

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ



POLİKRİSTAL ŞEKİL HAFIZALI NiAl
ALAŞIMLARININ MODELLENMESİ ve
YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

OĞUZHAN ORHAN

Yüksek Lisans Tezi

Anabilim Dalı: Fizik

Programı: Katıhal Fiziği

Danışman: Prof. Dr. Soner ÖZGEN

TEMMUZ-2017

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**POLİKRİSTAL ŞEKİL HAFIZALI NiAl ALAŞIMLARININ
MODELLENMESİ ve YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

OĞUZHAN ORHAN
Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı
Katıhal Fiziği

Danışman: Prof. Dr. Soner ÖZGEN

ELAZIĞ-2017

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ

**POLİKRİSTAL ŞEKİL HAFIZALI NiAl ALAŞIMLARININ
MODELLENMESİ VE YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Oğuzhan ORHAN
(142114106)

Tez Teslim Tarihi : 12.07.2017
Savunma Tarihi : 25.07.2017

Danışman: Prof. Dr. Soner ÖZGEN (Fırat Üniversitesi)

Üye : Prof. Dr. Sefa KAZANÇ (Fırat Üniversitesi)

Üye : Doç. Dr. Serdar ALTIN (İnönü Üniversitesi)

FİZİK BÖLÜMÜ
Katıhal Fiziği Anabilim Dalı
ELAZIG

ÖNSÖZ

Gece geç saatlere kadar bana vakit ayırıp, bazen tatillerde bile beni çalıştırdığı için danışman hocam Prof. Dr. Soner ÖZGEN'e çok teşekkür ederim.

Üstümde emeği olan diğer bir hocam ise Ars.Grv. Köksal YILDIZ' dır. Kendisine ne zaman bir şey sorsam elinden geldiğince bana hep yardımcı olmaya çalışmıştır. Tezimdeki sonuçları bir deneycinin gözüyle bakıp bana yeni bakış açıları katarak ufkumun genişlemesine yardımcı olmuştur. Sahip olduğu kitaplarını paylaştığı için, vaktini ayırdığını için ve burada sayamayacağım birçok şey için Köksal Hocam' a çok teşekkür ederim.

Son olaraksa hiçbir zaman hakkını ödeyemeyeceğim her zaman ve her koşulda yanımda olan beni büyüten ve bu günlere gelmemde emeği çok fazla olan Anneme, yine hiçbir zaman desteğini hiç esirgemeyen kardeşime ve bende emeği çok fazla olan babaanneme çok teşekkür ederim. Yazmış olduğum bu tezi ise yakın zamanda vefat etmiş olan babama ithaf ediyorum.

Teşekkür

Tezimdeki bilgisayar hesaplamaları için gerekli olan donanımı, FF.16.28 proje numarası ile destekleyen Fırat Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri (FÜBAP) Koordinatörlüğüne ve ulusal hesaplama ağını (TRUBA) kullanmamıza imkân tanıyan ULAKBİM 'e teşekkür ederim.

Oğuzhan ORHAN

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖNSÖZ.....	II
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET	IV
SUMMARY	V
ŞEKİL LİSTESİ	VII
TABLO LİSTESİ	VIII
KISALTMALAR LİSTESİ	IX
SEMBOLLER LİSTESİ	X
1. GİRİŞ.....	1
2. POLİKİSTAL ALAŞIMLAR.....	5
2.1. Çekirdek büyüme teorileri.....	6
2.2. Polikristallerde Taneler ve Tane Sınır Yapıları.....	8
3. ŞEKİL HATIRLAMALI ALAŞIMLAR.....	16
3.1. Katılardaki Martensit Faz Dönüşümü	19
3.2. Atermal Faz Dönüşümleri	20
3.3. Termal Faz Dönüşümü	21
4. MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMİ	22
4.1. NPT Topluluğu için Moleküler Dinamik Yöntemi	22
4.2. Gömülü Atom Metodu	24
4.2.1. Pun-Mishin gömülü atom yaklaşımı	25
4.3. Moleküler Dinamik Paket Programları	26
4.4. LAMMPS Paket Programı.....	27
4.5. Moleküler Dinamikte Analiz Yöntemleri.....	29
5. BULGULAR VE TARTIŞMALAR.....	31
5.1. Tek Kristal Modeller	31
5.2. Polikristal Şekil Hatırlamalı Alaşım Modelleri.....	37
5.2.1. İki taneli polikristal alaşım modelleri.....	38
5.2.2. Üç taneli polikristal alaşım modelleri	50
5.2.3. Dört taneli polikristal alaşım modelleri.....	59
6. SONUÇLAR.....	68
7. KAYNAKLAR.....	69

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

POLİKİKRİSTAL ŞEKİL HAFIZALI NiAl ALAŞIMLARININ MODELLENMESİ ve YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Oğuzhan ORHAN

Fırat Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Bölümü Anabilim Dalı

2017, Sayfa:85

Tek kristal NiAl şekil hafızalı alaşımlarda atom sayısının ve kompozisyonun martensit faz dönüşümü üzerindeki etkisi yapısal açıdan incelendi. Polikristal şekil hatırlamalı NiAl alaşımı için tane büyüklüğü ve miktarının martensit faz dönüşümü üzerindeki etkisi termodinamik ve yapısal açıdan araştırıldı. Hesaplamalarda moleküler dinamik simülasyonu kullanıldı. 12 tane tek kristal, 18 tane polikristal olmak üzere toplamda 30 adet model *LATGEN* programı ve *Voro++* kütüphanesi yardımıyla üretildi. Dinamik hesaplamaların tamamında NPT moleküler dinamik algoritması kullanıldı. Atomlararası fiziksel etkileşimler gömülü atom metodu ile temsil edildi. Bütün benzetim çalışmaları *LAMMPS* paket programı yardımı ile yapıldı.

