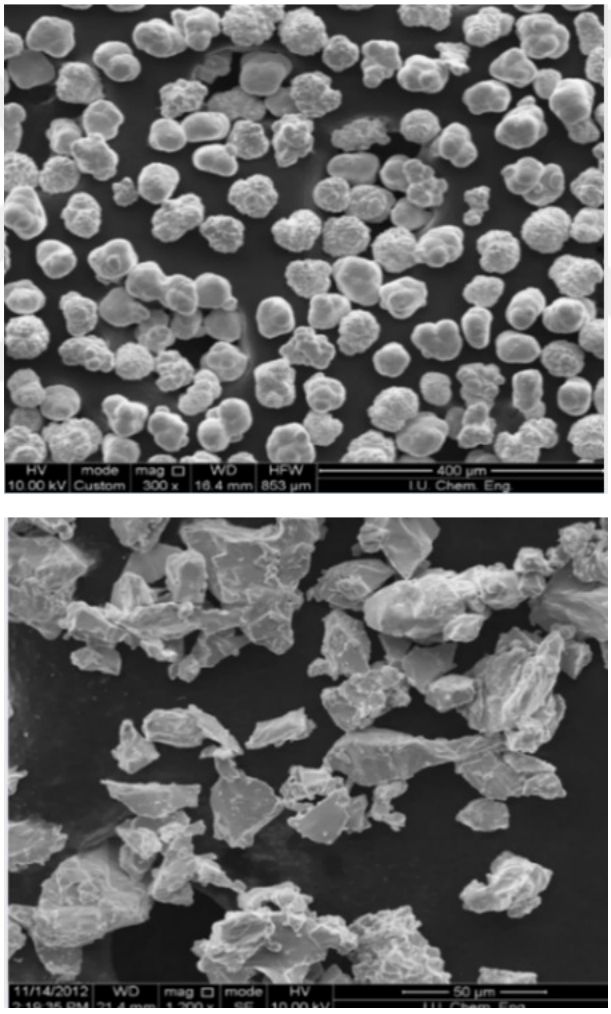


Şekil 3.12. Elektrokimyasal korozyon testi çalışma prensibi ve korozyon hücresi

4. BULGULAR

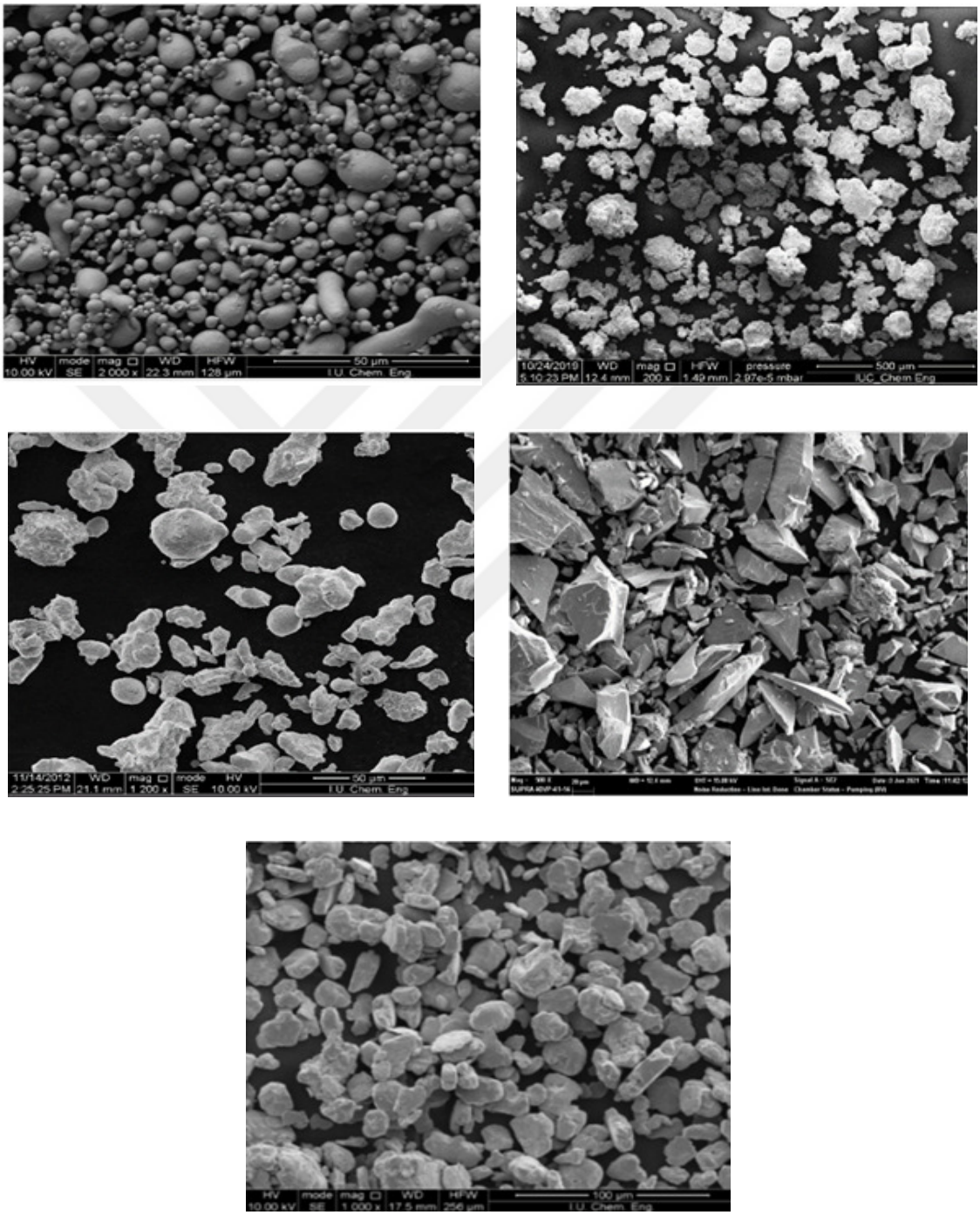
4.1 MİKROYAPI

Aşağıdaki şekilde şekil bellekli NiTi esaslı numune üretiminde başlangıç malzemesi olarak kullanılan metal tozları görülmektedir. Genel olarak kullanılan metal tozları karmaşık şekilli olup, homojen boyut dağılımına sahip oldukları söylenebilir.



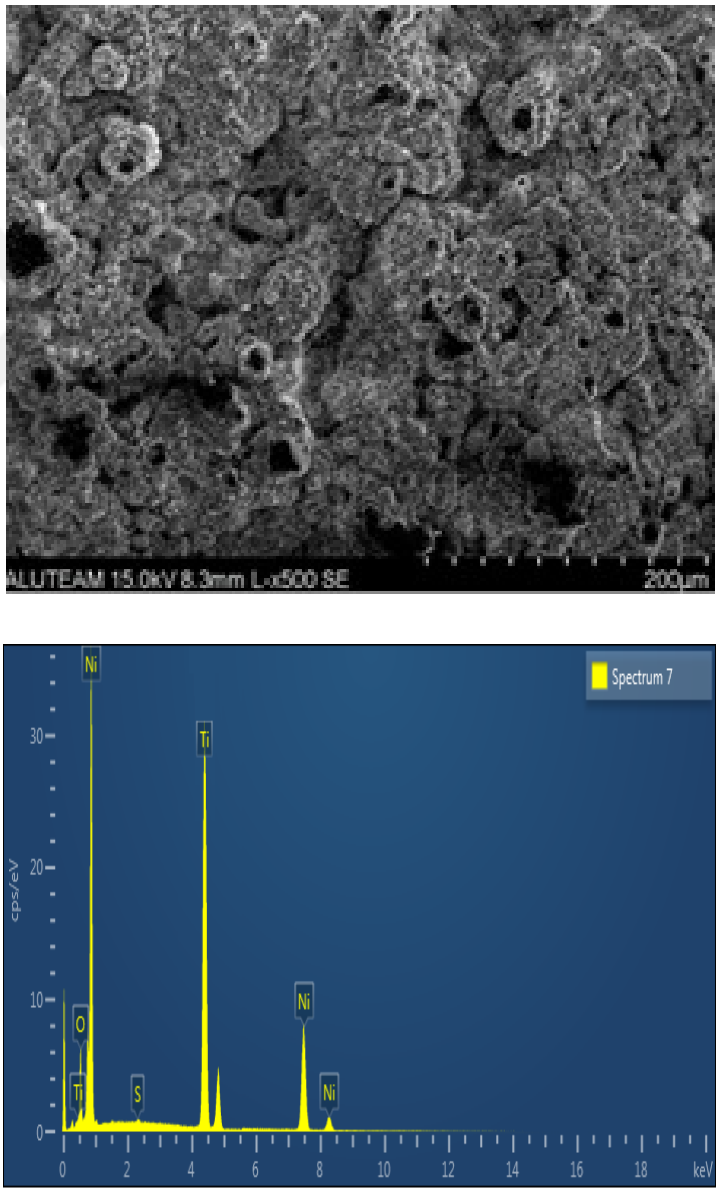
Şekil 4.1: Ni-Ti alaşımı hammaddelerinin SEM fotoğrafları a) Ni, b) Ti

Aşağıdaki şekilde şekil bellekli alaşımlarının üretiminde kullanılan metal tozlarının a) Fe tozu, b) Mn tozu, c) Cu tozu, d) Al tozu, e) Si tozu SEM fotoğrafları görülmektedir. Genel olarak metal tozlarının homojen boyutta oldukları ve karmaşık şekilli oldukları görülmektedir.



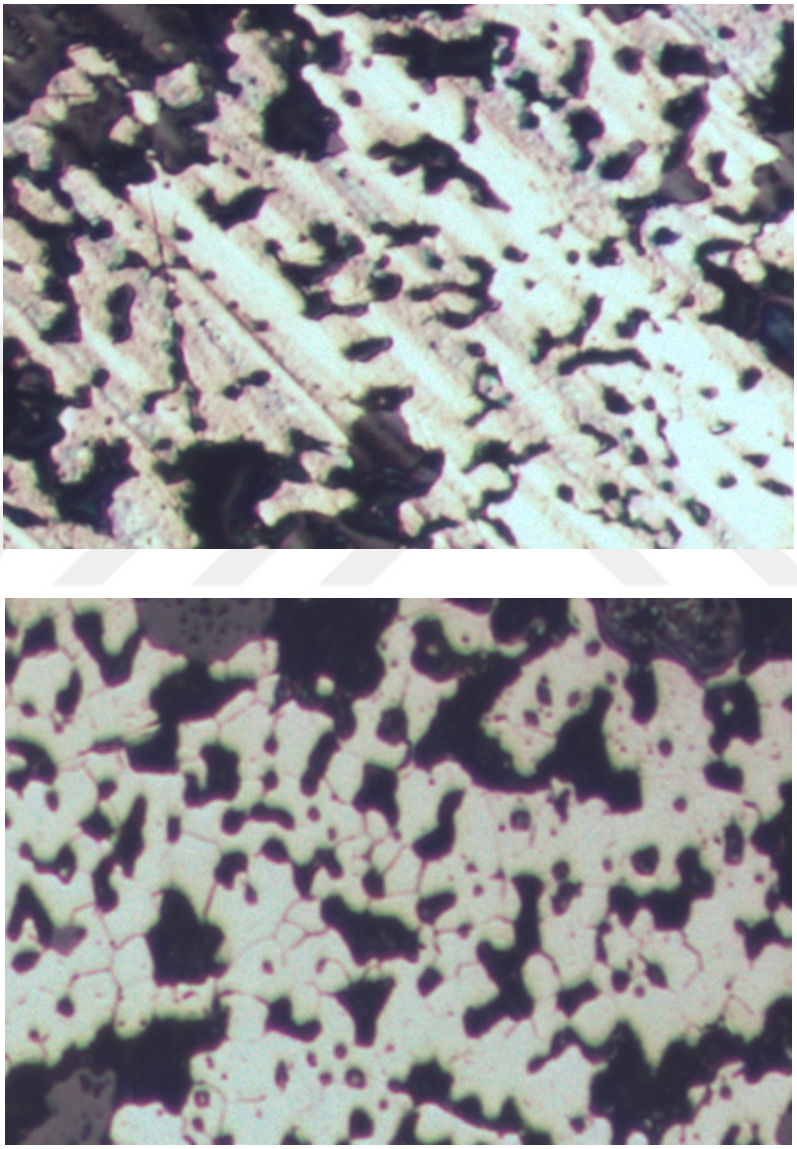
Şekil 4.2: Alaşım elementlerinin SEM fotoğrafları a) Sn, b) Fe c) Cu d) Mn e) Co

Aşağıdaki şekilde sinterlenmiş NiTi alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu (SEM) fotoğrafları görülmektedir. SEM fotoğrafından görüldüğü gibi yapıda makro ve mikro çatlaklar bulunmamaktadır. Ayrıca mikroyapıda gözenek bulunmadığı da görülmektedir. SEM fotoğraflarına bakıldığı zaman yeterli bir sinterlenme meydana geldiği söylenebilir. SEM fotoğraflarına baklıdığında mikroyaı NiTi matris ve Ti_2Ni/N_4T_3 gibi intermetalikler içermektedir. Zaki ve diğ. [40] toz metalürjisi ile ürettikleri TiNi alaşımlarının SEM fotoğraflarında mikroyapının NiTi matris ve N_4T_3 intermetaliklerden oluştuğunu ifade etmişleridir.



Şekil 4.3: NiTi Alaşımının SEM fotoğrafları

Aşağıdaki şekilde sinterlenmiş Ni-Ti alaşımının mikroyapısının optik mikroskop görüntüleri bulunmaktadır. Sinterlenmiş Ti-Ni alaşımının mikroyapısı alfa (α) östenit matris (B2) ve tane sınırlarında bir miktar intermetalik bileşikten oluşmaktadır. Ayrıca bir miktar kalıntı östenit bulunmaktadır. Dmitrievskiy ve diğ. [42] B2 matris ve tane sınırlarında Ti2Ni intermetalikleri olduğunu tespit etmişleridir.



Şekil 4.4: Ni-Ti alaşımlarının optik mikroskop fotoğrafları

4.2 MEKANİK ÖZELLİKLER

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının sertlik değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının sertlik değeri artmıştır.

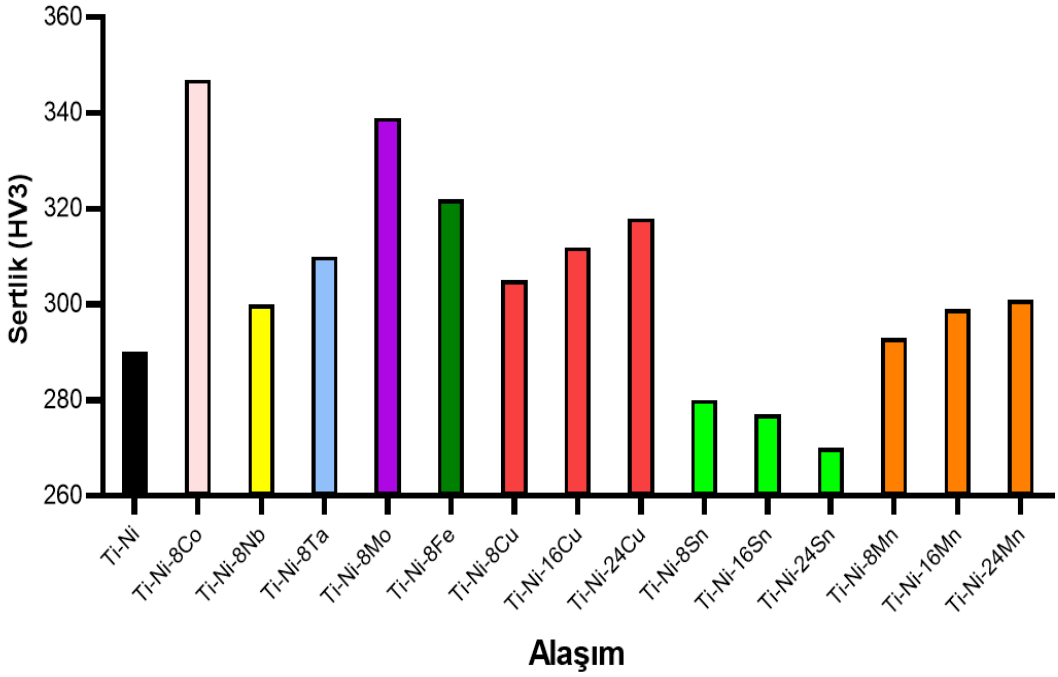
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının sertlik değeri artmıştır

Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının sertlik değeri azalmıştır.

Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının sertlik değerini artırmıştır.

En yüksek sertlik Co ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

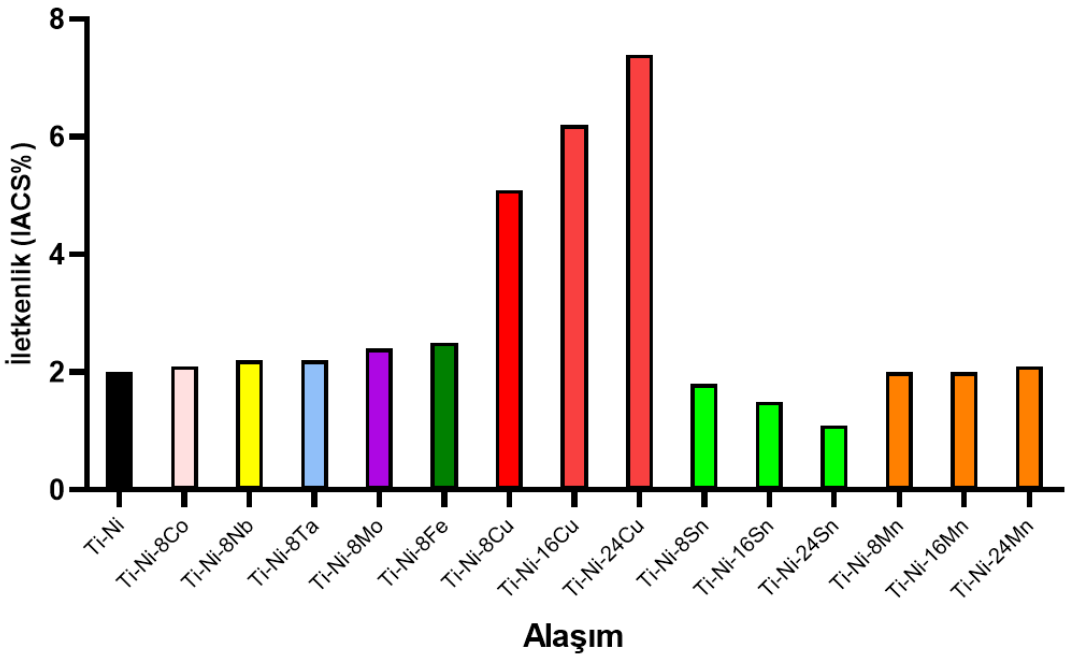
En düşük sertlik Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.



Şekil 4.5: Ni-Ti alaşımlarının sertlik değerleri

Aşağıdaki şekilde Ti-Ni alaşımlarının elektriksel iletkenlik değerleri görülmektedir.
Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının iletkenlik değeri artmıştır.
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının iletkenlik değeri az da olsa artmıştır
Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının iletkenlik değeri azalmıştır.
Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının iletkenlik değerini artırmıştır.
En yüksek iletkenlik Cu ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.
En düşük iletkenlik Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

Hao ve diğ. [43] Ag katkısının NiTi alaşımlarının elektriksel iletkenliğine etkisini incelemişlerdir. İletkenliğin 0.4 IACS% değerinden 2.5 IACS% değerine yükseldiği tespit edilmiştir.



Şekil 4.6: Ni-Ti alaşımlarının iletkenlik değerleri

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının sinterlenmiş durumdaki yoğunluk değerleri ve teorik yoğunluk değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının yoğunluk değeri artmıştır.

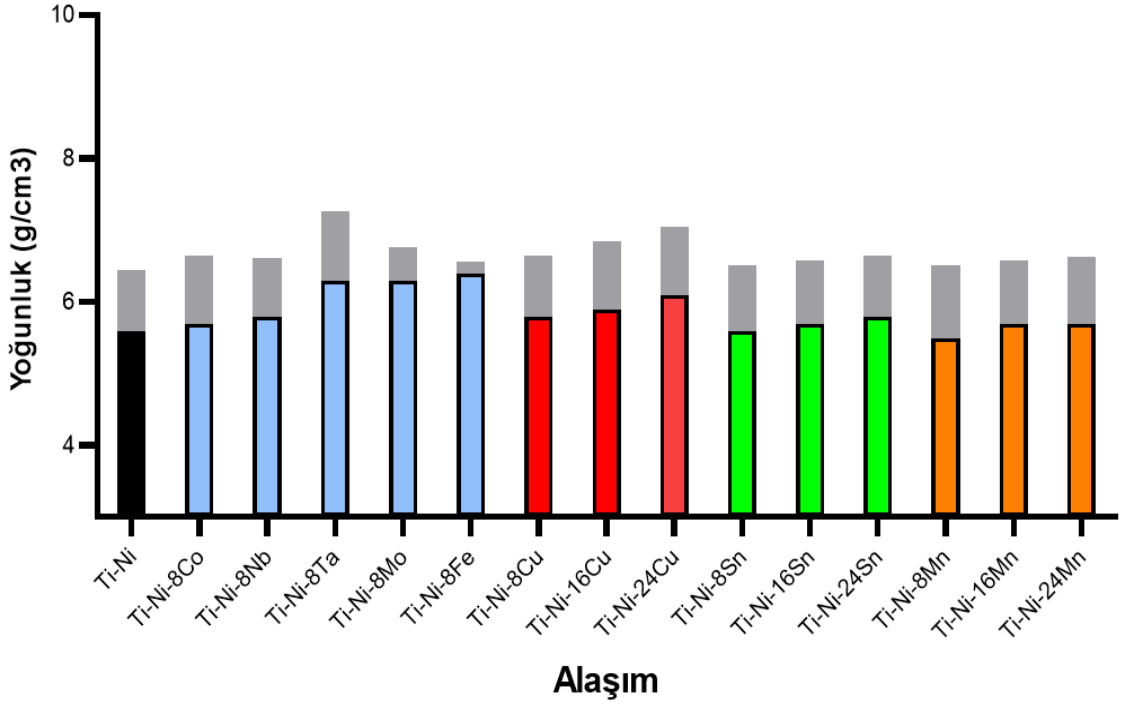
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının yoğunluk değeri artmıştır

Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının yoğunluk değeri artmıştır.

Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının yoğunluk değerini artırmıştır.

En yüksek yoğunluk Fe, Mo ve Fe ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

En düşük yoğunluk Sn ve Mn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.



Şekil 4.7: Ni-Ti alaşımlarının yoğunluk değerleri

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının aşınma değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının aşınma değeri azalmıştır.

Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının aşınma değeri artmıştır

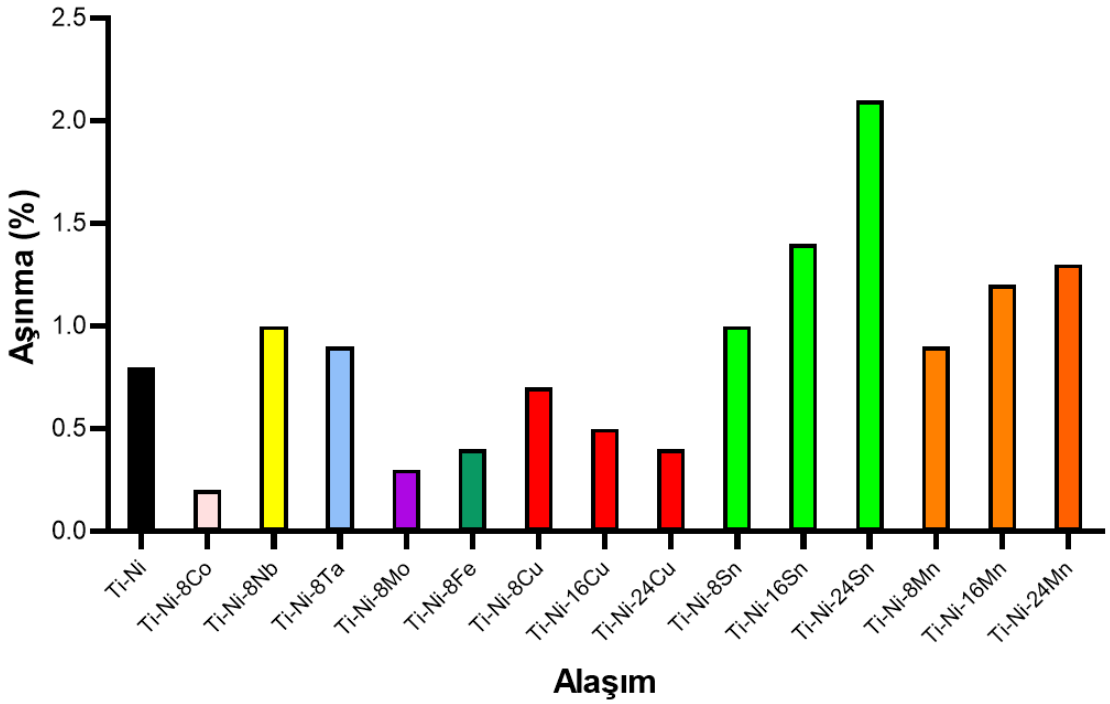
Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının aşınma değeri artmıştır.

Co, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının aşınma değerini azaltmıştır.