Tek kristal NiAl modelleri, nikelce zengin faz bölgesinde %68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75 atomik Ni kompozisyonlu, B2 süperörgülü ve toplam 3456 atoma sahip olacak şekilde 8 ayrı model halinde kuruldu. Her model için sistem sıcaklıkları 800 K den 25 K e kadar, her 100000 MD adımında bir 25 K düşürüldü. Atomik kompozisyon ile M_s sıcaklığı arasında keskin bir değişim olduğu tespit edildi. Model boyutunun M_s sıcaklığına etkisini incelemek için 2000, 3456, 16000, 54000, 128000 atomlu Ni-at.%25Al kompozisyona sahip 5 adet model üretildi. Bu modeller için de sistem sıcaklığı 800 K den 400 K sıcaklığına, 100000 MD adımında bir 25 K azaltılarak düşürüldü. Model boyutunun artması ile M_s sıcaklığının eğrisel olarak azaldığı gözlemlendi.

Polikristal yapılarda model boyutunun ve tane miktarının M_s sıcaklığı üzerindeki etkisini tespit etmek için iki, üç ve dört taneli, Ni-at.%25Al kompozisyonlu 18 ayrı model kuruldu. Bütün modellerde tane geometrileri sabit tutuldu. İki, üç ve dört taneli modellerde her biri için 6 farklı boyutta modeller yapıldı. Bu modeller için atom sayısı ortalama olarak 9000 den 995000 e kadar değişmektedir. Tane sayısının artması ile M_s sıcaklığı ve faz dönüşüm hızının değiştiği görüldü. Model boyutunun artması ile M_s sıcaklığının arttığı ve faz dönüşüm hızının etkilendiği tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: Polikristal alaşımlar, Şekil hatırlamalı alaşımlar, Nano yapılar, Potansiyel enerji fonksiyonları, Moleküler dinamik simülasyonu.

SUMMARY

Yüksek Lisans Tezi

MODELLING of POLYCRYSTALLINE NiAl SHAPE MEMORY ALLOYS and INVESTIGATION of Its STRUCTURAL PROPERTIES

Oğuzhan ORHAN

Firat University
Institute of Science and Technology
Department of Physics
2017, Page:85

The effect of the number of atoms and composition on martensitic phase transformations in a single crystal NiAl shape memory alloys were investigated structurally. The effect of grain size and number on the martensitic phase transformations for the polycrystalline shape memory NiAl alloys were studied thermodynamically and structurally. Molecular dynamics simulations were used in the calculations. 12 single crystals and 18 polycrystals models, totally 30 models, were produced with the aid of the *LATGEN* software and the *Voro++* library. All of the calculations were realized using the NPT molecular dynamics algorithm. The physical interactions between atoms were represented by the embedded atom method. All of the simulation works were performed through *LAMMPS* software package.

The single crystal NiAl models having B2 superlattices and totally 3456 atoms were set up to be 8 different models in nickel-rich phase zones, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75 Ni in atomic percentages. System temperatures for each model were reduced from 800 K to 25 K, as to 25 K interval at every 100,000 MD steps. It was found that there is a strong relation between atomic composition and M_s temperatures. To investigate the effect of the model size on the M_s temperature, 5 different models with 2000, 3456, 16000, 54000, 128000 atoms of Ni-at.25%Al composition were produced. The system temperature was also reduced from 800 K to 400 K in 25 K interval at each 100000 MD steps. It was observed that the M_s temperatures decrease curvilinearly with increasing model size.

To determine the effect of model size and grain size on the M_s temperature in the polycrystalline structures, 18 different models with two-, three- and four-grained and Ni-at.%25Al composition were established. The geometry of the grains was kept constant in all models. 6 Different sizes of models were made for each of two-, three- and four-grained models. The average number of atoms in these models vary from 9000 to 995000. It was observed that the M_s temperatures and the phase transformation rates increase with the increasing of the number of grains. As increasing model size, it was found that the M_s temperatures increase and the phase transformation speeds are affected.

Keywords: Polycrystalline alloys, Shape memory alloys, Nanostructures, Potential energy functions, Molecular dynamics simulation.