Nb, Ta, NiTi alaşımının aşınma değerini artırmıştır.

En düşük aşınma Co ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

En yüksek aşınma Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.



Şekil 4.8: Ni-Ti alaşımlarının aşınma değerleri

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının elastisite modülü değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının elastisite modülü değeri artmıştır.

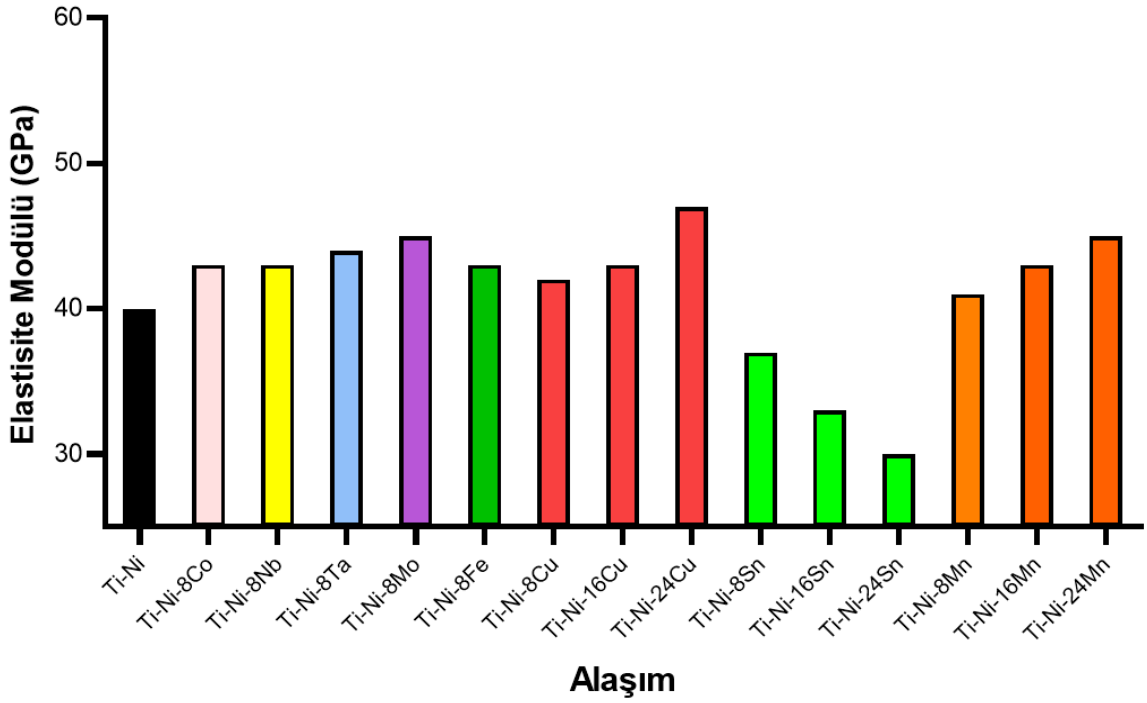
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının elastisiyte modülü değeri artmıştır

Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının elastisite modülü değeri azalmıştır.

Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının elastisite modülünü değerini artırmıştır.

En düşük elastisite modülü Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

En yüksek elastisite modülü Mo ve Cu ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.



Şekil 4.9: Ni-Ti alaşımlarının elastisite modülü değerleri

4.3 İYON SALIM SONUÇLARI

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının yapay vücut sıvısı çözeltisi içerisinde metal iyon (Ni) salım değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımından Ni^{2+} iyon salım değeri artmıştır.

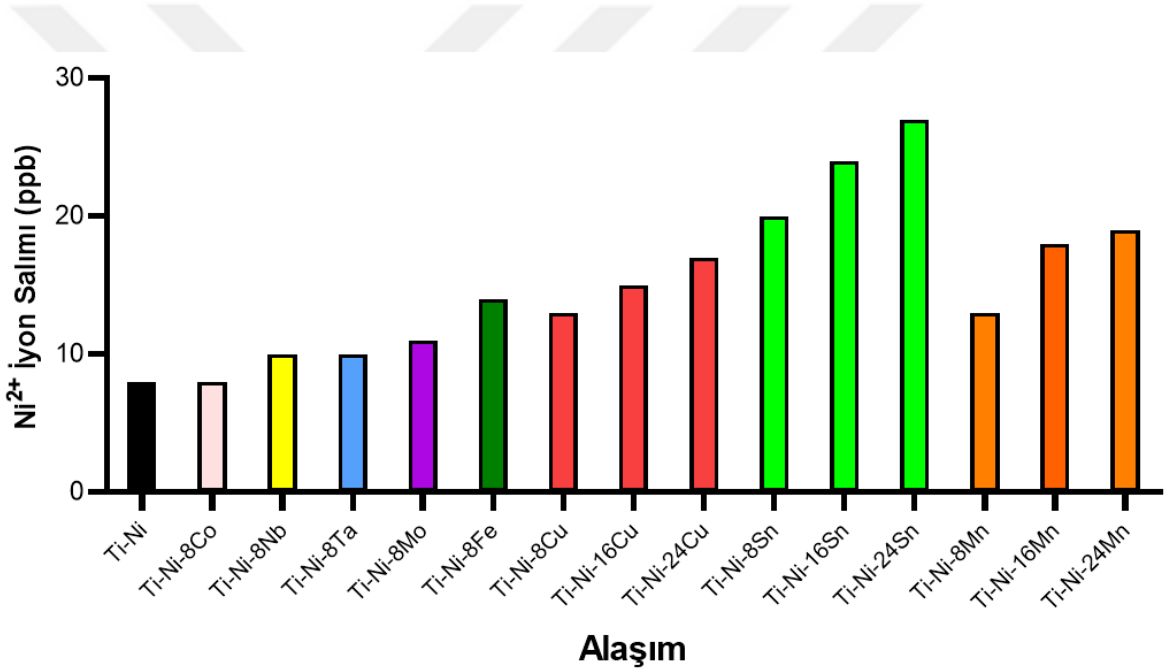
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımından Ni^{2+} iyon salım değeri artmıştır

Sn oranı arttıkça NiTi alaşımından Ni^{2+} iyon salım değeri artmıştır.

Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi ile NiTi alaşımından Ni^{2+} iyon salım değeri artmıştır.

En düşük iyon salımı Co ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

En yüksek iyon salımı Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.



Şekil 4.10: Ni-Ti alaşımlarının Ni iyon salım değerleri

4.4 ELEKTROKİMYASAL KOROZYON SONUÇLARI

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının yapay vücut sıvısı ortamında elektrokimyasal korozyon hızı değerleri görülmektedir.

Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının korozyon hızı değeri artmıştır.

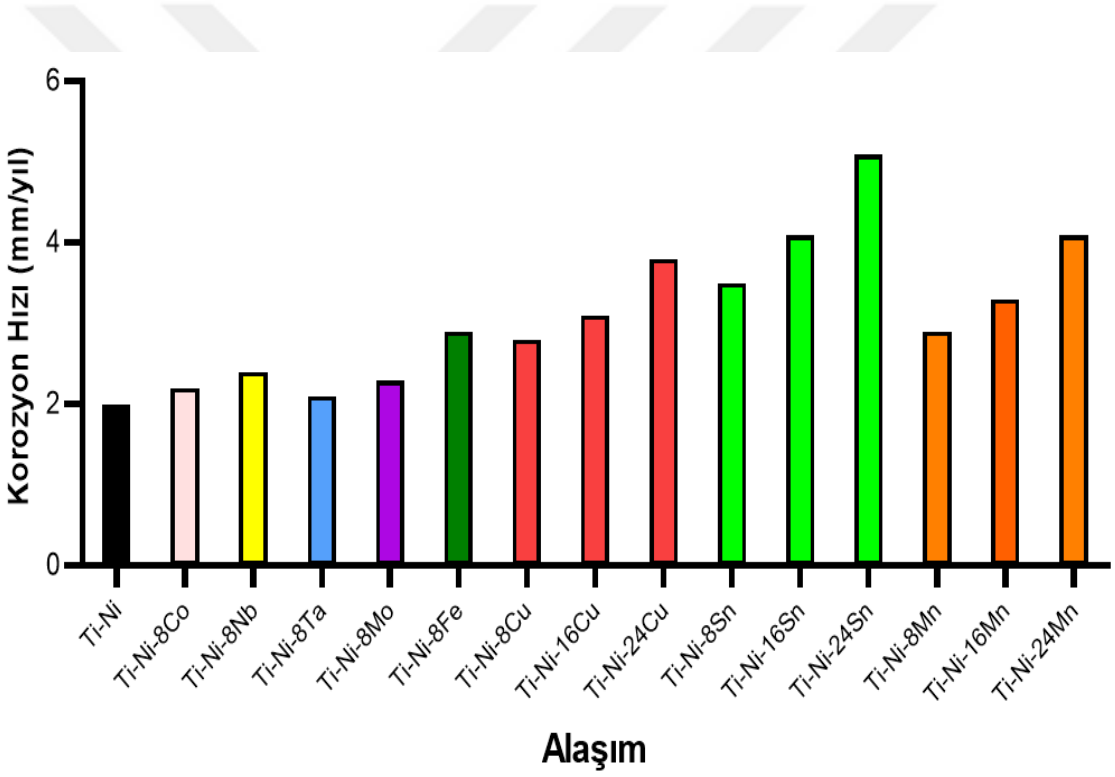
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının korozyon hızı değeri artmıştır

Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının korozyon hızı değeri artmıştır.

Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının korozyon hızı değerini artırmıştır.

En düşük korozyon hızı Ta ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

En yüksek korozyon hızı Sn ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

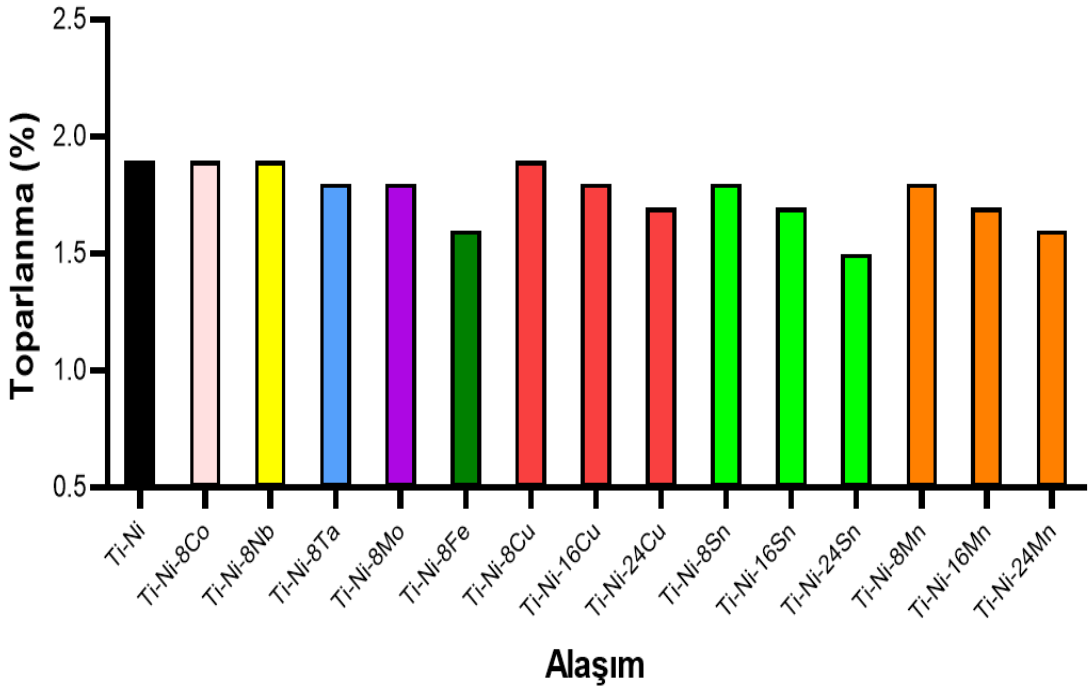


Şekil 4.11: Ni-Ti alaşımlarının korozyon hızı değerleri

4.5 ŞEKİL BELLEK ÖZELLİKLERİ

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının basma yükü uygulanması ve kaldırılması yöntemi ile belirlenen toparlanma (şekil bellek) değerleri görülmektedir.
Cu oranı arttıkça NiTi alaşımının toparlanma değeri azalmıştır.
Mn oranı arttıkça NiTi alaşımının toparlanma değeri azalmıştır.
Sn oranı arttıkça NiTi alaşımının toparlanma değeri azalmıştır.
Co, Nb, Ta, Mo, Fe ilavesi NiTi alaşımının toparlanma değerini azalmıştır.
En düşük toparlanma değeri Fe ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.
En yüksek toparlanma değeri Cu ilaveli NiTi alaşımında elde edilmiştir.

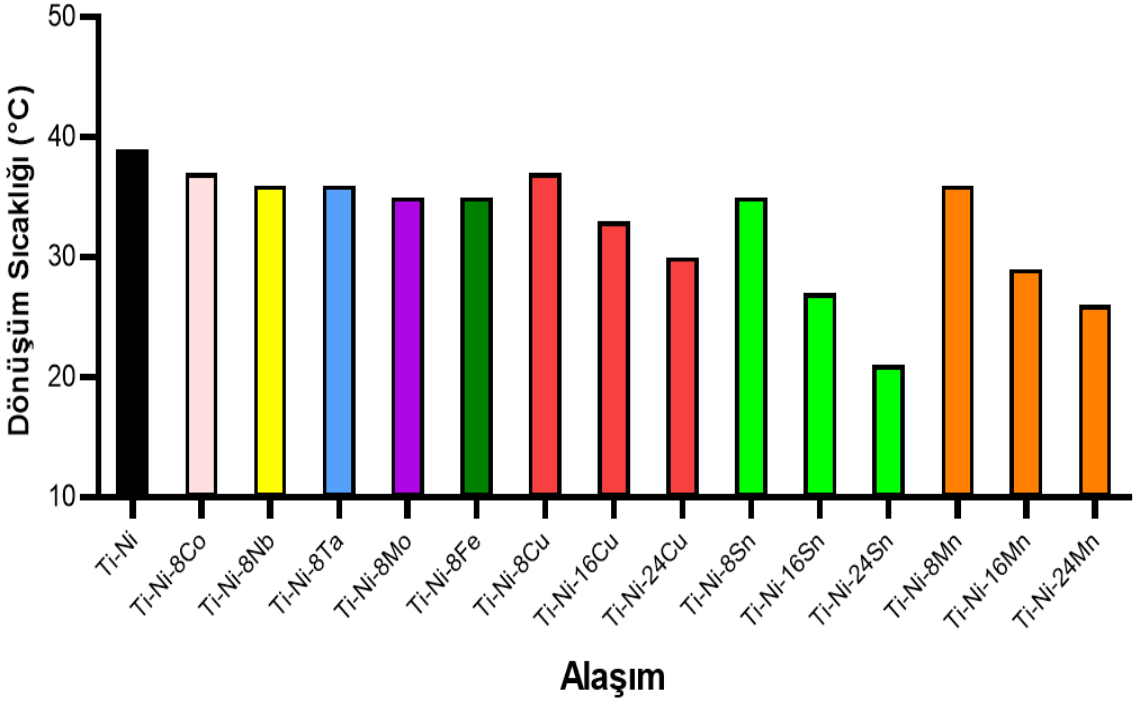
Dang ve diğ. [38] şekil bellekli Ti-Ni-Co alaşımlarını üretmişler ve % 6 Co katkısının şekil bellek özelliklerine etkisini incelemişlerdir. Ti-Ni-Co alaşımlarının %6 süperelastik toparlanma gösterdiği tespit edilmiştir.



Şekil 4.12: Ni-Ti alaşımlarının toparlanma değerleri

Diferansiyel Taramalı Kalorimetre (DSC) Sonuçları

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımlarının DSC testi ile belirlenmiş östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklığı değerleri görülmektedir. Sui [28] şekil hafızalı TiNiNbCo alaşımını üretmiş ve incelemiştir. Kobalt katkısının şekil hafıza davranışı, mikroyapı, faz dönüşüm sıcaklığına etkileri araştırılmıştır. Kobalt oranının artışı ile TiNiCo alaşımının faz dönüşüm sıcaklığının azaldığı tespit edilmiştir. Şekil hafızalı alaşımın akma mukavemetinin kobalt katkısı ile arttığı ifade edilmiştir. Young [27] kalay katkısının şekil hafızalı TiNiSn alaşımlarına etkisini araştırmıştır. Şekil hafızalı TiNiSn alaşımlarının düşük sıcaklıklarda ekonomik bir şekil hafızalı alaşım grubu olacağı sonucuna varılmıştır. Jabur ve diğ. [20] şekil hafızalı TiNi alaşımı mekanik alaşımlama-toz metalurjisi tekniği ile üretmişler ve karakterize etmişlerdir. Şekil hafızalı TiNi alaşımına ilave edilen Cr ve Al oranının alaşımın mekanik davranışına etkilerini araştırmışlardır. Şekil hafızalı TiNi alaşımına yapılan Cr ve Al katkılarının faz dönüşüm sıcaklığını arttırdığı tespit edilmiştir.

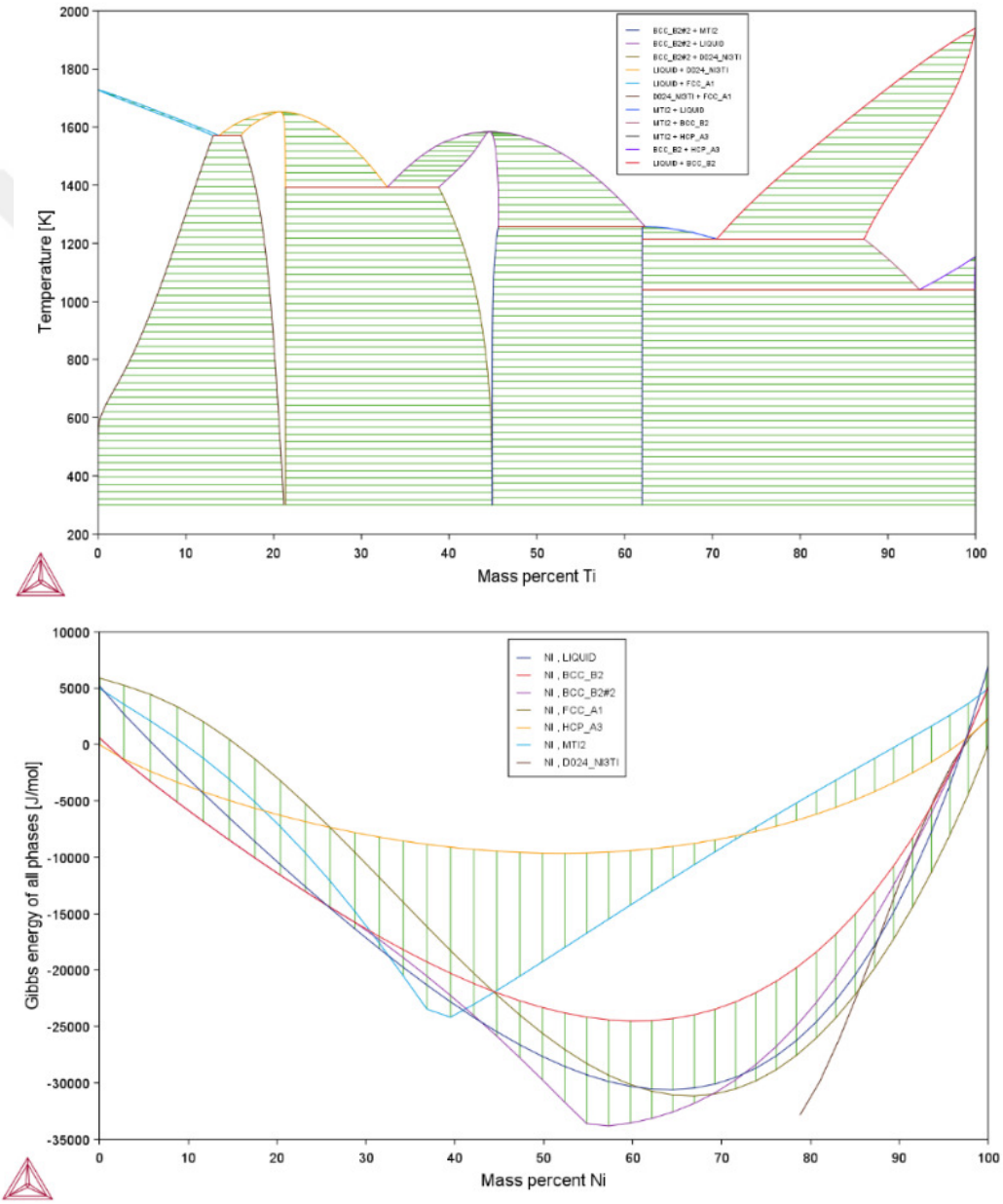


Şekil 4.13: Ni-Ti alaşımlarının dönüşüm sıcaklığı değerleri

4.6 HESAPLAMALI MALZEME BİLİMİ SONUÇLARI

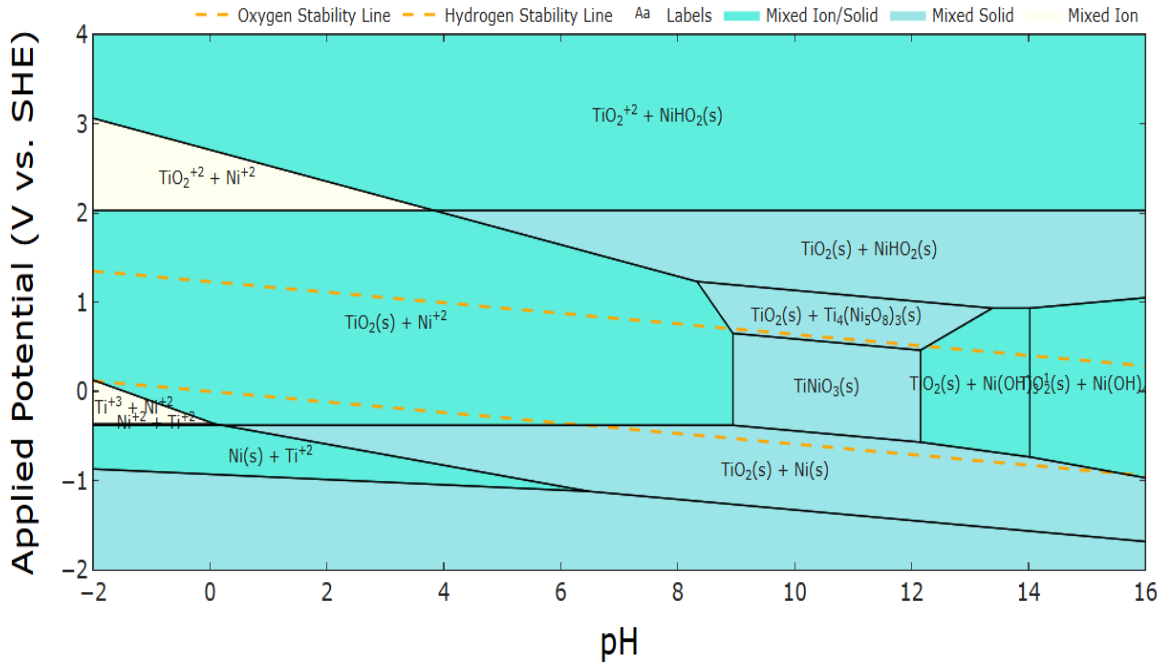
Hesaplamalı Faz Diyagramları (CALPHAD)

Aşağıdaki şekilde Ni-Ti alaşımının "*Thermo-Calc*" yazılımı ile elde edilmiş ikili faz diyagramı ve serbest enerji diyagramı görülmektedir.



Şekil 4.14: Ni-Ti ikili faz diyagramı ve serbest enerji diyagramı

Aşağıdaki şekilde "*Materials Projec*t" yazılımı ile elde edilmiş Ni-Ti, Pourbaix diyagramı (pH-V diyagramı) görülmektedir. Sıfır (0) volt ve nötr (pH 6-7) ortamda TiNi alaşımının sulu ortamda elektrokimyasal korozyona uğramayacağı söylenebilir.