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1 Cu bazlı farklı tane boyutlu polikristal şekil hatırlamalı alaşımın SEM görüntüsü	5
Şekil 2.2 (a) Sıvı içinde katı çekirdek modeli ve (b) Çekirdeklenme sürecinde serbest enerji değişimi.....	8
Şekil 2.3 Hall-Petch ilişkisini gösteren sertlik test sonuçları [33]. (a) nm ve (b) µm ölçekli sonuçları göstermektedir. Burada VPH Vickers sertliğidir.....	9
Şekil 2.4 Eğik sınır ve dönük sınır gösterimi	11
Şekil 2.5 Düşük açılı tane sınırına sahip Molibdenin yüksel çözünürlüklü elektron mikroskobu görüntüsü	12
Şekil 2.6 Yönelim sapma açıcısının artması ile değişen malzeme	15
Şekil 3.1 Şekil hatırlamalı alaşımların faz geçişleri ve kristal yapıları	17
Şekil 3.2 Ni-Al faz diyagramı	18
Şekil 3.3 B2 yapının şematik gösterimi ve kayma vektörleri	19
Şekil 5.1 S4.75 modeli için Kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi	33
Şekil 5.2 S4.75 modeli için Kohesif enerjinin sıcaklık ile değişimi	33
Şekil 5.3 S4.75 modeli için hacmin sıcaklık ile değişimi	34
Şekil 5.4 S4.75 modeli için hacmin MD adımına göre değişimi	35
Şekil 5.5 S2 modelleri için at.%Ni kompozisyonuna karşı $M_s(K)$ sıcaklığı	36
Şekil 5.6 Tek kristal at.%75 Ni kompozisyonlu sistemlerde M_s sıcaklığının atom sayısı ile değişimi	37
Şekil 5.7 Vorop++ kütüphanesinden elde edilen üç boyutlu hücre geometrisi	38
Şekil 5.8 İki taneli G2.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, (a) iki taneli G2.5 modelinin simülasyon hücresi ve (b) tane sınırı geometrisi.....	40
Şekil 5.9 G2.5 modeli kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi.....	40
Şekil 5.10 G2.5 modeli için kohesif enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi.....	41
Şekil 5.11 G2.5 modelindeki faz yapılarının (birim hücre oranının) sıcaklığa göre değişimi.....	43
Şekil 5.12 G2.5 modeli için her bir tanedeki yapısal dönüşümlerin sıcaklık ile değişimi ..	43
Şekil 5.13 İki taneli modellerin BCC yapılarının sıcaklığa göre değişimi.....	44
Şekil 5.14 İki taneli modellerdeki tane sınırı atomların sıcaklık ile yüzdelik değişimi	46
Şekil 5.15 İki taneli modellerde FCC yapının sıcaklık ile değişim grafiği	47

Şekil 5.16 İki taneli modellerde HCP yapının sıcaklık ile değişim grafiği	47
Şekil 5.17 Tane boyutu ile M_s sıcaklığının değişimi	48
Şekil 5.18 İki taneli G2.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşümü ekran görüntüsü.....	49
Şekil 5.19 Üç taneli G3.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, (a) üç taneli G3.5 modelinin simülasyon hücresi ve (b) tane sınırı geometrisi.	51
Şekil 5.20 G3.5 modelin için kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi	51
Şekil 5.21 G3.5 modeli için hacim-sıcaklık değişimi.	52
Şekil 5.22 G3. 5 modeli için her bir tanedeki yapısal dönüşümlerin sıcaklık ile değişimi .54	
Şekil 5.23 Üç taneli bütün modeller için BCC yapılarının sıcaklık ile değişimi	54
Şekil 5.24 Üç taneli modellerdeki tane sınırı atomların soğuma ile yüzdelik olarak değişimi.....	55
Şekil 5.25 Üç taneli modellerde FCC yapının soğutma boyunca değişim grafiği	56
Şekil 5.26 Üç taneli modellerde HCP yapının soğutma boyunca değişim grafiği.....	56
Şekil 5.27 Üç taneli G3.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşüm ekran görüntüsü.....	58
Şekil 5.28 Dört taneli G4.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, (a) dört taneli G4.5 modelinin simülasyon hücresi ve (b) tane sınırı geometrisi	60
Şekil 5.29 G4.5 modeli için Kohesif enerji-MD adımı grafiği	61
Şekil 5.30 G4.5 modeli için hacim-sıcaklık değişimi.....	61
Şekil 5.31 G4.5 modeli yapısal dönüşüm-sıcaklık grafiği	62
Şekil 5.32 Dört taneli modellerin BCC yapılarının sıcaklık ile değişim grafiği	63
Şekil 5.33 Dört taneli modellerin diğer yapılarının sıcaklık ile değişim grafiği.....	64
Şekil 5.34 Dört taneli modellerde FCC yapıların sıcaklık ile değişim grafiği	65
Şekil 5.35 Dört taneli modellerde HCP yapıların sıcaklık ile değişim grafiği.....	66
Şekil 5.36 Dört taneli G4.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşümü ekran görüntüsü.....	67

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Tablo 2.1 Simetrik eğit tane sınır düzlemlerinin sınıflandırılması	14
Tablo 3.1 Şekil hatırlama ve süperelastiklik gösteren alaşımlar.....	17
Tablo 3.2 Martensit dönüşüm tiplerinin genel karakteristikleri.....	20
Tablo 4.1 Ni, Al ve NiAl için Pun-Mishin EAM yaklaşımından elde edilen erime sıcaklıklarının deneysel veriler ile karşılaştırılması.....	26
Tablo 4.2 MD simülasyon çalışmaları için kullanılabilecek ücretli ve ücretsiz programlar	27
Tablo 4.3 Sıkça kullanılan bazı LAMMPS kodları ve kodların işlevleri.....	28
Tablo 5.1 Tek kristalli modellere ait bilgiler	32
Tablo 5.2 Tek kristal modellerine ait M_s sıcaklıkları	35
Tablo 5.3 İki taneli modellerin model numaraları ve model özellikleri	39
Tablo 5.4 İki taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıklar	48
Tablo 5.5 Üç taneli modellerin bilgileri.....	50
Tablo 5.6 Üç taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıklar.....	57
Tablo 5.7 Dört taneli modellerin temel özellikleri.....	59
Tablo 5.8 Dört taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıklar	65

KISALTMALAR LİSTESİ

BCC	: Cisim merkezli kübik birim hücre
B2	: Birim hücresi iç içe girmiş iki adet basit kübik yapıdan oluşan süper örgü
CNA	: Ortak Komşu Analizi (Common Neighbour Analysis)
DY	: Diğer Yapı (BCC, FCC ve HCP den farklı olan tanımsız yapılar)
EAM	: Gömülü Atom Metodu (Embedded Atom Method)
FCC	: Yüzey merkezli kübik birim hücre
GROMACS	: Groningen Machine for Chemical Simulation
Gn.m	: Tane yapılı kristal modeller; n = tane sayısı, m = model boyutu
HCP	: Heksagonal sıkı paket yapı
IMD	:Interactive Molecular Dynamics
LATGEN	: Lattice Generator
LAMMPS	: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
MD	: Moleküler Dinamik
NAMD	:Nanoscale Molecular Dynamics
OVITO	: Open Visualization Tool
Sn.m	: Tek kristal modeller; n = model boyutu, m = kompozisyon
ŞHA	: Şekil Hatırlamalı Alaşım
ŞHE	: Şekil Hatırlama etkisi
VMD	: Visual Molecular Dynamics
Voro++	: 3D Voronoi Cell Software Library
VPH	: Vickers sertliği

SEMBOLLER LİSTESİ

G	: Gibbs serbest enerjisi
H	: Entalpi
T	: Kelvin cinsinden sistem sıcaklığı
S	: Entropi
r^*	: Çekirdeklenme kritik yarıçapı
ΔG^*	: Çekirdeklenme için aktivasyon enerjisi
σ_y	: Akma zoru
k	: Hall-Petch sabiti
τ	: Kesme zoru
D	: Tane boyutu
G	: Kesme modülü
$\mathbf{b}$	: Burgers vektörü
δ_b	: Tane sınır kalınlığı
r_0	: Alt kesim mesafesi
θ	: Sapma açısı
Σ	: Tesadüfi-yer örgü karakteristiği
M_s	: Martensit faz başlangıç sıcaklığı

1. GİRİŞ

İnsanoğlu yeryüzünde var olduğundan beri günlük hayatını kolaylaştırmak ve merak duygusunu tatmin etmek maksadıyla sürekli bir arayış içerisinde olmuştur. Bu arayış içerisinde, evren ile alakalı birçok şey öğrenilmiş ve öğrenilen bu bilgilerin ışığında kesici aletlerden yapay zekaya varana kadar sayısız teknolojiler geliştirilmiştir. Bu teknolojilerin geliştirilmesinde malzeme biliminin katkısı oldukça fazladır. Yeni malzemelerin keşfedilmesi veya mevcut malzeme davranışlarının iyi anlaşılması yeni ufuklar açmaktadır. Bu yeni ufuklardan birisi de bu tez çalışmasının konusu olan şekil hatırlamalı alaşımlardır.

Şekil hatırlamalı alaşımlar (SHA), akıllı malzemeler veya fonksiyonel malzemeler olarak da bilinen bu malzemeler herhangi bir deformasyon durumunda fiziksel veya termal bir etki vasıtasıyla eski şekillerini geri kazanan malzemelerdir. SHA ile alakalı ilk gözlem 1932 yılında Chang ve Read tarafından AuCd alaşımı üzerinde kaydedilmiştir. AuCd alaşımının morfolojik gözleminde ve öz direncinde değişimler gözlemlenmiştir. 1951 yılında bükülmüş bir AuCd çubuğunda Şekil Hatırlama Etkisi (SHE) gözlenmiştir [1]. 1962 yılına kadar üzerinde ciddi bir çalışma yapılmamıştır. 1962 yılında Buehler ve arkadaşları Ni-Ti (Nitinol) üzerinde yaptıkları çalışma ile bu alandaki çalışmaları ciddi olarak başlamıştır. On yıl içerisinde çok çalışılmış ve endüstriye girmeye başlamıştır. Başka alaşımlarda da SHE gözlenmiştir [1]. İlk başlarda genellikle Ni, Cu ve Fe tabanlı SHA üretilmeye başlanmış ve bu alaşımlar üzerinde çalışmalar halen devam etmektedir. En yaygın olarak bilinen ve SHE özelliğini en iyi yansıtan Nitinol alaşımıdır. Ancak, bu alaşımın üretim maliyeti oldukça yüksek olduğundan endüstriyel kullanımı kısıtlıdır. Endüstriyel olarak yaygın biçimde kullanabilecek Cu tabanlı alaşımların ise stabilizasyon problemi bulunmaktadır. Bu olumsuz durumu gidermek üzere Cu tabanlı alaşımlar üzerindeki çalışmalar artmıştır. Şekil hafızalı alaşımlar bu eşsiz özelliklerinden medikal uygulamalardan enerji dönüşüm sistemlerine ve otomotivden tarıma kadar birçok alanda kullanılmaktadır.

Alaşımlar kristografik yapılarına göre tekli kristal (single kristal) yapılar ve çok kristal (polikristal) yapılar olmak üzere iki gruba ayrılırlar. Tek kristal yapıları malzeme, kristal örgünün tamamen tek bir doğrultuya (yönelime) sahip olduğu malzemelerdir. Tek kristal SHA dönüşüm karakteristikleri açısından değerlendirildiğinde daha iyi uygulama fırsatları vermektedir, ancak üretim maliyeti ve üretim güçlüklerinden ötürü ticari alanda

yaygın olarak üretilmemektedir. Polikristal alaşımlar ise içerisinde birden fazla yönelime sahip kristal örgüleri barındıran malzemelerdir. Her biri farklı yönelime sahip kristal adacıkları tane (grain) olarak isimlendirilir. Tek kristal ve polikristal şekil hatırlamalı alaşımlar karşılaştırıldığında ŞME açısından da önemli değişimler mevcuttur [2-4].