Şekil 4.15: Pourbaix (V-pH) diyagramı

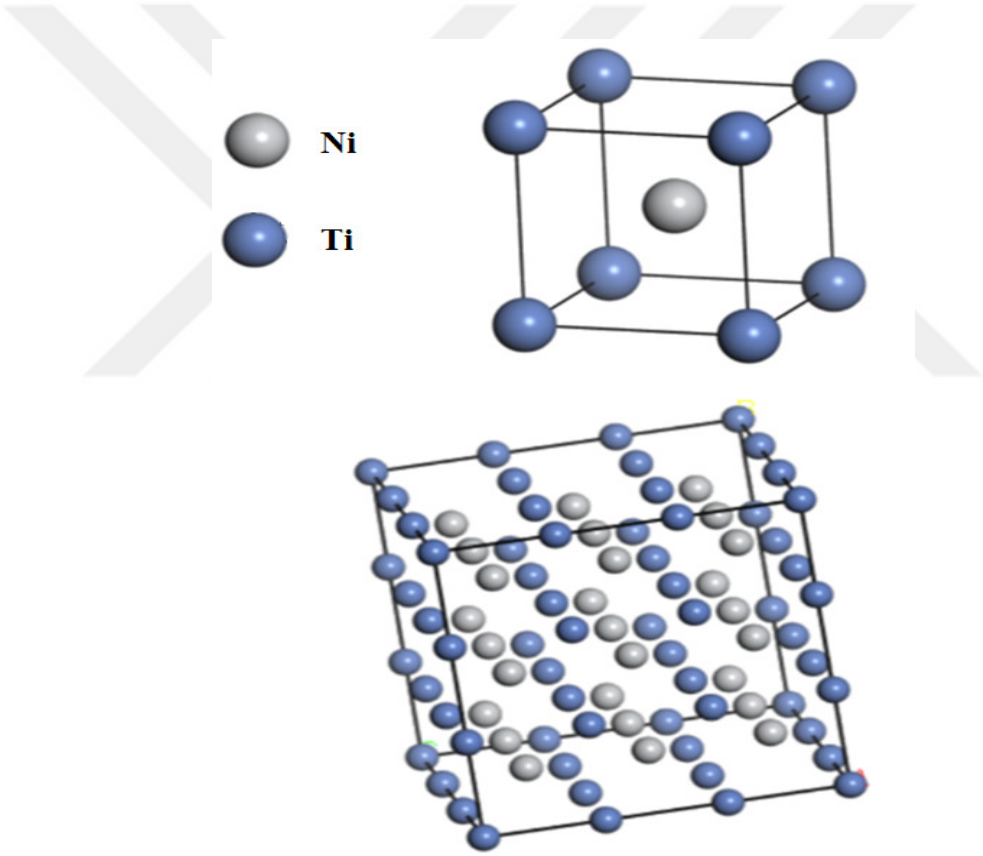
Hesaplamalı Malzeme Bilimi (CASTEP)

Bu metotta pseudo potansiyelleri kullanılmaktadır. Bu potansiyel sadece valans elektronlarında etkin olan bir potansiyeldir. CASTEP programında yoğunluk fonksiyon teorisi kullanılarak; bir malzemenin fiziksel büyüklükleri hesaplanmaktadır. Enerjinin koordinata göre birinci türevi sisteme etki eden kuvveti verir. Kuvvetler sıfır olduğunda sistemin denge durumunu elde edilir. Enerjinin birinci türevinden sistem geometrisi elde edilir (geometrik optimizasyonu).

Alaşım elementlerinin yer (kafes pozisyou) tercihleri yoğunluk fonsiyonel teorisi (DFT) ve termodinamik teori ile incelenmiştir. Pseudo-potansiyellerin hesaplanması kübik yapılar için Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) temelli "Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA)" kullanılarak yapılmıştır. Elektron-iyon etkileşimleri için ultrasoft pseudo-potansiyeller kullanılmıştır. Geometrik ve mekanik özellikler için optimize k noktaları ve kesilim kinetik enerjisi kullanılmıştır.

CASTEP yazılımı kullanılarak alaşımların çeşitli özellikleri teorik olarak hesaplanmıştır.

Aşağıdaki şekilde incelenen alaşımların birim kafesi ve hesaplamaların yapıldığı süperkafes yapısı görülmektedir. CASTEP yazılımı ile gerçekleştirilen ilk prensipler esaslı hesaplamalar için aşağıda görülen kafes yapıları oluşturulmuş ve ardından hesaplamalar süperkafes üzerinde gerçekleştirilmiştir. Yang ve diğ. [35] $Ti_{50}Ni_{50-x}Nb_x$ alaşımlarını ilk prensipler esaslı yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile incelemişlerdir. % 0, 2.08, 6.25, 8.33, 10.42, 12.5 ve 18.75 oranlarında Nb ilavesi gerçekleştirilmiştir. 2x2x3 boyutlarında 48 atom içeren B2 östenit (hacim merkezli tetragonal), B19' monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit fazı süperhücreleri oluşturulmuş ve hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Nb oranı ile beraber B2 östenit, B19' monoklinik martenzit, B19 ortorombik martenzit fazının oluşum enerjisinin arttığı tespit edilmiştir.



Şekil 4.16. NiTi a) Birim kafes ve b) süperlatis

Aşağıdaki tabloda alaşımların CASTEP kodu ile hesaplanmış kafes parametreleri ve birim kafes hacimleri değerleri görülmektedir. Görüldüğü gibi artan Ti ilavesi ile alaşımının kafes parametresi ve birim kafes hacmi bir miktar artış göstermiştir. Gou ve diğ. [17] şekil bellekli Ti-Ni-Cu alaşımlarında Cu ilavesinin alaşımına etkisini ve alaşımın kristal yapısını CASTEP programı ile incelemişlerdir. Düşük Cu ilavelerinde B2-B19[1] dönüşümünün, orta Cu ilavelerinde B2-B19-B19[1] dönüşümünün, yüksek Cu ilavelerinde B2-B19 dönüşümünün meydana geldiğini ifade etmişlerdir. Cu ilavesinin martensit latis parametrelerine (a, b ve c) ve monolitik kafes açısına etkisini incelemişlerdir. Yüksek Cu ilavelerinde monolitik yerine ortorombik martenzit meydana gelmiştir.

Tablo 4.1: Ni-Ti esaslı alaşımların kafes parametreleri.

Alaşım	a (A)	b (A)	c (A)	α (°)	β (°)	γ (°)	Hacim (A)
Ti-Ni	3,014	3,014	3,014	90	90	90	27,37
Ti-Ni-8Co	3.022	3.022	3.022	90	90	90	27.59
Ti-Ni-8Nb	3.063	3.063	3.063	90	90	90	28.73
Ti-Ni-8Ta	3.061	3.061	3.061	90	90	90	28.68
Ti-Ni-8Mo	3.052	3.052	3.052	90	90	90	28.42
Ti-Ni-8Fe	3.049	3.049	3.049	90	90	90	28.34
Ti-Ni-8Cu	3.041	3.041	3.041	90	90	90	28.12
Ti-Ni-8Sn	3.081	3.081	3.081	90	90	90	29.24
Ti-Ni-8Mn	3.033	3.033	3.033	90	90	90	27.90

Elastik Özellikler

Üretilen süperalaşımların mekanik kararlılıkları Born-Huan kübik yapı mekanik kararlılık şartları dikkate alınarak incelenmiştir. Üretilen süperalaşımların elastik sabitleri hesaplanmış ve aşağıdaki bağıntılar ile mekanik karalılık hesaplamaları gerçekleştirilmiştir.

$$C^I = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (4.1)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (4.2)$$

$$C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (4.3)$$

$$C_{11} - C_{12} > 0 \quad (4.4)$$

$$C_{44} > 0 \quad (4.5)$$

Kübik kristal kafes yapılarda C_{11}, C_{12} ve C_{44} bağımsız elastik değişkenlerdir

Genel olarak elastiklik sabitleri değerleri (C_{11}, C_{12}, C_{44}) mekanik kararlılık kriterlerini sağlamakta olup alaşımların kararlı oldukları söylenebilir.

C^I değerinin negatif olması alaşımın kararsız olduğu, pozitif olması kararlı olduğu anlamına gelmekte olup, tüm C^I değerleri pozitif olduğundan mekanik kararlılık şartı sağlanmaktadır.

Anizotropi katsayısı (A), alaşımın anizotropisi hakkında bilgi vermekte olup 1.0 değeri izotropik davranışı 1.0 değerinden farklı olması anizotropiyi göstermektedir. Genel olarak alaşımların anizotropi değerleri birbirine yakın olup 2.0 değeri yakınındadır.

Aşağıdaki tabloda üretilen alaşımların CASTEP kodu ile hesaplanmış elastiklik sabitleri değerleri (C_{11}, C_{12}, C_{44}) ve anizotropi parametresi (A) görülmektedir.

Tablo 4.2: Ni-Ti esaslı alaşımların elastik parametreleri.

Alaşım	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	C^I (GPa)	A
Ti-Ni	209	142	46	33	1.9
Ti-Ni-8Co	109	79	29	15	1,9
Ti-Ni-8Nb	109	80	28	14,5	1,9
Ti-Ni-8Ta	109	81	29	14	2,0
Ti-Ni-8Mo	109	81	29	14	2,0
Ti-Ni-8Fe	110	80	30	15	2.0
Ti-Ni-8Cu	106	78	27	14	1,9
Ti-Ni-16Cu	110	80	30	15	2.0
Ti-Ni-24Cu	106	78	27	14	1,9
Ti-Ni-8Sn	104	77	25	13,5	1,8
Ti-Ni-16Sn	108	79	28	14,5	1,9
Ti-Ni-24Sn	106	78	27	14	1,9
Ti-Ni-8Mn	104	77	25	13,5	1,8
Ti-Ni-16Mn	108	79	28	14,5	1,9
Ti-Ni-24Mn	110	80	30	15	2.0

Mekanik Özellikler

Tez kapsamında üretilen alaşımların Bulk modülü (B), Kayma modulu (G), Young's modülü (E), Poisson oranı (ρ), sertlik (H) değerleri aşağıdaki formüller kullanılarak hesaplanmıştır ve değerlendrilmiştir.

$$\mathrm{E} = \frac{1}{5}\left(3C_{44} + C_{11} - C_{12}\right) \tag{4.6}$$

$$\mathrm{B} = \frac{1}{3}\left(C_{11} + 2C_{12}\right) \tag{4.7}$$

$$\mathrm{G} = \frac{\mathrm{C_{11}} - \mathrm{C_{12}} + 3\mathrm{C_{44}}}{5} \tag{4.8}$$

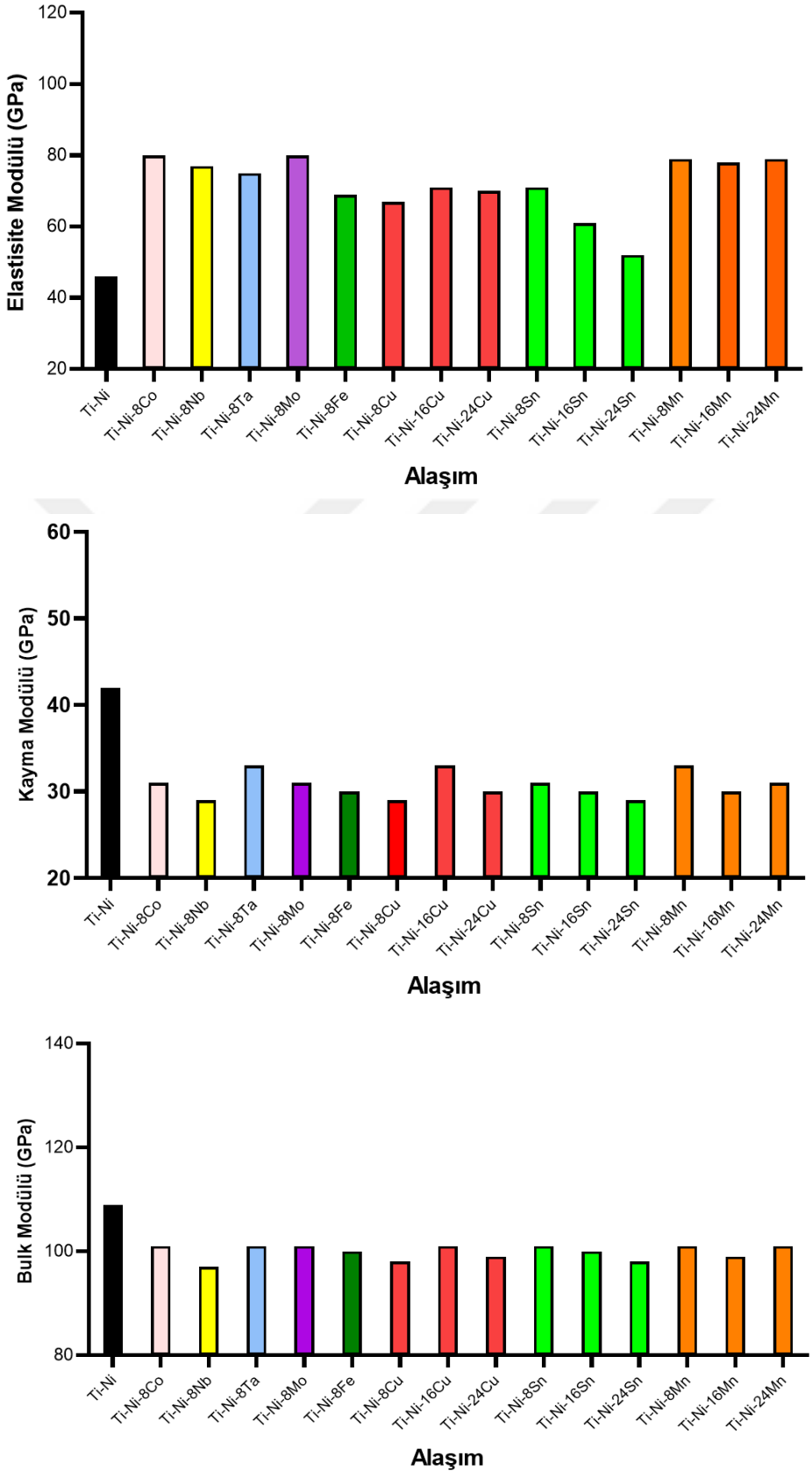
$$\rho = \frac{3\mathrm{B} - 2\mathrm{G}}{2(3B + G)} \tag{4.9}$$

$$\left(H_V\right)_{Tian} = 0.92\left(\frac{\mathrm{G}}{\mathrm{B}}\right)^2 G^{0.708} \tag{4.10}$$