Taneler farklı yönelime sahip olduklarından bir araya geldiklerinde bir ara yüzey, sınır bölgesi oluşturulurlar. Bu bölgeye tane sınırı ismi verilmektedir ve malzemenin hem termal hem de mekanik özellikleri üzerinde son derece etkin rol oynar. Tane sınırları iki boyutlu bir kusur (yüzey kusuru) olarak da kabul edilir ve tane sınırlarının karakteristiği yönelim sapması (misorientation) ile belirlenir [5-7]. Tane ara yüzeyi yani tane sınırındaki bu yönelim sapması, sınırdaki atomik hareketlilikte ve tanelerin birbirleriyle olan etkileşimlerini değiştirdiğinden ötürü tane sınırları bu açı ile karakterize edilir. Bu bölge için ilginç olan özelliklerden birisi de bir kusur olmasına karşın bir kusur kaynağı olarak da davranmasıdır [8]. Tane sınırından kaynaklanan kusurlar polikristal malzemelerin en ciddi dezavantajdır. Ancak, kusurlu bölge tane sınır mühendisliği ile iyileştirilebilir [5].

Bilimin gerçek bilgiye ulaşmak için en çok başvurduğu kaynak deney ve gözlemdir. Ancak bazı fiziksel boyutlarda deney ve gözlem yapmak ya oldukça güç ya da günümüz teknolojisi yetersiz kalmaktadır. Bu gibi durumlarda bilgisayar simülasyonları yapmak fiziksel olayları anlamak ve yeni teorilerin oluşturulması açısından oldukça yararlı olmaktadır. Yapılan simülasyon çalışmalarının, uygun modeller kullanıldığı takdirde gerçek deneylere yakın sonuçlar verdiği görülmüştür. Atomik boyutlardaki çalışmalar için en yaygın kullanılan simülasyonlar moleküler dinamik (MD) simülasyonu ve Monte-Carlo simülasyonudur. MD yöntemi, fizik, kimya ve malzeme biliminde geniş bir şekilde kullanılan etkili bir araç olmuştur. Bu yöntem, belirli bir fiziksel sistem için tanımlanan Newton hareket denklemlerinin sayısal integrasyon yardımıyla sistemin minimum enerjili yapılarını elde etmeyi amaçlar [9- 12]. Newton hareket denklemleri ile sistemin davranış biçimi ortaya konulur ve sistemdeki parçacık etkileşimlerini en rahat biçimde tarif etmek maksadıyla sistemi temsil eden potansiyel enerji fonksiyonu kullanılır. Bundan dolayı sağlıklı bir MD simülasyonunda potansiyel enerji fonksiyonu son derece önem teşkil eder. Minimum enerjili denge durumuna yerleşen model sistem, gerçek bir fiziksel sistemin pek çok özelliğini doğru olarak yansıtır. Bu yöntem aracılığıyla oluşturulan model sistem üzerinde çeşitli teorik deneyler yapmak, bilinmeyen pek çok özelliği gözlemek mümkün hale gelir. Bu tür simülasyon çalışmaları yapmak amacıyla geliştirilmiş çeşitli bilgisayar programları ve açık kaynak kodları ücretli veya ücretsiz olarak temin edilebilmektedir [13].

MD simülasyonunda açık kaynak kodu desteği sağlayan ve GNU lisansı ile verilen ve yaygın olarak kullanılan bazı kodlara; *LAMMPS* (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [14], *NAMD* [15], *IMD* [16] ve *GROMACS* [17] örnek verilebilir. Bu programlar paralel hesaplama desteği sağlarlar ve bu teknikler yardımıyla birkaç milyon atomdan oluşan moleküler sistemlerin incelenmesi mümkün hale gelir.

Tane boyutunun faz dönüşümü üzerindeki etkisi ile ilgili birçok çalışma yapılmıştır. Morrison ve ark. tane boyutlarının martensit dönüşüm ve ultra-hızlı süperelastiklik üzerindeki etkilerini moleküler dinamik simülasyonunu kullanarak incelemişlerdir [18]. Bu çalışmalarda deneysel olarak çok çalışılmış NiAl alaşımını modellemişlerdir. Modellerini Ni_5Al_3 için kurmuşlar ve B2 fazı için Farkas tarafından önerilen gömülü atom potansiyelini (Embedded Atom Method - EAM) kullanmışlardır [19]. Modellerinde tane boyutlarını 2,5 nm den (benzetim hücre uzunluğu 20 nm ve toplam atom sayısı 606.419) 20 nm ye (simülasyon hücre uzunluğu 80 nm ve toplam atom sayısı 43.103.735) kadar değiştirmişlerdir. Yapmış oldukları simülasyon sonucunda, ortalama tane boyutu 7,5 nm ve altında olan modellerde sıcaklık etkili dönüşümün tamamıyla baskılandığını gözlemişlerdir. Tane boyutlarının azalması dönüşümün ilerlemesine engel olmaktadır. Buna karşın ilginç bir şekilde 7,5 nm de tanelerin ultra-hızlı süperelastik davranış geliştirdiğini belirtmektedirler. Yine Morrison ve arkadaşları moleküler dinamik simülasyonunu kullanarak NiAl alaşımını incelemişlerdir [20]. Bu seferki amaçları, atomik seviyedeki gerçek değişikliklerin ve mekanik kısıtlamaların martensit ve austenit dönüşüm üzerindeki etkilerini belirlemektir. Yapmış oldukları modelde Farkas'ın EAM potansiyelini ve NiAl için B2 fazını kullanmışlardır. Simülasyonun gerçeğe çok yakın olması için düzensiz bir dizilim yapısı kurmuşlardır. Bu dizilimi $Ni_{63}Al_{37}$ için oluşturmuşlardır. Simülasyonlarında atom sayısı 6750 den (simülasyon hücre uzunluğu 4,29 nm) 5.971.968 (simülasyon hücre uzunluğu 41,99 nm) atoma kadar çıkartmışlardır. Simülasyon sonunda austenit dönüşüm sıcaklığının tane boyutunun düşmesiyle arttığı gözlenmiştir. İlginç bir şekilde yüksek sıcaklık martensit dönüşümünün değişimi ufak boyutlara bağlıdır. Martensit yapının çoklu bölge (multi-domain) geliştirebilmesi için kritik boyut yaklaşık olarak 40 nm dir ve mekanik kısıtlamalar 7nm boyutunda azalmaktadır ki bu dönüşüm sıcaklığını önemli derecede etkiler.