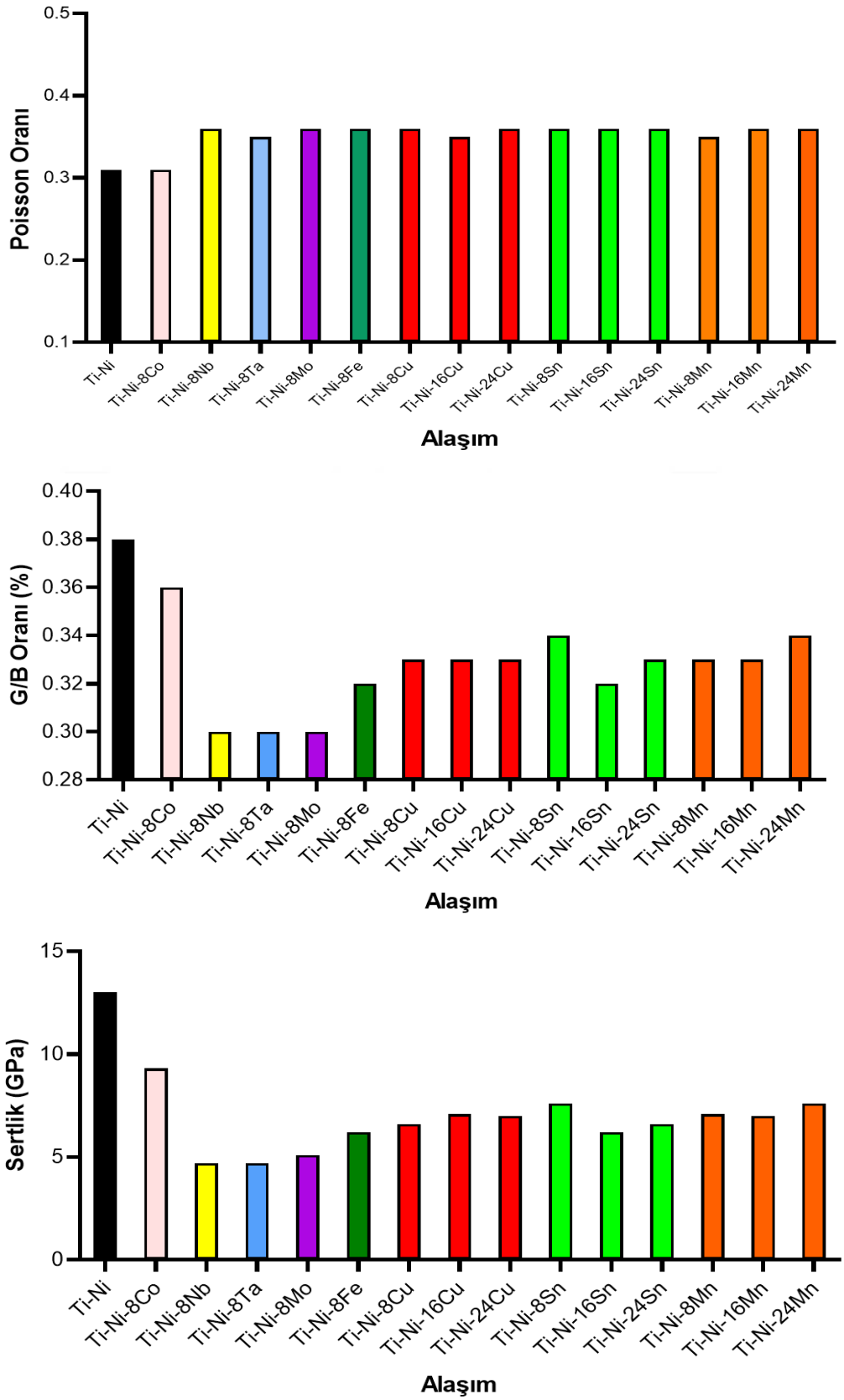
Aşağıda alaşımların CASTEP kodu ile hesaplanmış Bulk modülü (B), Kayma modülü (G), Young modülü (E), Poisson oranı (ρ), G/B oranı (Pugh oranı), sertlik değeri (H) görülmektedir.

Genel olarak Poisson oranı bağ yapısı, plastik deformasyon kapasitesi ve süneklik hakkında bilgi vermekte olup 0.3 ve üzerinde sünek davranış görülmektedir. Gevrek ve kovalent malzemelerde Poisson oranı yaklaşık 0.1 değerindedir.

Pugh değeri sünek-gevrek davranış için bir kriter olup 0.57 değerinden düşük olması sünek karakteri işaret etmektedir.



Şekil 4.17. Alaşımların hesaplanan teorik elastiklik modülleri



Şekil 4.18. Alaşımların hesaplanan teorik mekanik özellikleri

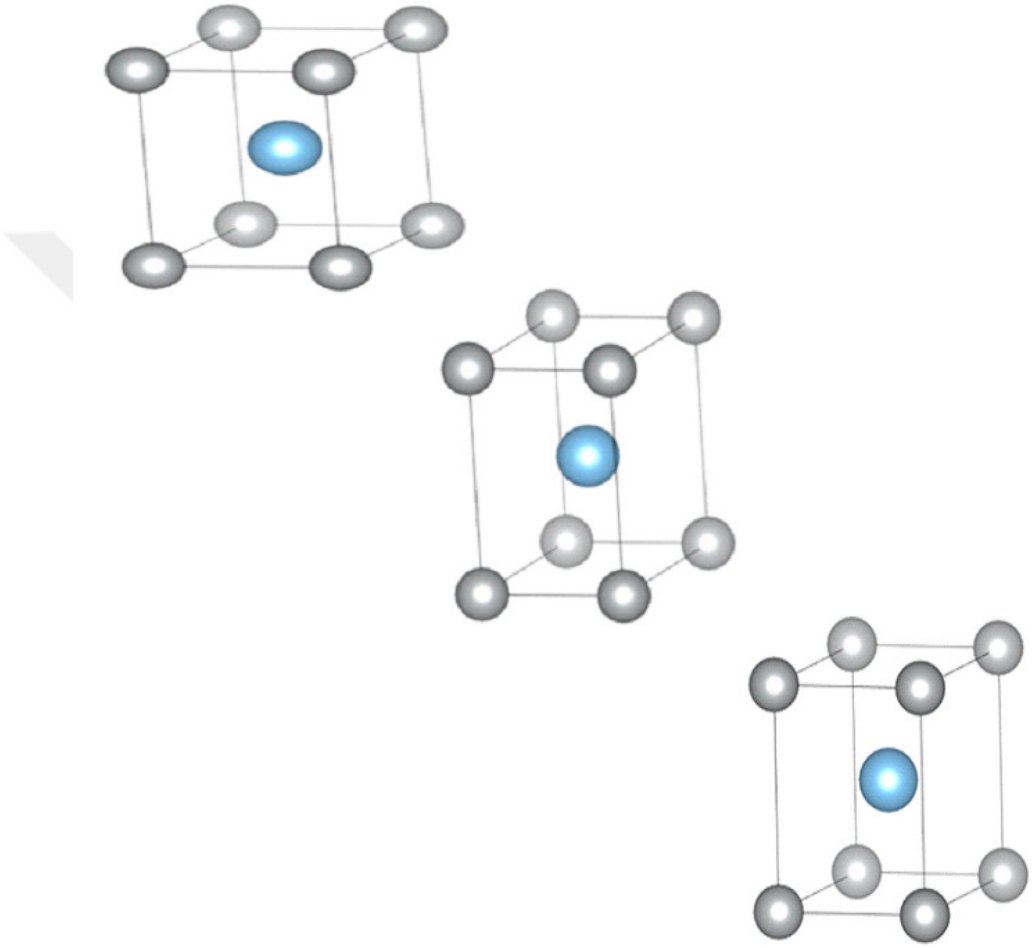
Aşağıdaki tabloda şekil bellekli alaşımların Fermi enerji seviyesinde (E_f) enerji değerleri görülmektedir. Genel olarak Fermi enerji seviyesinde (E_f) enerji seviyesinin düşük değerde olan alaşımın nispeten daha kararlı olduğu söylenebilir. TiNi esaslı alaşımlarda genel olarak alaşım elementleri kararlılığı azaltmakta olup kararlılığı en düşük olan alaşımlar Co ve Cu katkılı alaşımlar olup kararlılığı en yüksek alaşım Nb katkılı alaşımdır.

Tablo 4.3: Ni-Ti esaslı alaşımlar8n enerji seviyeleri.

Alaşım	E (eV)
Ti-Ni	10
Ti-Ni-8Co	29
Ti-Ni-8Nb	24
Ti-Ni-8Ta	25
Ti-Ni-8Mo	26
Ti-Ni-8Fe	25
Ti-Ni-8Cu	28
Ti-Ni-16Cu	29
Ti-Ni-24Cu	31
Ti-Ni-8Sn	25
Ti-Ni-16Sn	28
Ti-Ni-24Sn	30
Ti-Ni-8Mn	26
Ti-Ni-16Mn	28
Ti-Ni-24Mn	33

Faz Kararlılığı ve Faz Dönüşüm Sıcaklığı

Alaşımların fazlarının kararlılığının ve östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklığının incelenmesi kapsamında ffazların oluşum enerjileri hesaplanmıştır. Öncelikle alaşımlarda olası fazların birim hücreleri ve süperlatisleri oluşturulmuştur. Aşağıdaki şekilde TiNi sisteminde B2 (östenit), B19 (ortogonal martenzit) ve B19' (monoklinik martenzit) faz yapıları görülmektedir.



Şekil 4.19: TiNi sisteminde B2, B19 ve B19' yapıları

48 atom içeren Ti-Ni-X, alaşımları süper-latis için oluşum enerjisi aşağıdaki bağıntılar ile hesaplanmıştır.

$$E_{olusum} = \frac{E_{toplam} - [xE_{Ti} + yE_{Ni} + zE_X]}{48} \quad (4.11)$$

48 atom içeren Ti-Ni-X, alaşımları süper-hücre için faz kararlılık oluşum enerjileri aşağıdaki bağıntılar ile hesaplanmıştır.

$$\Delta E_{B19} = E_{B2} - E_{B19} \quad (4.12)$$

$$\Delta E_{B19'} = E_{B2} - E_{B19'} \quad (4.13)$$

$$\Delta E \propto T_{donusum} \quad (4.14)$$

Yang ve diğ. [33] TiNiPt şekil bellekli alaşımlarını ilk prensipler temelli yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile teorik olarak incelemişlerdir. Pt arttıkça latis parametresinin arttığını tespit etmişlerdir. %12 Pt ilavesinde B19' fazını oluştuğunu %15 Pt değerinde B19 fazının daha kararlı olduğunu tespit etmişlerdir. Faz dönüşüm sıcaklığının östenit ile martenzit arasındaki oluşum enerjisi farkına (ΔE) bağlı olduğunu tespit etmişlerdir. ΔE değerinin artması ile dönüşüm sıcaklığının arttığını tespit etmişlerdir. B2, B19', B19 birim hücre ve 2x2x3 süperhücre oluşturulmuş ve analiz edilmiştir. En yüksek oluşum enerjisine B2 fazının sahip olduğu, B19' fazının en düşük oluşum enerjisine sahip olduğu bulunmuştur. NiTi ve NiTiPt alaşımlarının DOS grafiklerinde, fermi enerji seviyesi üzerinde Ti atomlarının de seviyeleri, fermi enerji seviyesinin altında ise Ni atomlarının d seviyelerinin etkin olduğu tespit edilmiştir.

Tablo 4.4: Ni-Ti esaslı alaşımlarının faz dönüşüm sıcaklıkları.

Alaşım	ΔE_{B19} (meV/atom)	$\Delta E_{B19'}$ (meV/atom)	$T_{dönüsüm}$ (°C)
Ti-Ni	78	68	49
Ti-Ni-8Co	94	82	59
Ti-Ni-8Nb	107	93	67
Ti-Ni-8Ta	97	85	61
Ti-Ni-8Mo	72	63	45
Ti-Ni-8Fe	105	92	66
Ti-Ni-8Cu	88	77	55
Ti-Ni-16Cu	84	74	53
Ti-Ni-24Cu	94	82	59
Ti-Ni-8Sn	78	68	49
Ti-Ni-16Sn	72	63	45
Ti-Ni-24Sn	62	54	39
Ti-Ni-8Mn	83	72	52
Ti-Ni-16Mn	80	70	50
Ti-Ni-24Mn	60	53	38

5 TARTIŞMA

Bu tez kapsamında, biyomedikal uygulamalar için şekil bellekli alaşımların üretimi ve karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir. Öncelikle, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımlar geleneksel toz metalurjisi (peresleme-sinterleme) yöntemi ile üretilmiştir. Ayrıca hesaplamalı malzeme bilimi esaslı çalışmalar çeşitli yazılımlar ve teoriler kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Teorik çalışmalarda ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel teorisi kullanılmış, alaşımların elastiklik özellikleri, mekanik özellikleri ve faz dönüşüm sıcaklığı hesaplanmıştır. Genel olarak şekil bellekli alaşımlar, belirli bir deformasyona uğratıldıktan sonra, uygulanan sıcaklık veya gerilmelere (kuvvet) bağlı olarak önceki şeklini hatırlayan ve ilk şekline geri dönebilen malzemelerdir. Tez kapsamında, şekil bellekli Ni-Ti (nitinol) esaslı alaşımların koroner stent uygulamaları için geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Karakterizasyon kapsamında, toz metalurjisi yöntemi ile üretilen şekil bellekli alaşımların mikroyapısı ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Şekil bellekli alaşımların sertlik, mukavemet, aşınma, elastisite modülü gibi temel mekanik özellikleri belirlenmiştir. Şekil bellekli alaşımların elektrokimyasal korozyon testleri yapay vücut sıvısı içerisinde gerçekleştirilmiştir. Son olarak ilk prensipler esaslı yoğunluk fonsiyonel teorisi ile belirlenen mekanik özellikler ve faz dönüşüm sıcaklıkları deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır

Tez kapsamında alaşımlar mekanik alaşımlama-toz metalurjisi yöntemi ile üretilmiştir. Hammadde olarak kullanılan metal tozları karmaşık şekilli olup, homojen boyut dağılımına sahip oldukları söylenebilir. Sinterlenmiş numunelerin mikroyapısında gözenek bulunmadığı da görülmektedir. SEM fotoğraflarına bakıldığı zaman yeterli bir sinterlenme meydana geldiği söylenebilir. Sinterlenmiş Ti-Ni alaşımının mikroyapısı alfa (α) matris ve tane sınırlarında bir miktar intermetalik bileşikten oluşmaktadır. Ayrıca bir miktar kalıntı östenit bulunmaktadır..

İlk prensipler yoğunluk fonsiyonel teorisi (DFT) çalışmasına göre alaşımların elastiklik sabitleri değerleri (C_{11}, C_{12}, C_{44}) mekanik kararlılık kriterlerini sağlamakta olup tüm alaşımların mekanik olarak kararlı oldukları söylenebilir. C^I değerinin negatif olması alaşımın kararsız olduğu, pozitif olması kararlı olduğu anlamına gelmekte olup, tüm C^I değerleri pozitif olduğundan tüm alaşımların mekanik kararlılık şartı sağlanmaktadır. Anizotropi katsayısı (A), alaşımın anizotropisi hakkında bilgi vermekte olup 1.0 değeri izotropik davranışı 1.0 değerinden farklı olması anizotropiyi göstermektedir. Genel olarak tüm alaşımların anizotropi değerleri birbirine yakın olup 2.0 değeri yakınındadır. Durum yoğunluğu (DOS) grafiği bir metalik alaşımın kararlılığı hakkında bilgi vermekte olup, inc elenen tüm alaşımların 0 eV değerinde bulunan Fermi enerji seviyesinde (E_f) yüksek değerde olduğundan alaşımın kararlı olduğunu söylemek mümkündür. Ayrıca Fermi enerji seviyesinin (E_f) sağ tarafında elektron varlığı metalik karakter ve elektriksel iletkenliğinin olduğunu göstermektedir. Ayrıca, d-seviyesi katkısının baskın olduğu s-seviyesi ve p –seviyesinin katkısının nispeten az olduğunu söylenebilir.

Tablo 5.1: Alaşım elementlerinin özelliklere etkileri

	Dönüşüm Sıcaklığı	Yoğunluk	Elastisite Modülü	Sertlik	Aşınma	İletkenlik	Korozyon Direnci	Fiyat
Co	-	-	+++	+++	+++	+	-	--
Ta	-	---	++	+	+	+	-	---
Mo	-	--	++	+++	+++	+	-	--
Nb	-	--	++	+	+	+	-	---
Fe	-	-	++	+	+	+	--	+++
Cu	-	-	++	++	++	+++	-	++
Mn	-	-	+	--	-	+	--	++
Sn	-	-	--	---	---	-	---	+++

Aşağıdaki tablolarda ilk prensipler yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) esaslı hesaplamalı malzeme bilimi (CASTEP) yazılımı ile elde edilen sonuçlar ile deneysel sonuçların karşılaştırılması görülmektedir. Alaşımlarının teorik elastisite modülleri ile deneysel belirlenmiş elastisite modülleri arasında yaklaşık % 40-60 fark oluşmuştur. Genel olarak mevcut bilgisayar kapasitesinden dolayı belirli boyutta süperlatis üretilebilmesi ve hesaplamaların hassas (fine) yerine orta hassasiyet (medium) modunda gerçekleştirilmesi sonucu teorik ve deneysel veriler arasında fark oluştuğu kanaatine varılmıştır. Ayrıca deneysel alaşımlarda mikroyapıda kalıntı fazların bulunması ve tamamen homojen yapı olmaması ve kafes hatalarının bulunmasının sonuçları etkildiği söylenebilir.

Tablo 5.2: Alaşımların deneysel ve hesaplamalı elastisite modülleri

Alaşım	CASTEP Elastisite Modülü (GPa)	Ultrasonik Elastisite Modülü (GPa)	Fark (%)
Ti-Ni	46	40	15
Ti-Ni-8Co	80	43	86
Ti-Ni-8Nb	77	43	79
Ti-Ni-8Ta	75	44	70
Ti-Ni-8Mo	80	45	77
Ti-Ni-8Fe	69	43	60
Ti-Ni-8Cu	67	42	59
Ti-Ni-16Cu	71	43	65
Ti-Ni-24Cu	70	47	48
Ti-Ni-8Sn	71	37	91
Ti-Ni-16Sn	61	33	84
Ti-Ni-24Sn	52	30	73
Ti-Ni-8Mn	79	41	92
Ti-Ni-16Mn	78	43	81
Ti-Ni-24Mn	79	45	75

Aşağıdaki şekilde şekil bellekli alaşımların CASTEP yazılımı ile hesaplanmış teorik östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklıklar ve DSC testiyle belirlenmiş deneysel östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklığı değerleri görülmektedir. Alaşımların teorik faz dönüşüm sıcaklıkları ile deneysel faz dönüşüm sıcaklıkları arasında % 1-30 fark oluşmuştur. Mevcut bilgisayar kapasitesinden dolayı belirli boyutta süperlatis üretilebilmesi ve hesaplamaların hassas yerine orta hassasiyet modunda gerçekleştirilmesi sonucu teorik ve deneysel veriler arasında fark oluştuğu kanaatine varılmıştır.

Tablo 5.3: Alaşımların deneysel ve hesaplamalı dönüşüm sıcaklıkları

Alaşım	CASTEP T_{donusm} (°C)	DSC $T_{donusum}$ (°C)	Fark (%)
Ti-Ni	49	39	25
Ti-Ni-8Co	59	37	59
Ti-Ni-8Nb	67	36	86
Ti-Ni-8Ta	61	36	69
Ti-Ni-8Mo	45	35	28
Ti-Ni-8Fe	66	35	88
Ti-Ni-8Cu	55	37	48
Ti-Ni-16Cu	53	33	60
Ti-Ni-24Cu	59	30	96
Ti-Ni-8Sn	49	35	40
Ti-Ni-16Sn	45	27	66
Ti-Ni-24Sn	39	21	85
Ti-Ni-8Mn	52	36	44
Ti-Ni-16Mn	50	29	72
Ti-Ni-24Mn	38	26	46

6 SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu yüksek lisans tezi kapsamında aşağıdaki amaçlar gerçekleştirilmiştir;

- Şekil bellekli TiNi esaslı alaşımların toz metalurjisi yöntemi ile üretilmesi
- Alaşım elementlerinin TiNi alaşımlarının özelliklerine etkilerinin incelenmesi
- Üretilen şekil bellekli TiNi esaslı alaşımların deneysel sonuçları ve aynı alaşımların hesaplamalı malzeme mühendisliği (ilk prensipler temelli yoğunluk fonksiyonel teorisi) ile belirlenmiş teorik sonuçlarının karşılaştırılması.

Öncelikle şekil bellekli malzemelerin üretimi ve karakterizasyonu gerçekleştirilmiştir. Şekil bellekli Ni-Ti esaslı, alaşımlar toz metalurjisi (peresleme-sinterleme) yöntemi ile üretilmişti ve karakterize edilmiştir. Her bir şekil bellekli alaşım grubuna çeşitli alaşım elementleri ilave edilerek özgün şekil bellekli alaşımlar üretilmiş ve alaşım elementlerinin alaşımların özelliklerine etkileri incelenmiştir.

Üretilmiş olan tüm alaşımlar için ilk prensipler temelli yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) yaklaşımı kullanılarak teorik çalışmalar gerçekleştirilmiş ve NiTi, esaslı çeşitli alaşım elementi içeren şekil bellekli alaşımların teorik fiziksel, mekanik, elektronik özellikleri tespit edilmiştir.

Genel Sonuçlar:

(1) Ti-Ni esaslı, şekil bellekli alaşımlar toz metalurjisi yöntemi ile çatlama/şişme/distorsiyon olmadan ve oksitlenme yaşanmadan istenen kompozisyonlarda başarı ile üretilmiştir.

(2) Ti-Ni esaslı, alaşımlar % 1-2 arasında şekil bellek özelliği (toparlanma) göstermiştir.

(3) Ti-Ni esaslı, şekil bellekli alaşımlarının CASTEP yazılımı ile teorik hesaplanmış elastisite modülleri ile ultrasonik yöntemle deneysel belirlenmiş elastisite modülleri arasında yaklaşık % 40-60 fark oluşmuştur. Genel olarak mevcut bilgisayar kapasitesinden dolayı belirli boyutta süperlatis üretilebilmesi ve hesaplamaların hassas (fine) yerine orta hassasiyet (medium) modunda gerçekleştirilmesi sonucu teorik ve deneysel veriler arasında fark oluştuğu kanaatine varılmıştır. Ayrıca deneysel alaşımlarda mikroyapıda kalıntı fazların bulunması ve tamamen homojen yapı olmaması ve kafes hatalarının bulunmasının sonuçları etkildiği söylenebilir.

(4) CASTEP yazılımı ile hesaplanmış elastisite modülleri ile deneysel belirlenmiş elastisite modülleri alaşımların etkisi açısından benzer eğilim göstermiştir

(5) Ti-Ni esaslı, şekil bellekli alaşımlarının CASTEP yazılımı ile hesaplanmış teorik östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklıkları ile DSC testiyle belirlenmiş deneysel östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklıkları arasında % 1-30 fark oluşmuştur. Mevcut bilgisayar kapasitesinden dolayı kısıtlı boyutta süperlatis üretilebilmesi ve hesaplamaların orta hassasiyette gerçekleştirilmesi sonucu teorik ve deneysel veriler arasında fark oluşmuştur. Ayrıca mikroyapıda kalıntı fazların bulunması sonuçları etkilemektedir.

(6) CASTEP yazılımı ile teorik olarak hesaplanmış östenit-martenzit faz dönüşüm sıcaklıkları ile deneysel olarak belirlenmiş dönüşüm sıcaklıkları alaşımların etkisi açısından benzer eğilim göstermiştir

KAYNAKLAR

[1] https://sprintmedical.in/blog/application-of-biomaterial-in-healthcare [07.01.2025]

[2] Hasırcı V. Hasırcı N. 2018, *Fundamentals of Biomaterials*. Springer, New York, USA.

[3] Hermawan H, *Biodegradable Metals, From Concepts to Applications*. 2012, Springer, London, UK

[4] Ratner B, Biomaterials Science, An Introduction to Materials in Medicine, 2004, Elsevier.

[5] Park J.B, Bronzino J.D, *Biomaterials, Principles and Applications*, 2007, CRC Press, New York, USA.

[6] Ren X., Das R., Tran P., Ngo T.G., Xie Y.M., 2018, *Smart Mater. Struct*. 27, 114-173.

[7] Ielo I, Giacobello F, Sfameni S, Rando G, Galletta M, Trovato V, Rosac G, Plutino M.R. Nanostructured Surface Finishing and Coatings: Functional Properties and Applications. *Materials* 2021, *14*, 2733

[8] Hamidi Y.A.. 2017, *Multivariable feedforward control of vibrations in multi-axes flexible structures: applications to multi-axes piezoelectric actuators*, Doktoral Thesis, Universite Bourgogne, France

[9] Velipaşaoğlu M.S., *The determination of fuctional fatigue life of high temperature shape memory alloys after cold Rolling process*, 2020, Yüksek Lisans Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Makine Mühendisliği.