Roca ve arkadaşları tane boyut etkisinin sıcaklık etkili martensit dönüşümü üzerindeki etkisini deneysel olarak araştırmışlardır [21]. Çalışmalarında Cu tabanlı polikristal alaşım kullanmışlardır. Çalışmalarında numunelerin boyutlarını 500 nm den

6mm ye kadar deęiřtirmişler ve bu numune boyutlarına paralel olarak tane boyutları da deęiřmiştir. Numuneleri hızlı katılaşma teknięiyle řeritler ve bantlar halinde elde etmişler ve Bridgman metoduyla tek kristaller büyütmişlerdir. Tane boyutlarının düşmesiyle ileri dönüşüm sıcaklığı (Austenit→Martensit) aşağı şekilde (azalacak biçimde) deęiřmiştir. Mevcut tane boyutu etkisi, d (tane boyutu) deęeri $\approx 100 \mu\text{m}$ altında gözle görülür şekilde gözlenmeye başlanmıştır. Ayrıca, bu etkinin $20 \mu\text{m}$ altında çok daha belirginleřtięi gözlenmiştir. Roca ve ark. çalışmalarında elde ettikleri dönüşüm sıcaklığı-tane boyutu grafięinin eğimi literatürdeki Hall-Petch davranışından dikkate deęer bir şekilde farklıdır. Zhen ve arkadaşları yapmış oldukları çalışmada ise malzeme nano boyutta incelenmiştir [22]. Nano boyuttaki malzemelerde yüzey etkisinin faz dönüşümleri üzerinde oldukça önemli olduęu gözlenmiştir. Çalışmalarında numune boyutu $D=18,4 \text{ nm}$ den $4,02 \text{ nm}$ ye düşürüldüğünde hem martensit hem de austenit dönüşüm sıcaklıklarında azalma gözlenmiş ve buna ek olarak dönüşüm histerisizi numune boyutunun düşmesiyle daha da küçülmüştür. Parçacık boyutu $1,15 \text{ nm}$ ye düşürüldüğünde ise herhangi bir dönüşüm gözlenmemiştir.

Bu tez çalışmasında, ŞMA için tane büyüklüğünün martensit faz dönüşümü üzerine etkisi termodinamik ve yapısal olarak incelenmiştir. Çalışma yöntemi olarak moleküler dinamik simülasyonu seçilmiştir. *Voro++* [23] kütüphanelerini kullanan *LATGEN* [24] programı ile on iki tane tek kristal, on sekiz tane de polikristal olmak üzere toplam otuz farklı B2 süper örgü yapısına sahip modeller üretilmiştir. Tek kristal modellerde Ni-at.%25Al kompozisyonuna sahip beř farklı büyüklükte model ve 3456 atomlu farklı kompozisyonlara sahip sekiz farklı model üretilmiştir. Polikristal yapıları oluşturmak için iki, üç ve dört taneli Ni-at.%25Al kompozisyonlu modeller kurulmuştur. İki, üç ve dört taneli bu modeller için atom sayısı yaklaşık olarak 9000 den 995000 e kadar yükseltilmiştir. MD benzetiminde atomlararası etkileřmeleri tanımlamak için Pun-Mishin tarafından geliştirilen EAM kullanılmıştır [25]. Üretilen bütün modellerin MD simülasyonları *LAMMPS* [14] paket programı ile yapılmıştır. Simülasyon sonuçlarının analizinde *OVITO* [26] programından faydalanılmıştır. Elde edilen veriler neticesinde martensit fazın başlangıç sıcaklığının kompozisyon ile doğru orantılı bir biçimde deęiřtięi ve model boyutunun artması ile martensit başlangıç sıcaklığının etkilendięi görülmüştür. Aynı büyüklüęe sahip polikristal modellerde tane sayısının artmasıyla martensit fazın büyüme hızının etkilendięi ortaya konulmuştur.