[10] https://www.comsol.com/blogs/the-elephants-of-materials-science [ziyaret: 06.01.2025]

[11] https://fab.cba.mit.edu/classes/961.04/people/will/proposal.htm [ziyaret: 06.01.2025]

[12] Lesar R. *Computational materials science, Fundamentals to applications*. 2013, MRS. Cambridge University Press.

[13] Lee J.G. *Computational materials science, An introduction. Second Edition*, 2017, CRC Press.

[14] Lusk M.T, Mattsson A.E. *High-performance computing for materials design to advance energy science*. 2011. MRS Bulletin

[15] https://www.castep.org/features/capabilities/electronic-properties [ziyaret: 06.01.2025]

[16] Clark, S. J.; Segall, M. D.; Pickard, C. J.; Hasnip, P. J.; Probert, M. J.; Refson, K.; Payne, M. C. First principles methods using CASTEP, *Zeitschrift fuer Kristallographie*, 220 (5-6), 567-570 (2005).

[17] Gou L, Liu Y. Ng T.Y, Effect of Cu Content on Atomic Positions of Ti50Ni50−*x*Cu*x* Shape Memory Alloys Based on Density Functional Theory Calculations, *Metals* 2015, *5*, 2222-2235

[18] Kumar P, Waghmare U.V, First-principles phonon-based model and theory of martensitic phase transformation in NiTi shape memory alloy, *Materialia* 9 (2020) 100602

[19] Mermer E, 2023, Havacılık ve Uzay Sanayinde Kullanılmak Üzere Yeni Bir Titanyum Alaşımı Geliştirilmesi ve Mekanik Özelliklerinin Araştırılması, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği

[20] Jabur A.S., Al-Haidary J.T.., Al-Hasani E.S., 2013, Journal of Alloys and Compounds, 578, 136-142.

[21] Eda T. Khantachawana A., Umeda J., Kondoh K., 2019, Materials Transactions, 60, 8, 1583-1590.

[22] Yaşar F, 2006. Thermomechanical Characterization of Ti-rich TiNi Shape Memory Alloys, Yüksek Lisans Tezi, ODTÜ.

[23] Aydoğmuş T, 2010. *Processing andl Characterization of Porous Titanium-Nickel Shape Memory Alloys*, Doktora Tezi, ODTÜ.

[24] Wang Z.G., Zu X.T, J.Y. Dai, P. Fu, X.D. Feng. *Materials Letters* 57 (2003) 1501-1507

[25] Aköz S., 2015. *Nikel-Titanyum Şekil Bellekli Alaşımının Toz Enjeksiyon Kalıplama ile Üretimi ve Üretim Parametrelerinin Belirlenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi.

[26] Tanış N.A., 2015, *Bakır ve Titanyum İlaveli Ni-Ti Şekil Bellekli Alaşımının Toz Enjeksiyon Kalıplama ile Üretilebilirliğinin İncelenmesi*, Gazi Üniversitesi, Yüksek Lisans Tezi

[27] Young A.W, Torgerson T. Ley N.A. Gomez K. Benafan O. Young M.L. Shap. Mem. Superelasticity 5, 2019:125-135

[28] Sui J.H., Z.Y. Gao, Y.F. Li, Z.G. Zhang, W. Cai. 2009, *Materials Science and Engineering A* 508, 33-36

[29] Young B, Haghgouyan B, Lagoudas D.C, Karaman I. 2019, *Shape Memory and Superelasticity*.

[30] Salvetr P, Skolakovs A, Novak P. *Kovove Mater*. 2017, 55-379-383

[31] Keskin B, 2022, *Kendiliğinden ilerleyen Yüksek Sıcaklık Sentezi (SHS) ile Şekil Hafızalı Ni-Ti-X (X= Cu, Nb, Fe vb.) Alaşımlarının Üretimi ve Karakterizasyonu*, Doktora Tezi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği, İTÜ

[32] Dilibal S., 2005, Nikel-Titanyum Şekil Bellekli Alaşım Üretimi ve Şekil Bellek Üretimi, Doktora Tezi, YTÜ, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği

[33] Yang X, Shang J. 2021, Ab Initio Study of Martensitic Transformation in NiTiPt High Temperature Shape Memory Alloy, *Applied Scinces* 11, 6878

[34] Yang X, Ma L. Shang J. 2019, Martensitic transformation of Ti50(Ni50−*x*Cu*x*) and Ni50(Ti50−*x*Zr*x*) shape-memory alloys, *Sceintific Reports* 9, 3221

[35] Yang X. Shang J. 2021, Electronic Mechanism of Martensitic Transformation in Nb-doped NiTi Alloys: A First-Principles Investigation, *ACS Omega* 6, 22033

[36] Kim J. Im Y. Noh J. Miyazaki S. Nam T. 2011, Microstructures and martensitic transformation behavior of Ti–Ni–Sn alloys, *Scripta Materialia* 65, 608

[37] Ishida A. Sato M. Ogawa K. Yamada K. 2006, Shape memory behaviour of Ti-Ni-Cu thin films, *Materials Science Engineering A*, 438

[38] Dang P. Zhang L. Zhou Y. Liang Q. Ding X. Sun J. 2023, Cryogenic superelasticity and elastocaloric effect in a nanostructured Ti-Ni-Co alloy, *Scripta Materialia*, 236

[39] Li G. Li Z. Liu Z. 2025, Study on the phase stability, mechanical and half-metallic properties of half-Heusler alloys FeMnZ (Z = Si, Ge and Sn), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 614, 172742

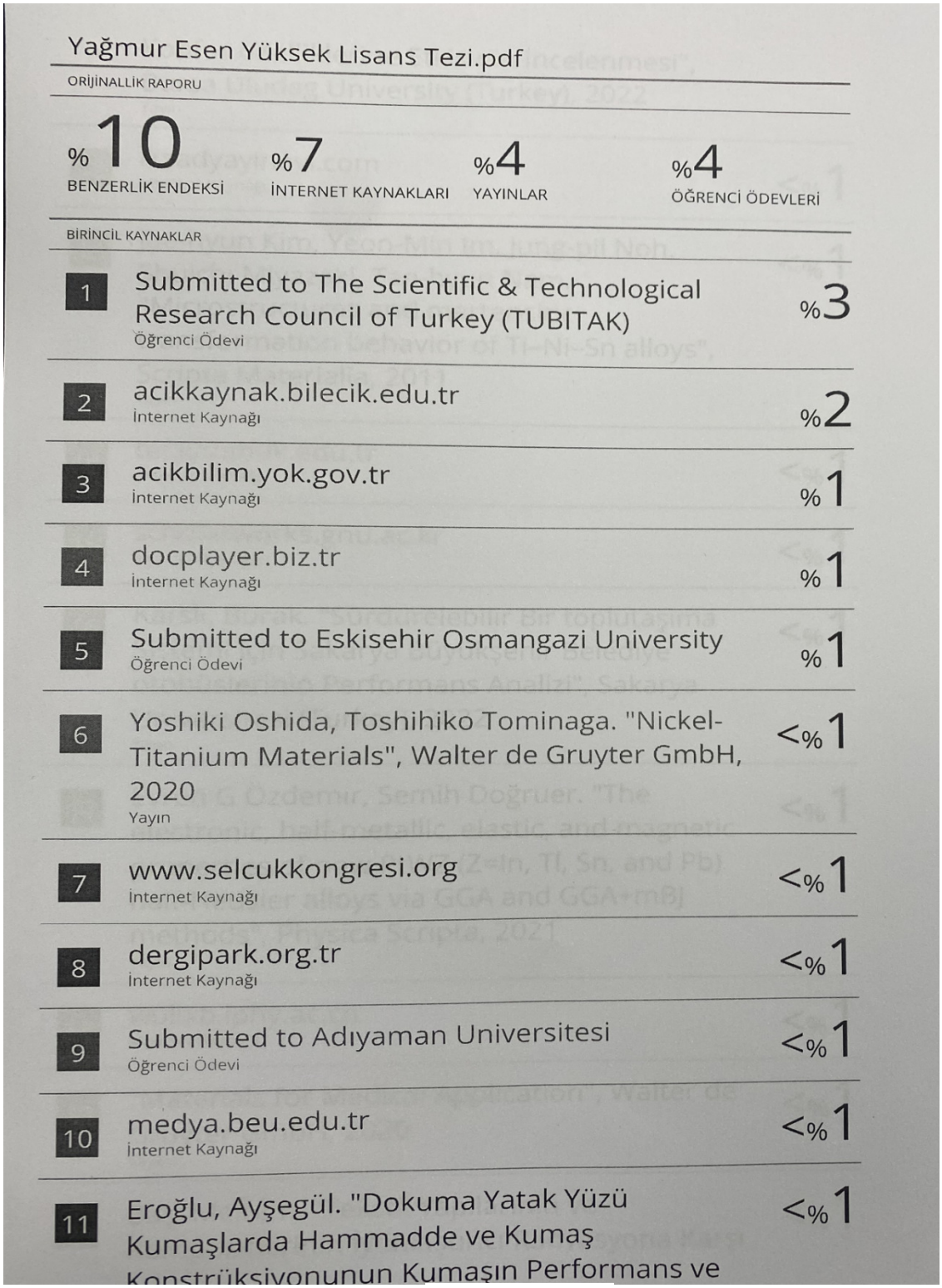
[40] Zaki H.H.M, Sholihin M.H.M, Abdullah J., Sarifuddin N. Comparison Studies on Phase Formation and Transformation Behavior between Ni-Ti and Ni-TiH2 Synthesized via Solid State Sintering. International Journal of Current Science, Engineering & Technology

[41] Roman A, Cimpoes R, Pricop B, M.M, Zegan G, Cimpoes N, Ivanescu M.C. Investigations on the Degradation Behavior of Processed FeMnSi-xCu Shape Memory Alloys. Nanomaterials 2024, 14, 330.

[42] Dmitrievskiy A. Komarov V. Karelin R. Friction and Wear Resistance of Nanostructured TiNi Shape Memory Alloy. *Metals* 2024, *14*(11), 1248;

[43] Hao S, Cui L, Jiang Jiang1, Guo F, Brown D.E. Ren Y. A novel multifunctional NiTi/Ag hierarchical composite. Scientific Reports, 4: 5267

İNTİHAL RAPORU İLK SAYFASI



Yağmur Esen Yüksek Lisans Tezi.pdf

ORİJİNALLİK RAPORU

%10	%7	%4	%4
BENZERLİK ENDEKSİ	İNTERNET KAYNAKLARI	YAYINLAR	ÖĞRENCİ ÖDEVLERİ

BİRİNCİL KAYNAKLAR

1	Submitted to The Scientific & Technological Research Council of Turkey (TUBITAK) Öğrenci Ödevi	%3
2	acikkaynak.bilecik.edu.tr İnternet Kaynağı	%2
3	acikbilim.yok.gov.tr İnternet Kaynağı	%1
4	docplayer.biz.tr İnternet Kaynağı	%1
5	Submitted to Eskisehir Osmangazi University Öğrenci Ödevi	%1
6	Yoshiki Oshida, Toshihiko Tominaga. "Nickel-Titanium Materials", Walter de Gruyter GmbH, 2020 Yayın	<%1
7	www.selcukkongresi.org İnternet Kaynağı	<%1
8	dergipark.org.tr İnternet Kaynağı	<%1
9	Submitted to Adıyaman Universitesi Öğrenci Ödevi	<%1
10	medya.beu.edu.tr İnternet Kaynağı	<%1
11	Eroğlu, Ayşegül. "Dokuma Yatak Yüzü Kumaşlarda Hammadde ve Kumaş Konstrüksiyonunun Kumaşın Performans ve	<%1

ETİK KURUL İZİN YAZISI

Uyarı: Canlı denekler üzerinde yapılan tüm araştırmalar için Etik Kurul Belgesi alınması zorunludur.

☐ **Etik Kurul izni gerekmektedir.**

☒ **Etik Kurul izni gerekmemektedir.**

Yağmur ESEN
(İmza)

KURUM İZNİ YAZILARI

Uyarı: Canlı ve cansız deneklerle yapılan tüm çalışmalar için kurum izin belgelerinin eklenmesi zorunludur. Gizlilik ve mahremiyet içeren durumlarda kurum adı kapatılmalıdır.

☐ **Kurum izni gerekmektedir.**

☒ **Kurum izni gerekmemektedir.**

Yağmur ESEN
(İmza)

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı	
Doğum Tarihi	
Uyruğu	
E-Posta Adresi	
Web Adresi	

Eğitim Bilgileri	
Lisans	
Üniversite	
Fakülte	
Bölümü	
Mezuniyet Yılı	
Yüksek Lisans	
Üniversite	
Enstitü Adı	
Anabilim Dalı	
Programı	

Makale ve Bildiriler