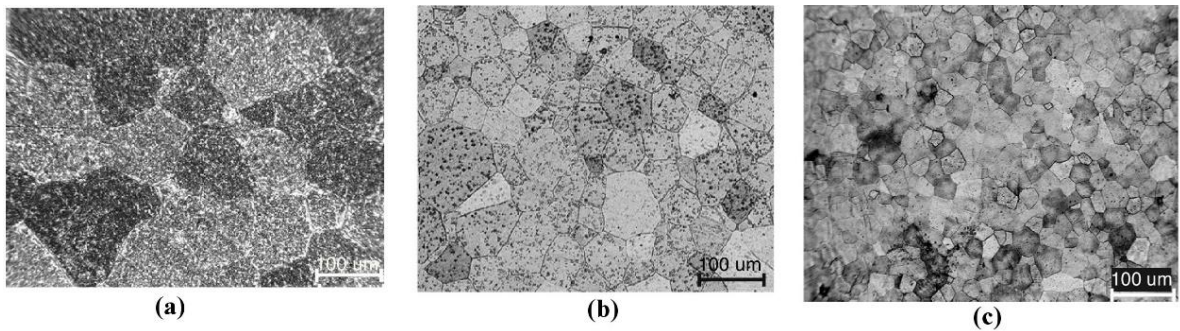
2. POLİKRSİTAL ALAŞIMLAR

Kristal yapılı bir katıdaki atomların, katının sonuna kadar aynı düzende devam etmesi ve kristal örgülerin aynı doğrultuda olmasıyla oluşturdukları kristal yapıya tek kristal yapı denilmektedir. Tek kristalli numuneler özel koşullar altında oluşturulur. Son zamanlarda gelişen yarı iletken teknolojisinde ve şekil hatırlamalı alaşımlarda ve bunun gibi birçok modern teknoloji alanında tek kristalli yapılar karşımıza çıkmaktadır. Ancak üretim esnasında dikkat edilmesi gereken hususlar ve üretim maliyetlerinin fazla olması nedeniyle tek kristal malzemeler ekonomik açıdan dezavantajlıdır [4].

Tek kristalli yapıların üretilmesinde bazı metotlar kullanılmaktadır. Bu metotlar; kristal çekme (crystal pulling), Birdgman metodu, skull melting metodu, zone melting ve Verneuil metodu şeklindedir [4].

Kristal üretim süreçlerinde, doğadaki metallerin neredeyse hepsi aynı kimyasal özelliği taşımasına karşın yapısal açıdan farklı yönelimlerle büyüyerek kristal toplulukları oluşabilir. Bu yapılara polikristal ismi verilmektedir. Polikristal yapıların nasıl bir yapıda oluştuğunu göstermek için farklı tane büyüklükleri içeren Cu bazlı polikristal yapıları bir şekil hatırlamalı alaşımın taramalı elektron mikroskobu (Scanning Electron Microscop - SEM) görüntüsü Şekil 2.1 de verilmiştir. Şekil 2.1 (a) da ki numune iri taneli bir yapı ihtiva ederken Şekil 2.1 (b) de tanelerin boyutu biraz daha küçülmüştür. Şekil 2.1 (c) ise en küçük tanelere sahip numunenin SEM görüntüsü bulunmaktadır [27].

Polikristal yapılar doğal yapılar olduklarından üretimleri de oldukça düşük maliyete sahiptir. Ancak tek kristallere nazaran verimleri daha düşüktür ve bundan dolayı iyileştirilmeleri gerekir. Günümüzdeki birçok çalışma polikristal malzemelerin özelliklerini iyileştirmek üzere yapılmaktadır.



Şekil 2.1 Cu bazlı farklı tane boyutlu polikristal şekil hatırlamalı alaşımın SEM görüntüsü [27].

2.1 Çekirdeklenme

Polikristal yapılar, eriyik bir malzemenin zaman içerisinde soğumasıyla veya toz metalürjisi gibi farklı metotlarla üretilen malzemelerde ortaya çıkan yapılardır [3,7,28]. Zamanla soğuyan malzemenin içerisindeki ilk kristal embriyolarının oluşmasına çekirdeklenme denilmektedir [3]. Çekirdeklenmenin iyi anlaşılması, polikristal malzemelerin termal ve mekanik davranış biçimlerinin iyileştirilmesi ve kusurlarının giderilmesi gibi alanlarda önemli bir başlangıç oluşturur.

Bir sistem içerisinde yeni bir fazın düzenlenmesine öncülük eden bir reaksiyon olduğunda, yeni faz ilk önce eski fazın içerisinde küçük çekirdekler olarak görünür ve eski faza ait birçok yapısal parçacıkların bu çekirdeğe eklenmesiyle büyürler. Birçok metalürjik işlem çekirdeklenme ve büyüme yasalarına bağlı olarak gerçekleştirilir.

Çekirdeklenme olayı homojen ve heterojen olmak üzere iki ayrı şekilde tanımlanır. Bu ayrımın temelinde yatan sebep, çekirdeklenme faaliyetinin başladığı bölgelerin farklı olmasıdır [3, 7, 28]. Çekirdeklenme olayı yeni faza öncülük eden ilk fazın içerisinde ve tekdüze (uniform) bir biçimde dağılmış ise buna homojen çekirdeklenme denir. Homojen çekirdeklenmede oluşacak yeni fazın çekirdeklerinin düzenlenme olasılığı sistem içerisinde her noktada aynıdır. Heterojen çekirdeklenme ise tane sınırı, dislokasyon gibi mikro yapıda tekdüzelliklerin olmadığı ve çekirdeklenmenin tercihli olarak olduğu yerlerde ortaya çıkar [3,7,28].

Çekirdeklenme teorisinin temelini Gibbs serbest enerjisi oluşturur [7]. Gibbs serbest enerjisi termodinamik bir parametredir ve sistemin iç enerjisini yani entalpisi ile sistemde bulunan atom veya moleküllerin düzensizlik derecesi temsil eden entropinin bir fonksiyonudur [7]. Gibbs serbest enerjisi

$$G = H - TS \quad 2.1$$

şeklinde ifade edilir. Burada G Gibbs serbest enerjisi, H sistemin entalpisi, T Kelvin cinsinden sıcaklığı ve S sistemin entropisini temsil eder.

Ana faz içerisinde gerçekleşen bir çekirdeklenme olayında oluşacak yeni faz çekirdeğinin hem hacim enerjisi hem de yüzey enerjisi Gibbs serbest enerjisi üzerinde etkilidir [7]. Buna göre en basit şekliyle küre geometrisine sahip bir embriyo düşünülür ise Gibbs serbest enerjisi

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \gamma \quad 2.2$$

biçimindedir. Bu Gibbs serbest enerji ifadesinde ΔG_v oluşacak yeni fazın hacimsel serbest enerjisini, γ ise oluşacak yeni faz ile eski faz arasında kalan ara yüzey enerjisini temsil eder. ΔG_v Hacimsel serbest enerji, Gibbs serbest enerjisini düşürmek ve çekirdeklenmeye destek verdiği için negatif değer alır. Bir fazın yüzey tabakasındaki atom ve moleküller genellikle içeride bulunanlardan daha fazla serbest enerjiye sahip olduğundan ara yüzey enerjisi γ çekirdeklenmeye engel olur ve pozitif değer alır. Şekil 2.2 de sıvı fazdan katı faza geçiş esnasındaki çekirdeklenmeyi temsil eden bir benzetime yer verilmiştir. Şekil 2.2'deki r^* kritik yarıçap olarak tanımlanır. Oluşan yeni fazın kendisini koruması ve yayılmasının gerçekleşmesi için çekirdeklenme sırasında yeni fazın yarıçapının kritik yarıçapa ulaşması şarttır. Eğer oluşan yeni çekirdek kritik yarıçap değerine ulaşmaz ise oluşacak yeni faz büzülerek yok olur. Kritik yarıçapın karşılık geldiği Gibbs serbest enerji değeri de aktivasyon enerjidir. Eski fazın yeni faza evrilmesi için sistemin aktivasyon enerjisi değerine ulaşması gerekir.

Homojen çekirdeklenmede kritik yarıçap ve aktivasyon enerjisi ifadeleri

$$r^* = -\frac{2\gamma}{\Delta G_v} \quad 2.3$$

$$\Delta G^* = \frac{16\pi\gamma^2}{3(\Delta G_v)^2} \quad 2.4$$

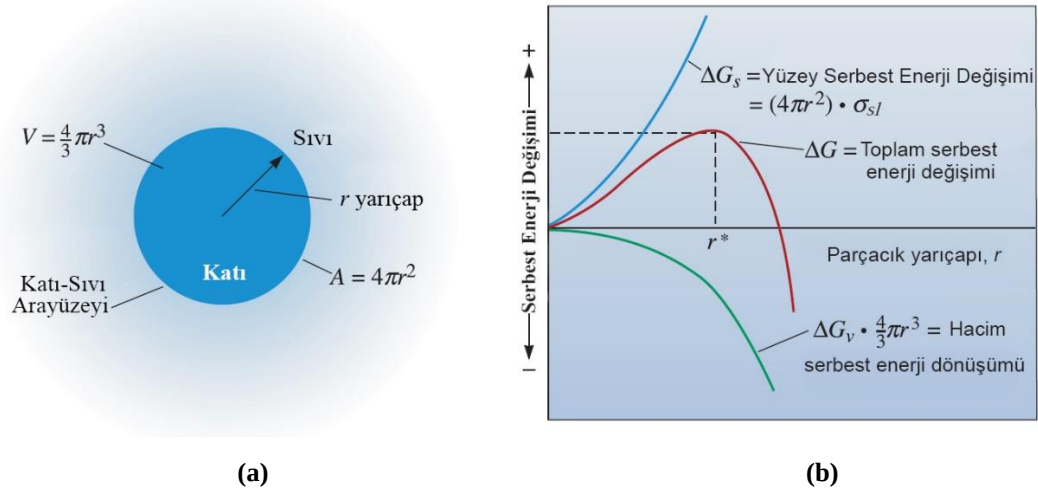
şeklindedir [7].

Heterojen çekirdeklenmede ise kritik yarıçap ve aktivasyon enerjisi

$$r^* = -\frac{2\gamma_{sl}}{\Delta G_v} \quad 2.5$$

$$\Delta G^* = \frac{16\pi\gamma^2}{3(\Delta G_v)^2} S(\theta) \quad 2.6$$

ifadesiyle gösterilir. Homojen çekirdeklenme olayından farklı olarak kritik yarıçap için vektör ara yüzey enerjisi (γ_{sl}) kullanılır ve heterojen çekirdeklenmede $S(\theta)$ açısı vardır [7]. Bu açı oluşan yeni fazın şekline bağlılık gösterir. $S(\theta)$ açısından dolayı heterojen çekirdeklenmenin aktivasyon enerjisi homojen çekirdeklenmeye göre daha düşüktür [7].



Şekil 2.2 (a) Sıvı içinde katı çekirdek modeli ve (b) Çekirdeklenme sürecinde serbest enerji değişimi [7].

2.2 Polikristal Yapılarda Taneler ve Tane Sınırları

Polikristal malzemelerin davranış biçimlerini anlamak için, polikristali oluşturan ve tane ismi verilen yapıları anlamak son derece önem arz eder. Çünkü polikristal bir malzemede farklı boyut ve şekillere sahip olan birçok tane vardır ve bu tanelerin birbirleriyle etkileşim biçimleri malzemenin davranışını etkiler. Her bir tane kendi içinde aynı yönelime ve aynı kimyasal kompozisyona sahip kristaller topluluklarından meydana gelir. Bu tanelerin boyutları malzemenin termodinamik ve mekanik özellikleri üzerinde etkin rol oynayan parametrelerdendir ve tane boyutu, katılaşma sırasındaki soğuma hızıyla ve bazı kimyasal etkilerle değiştirilebilir [29, 30].

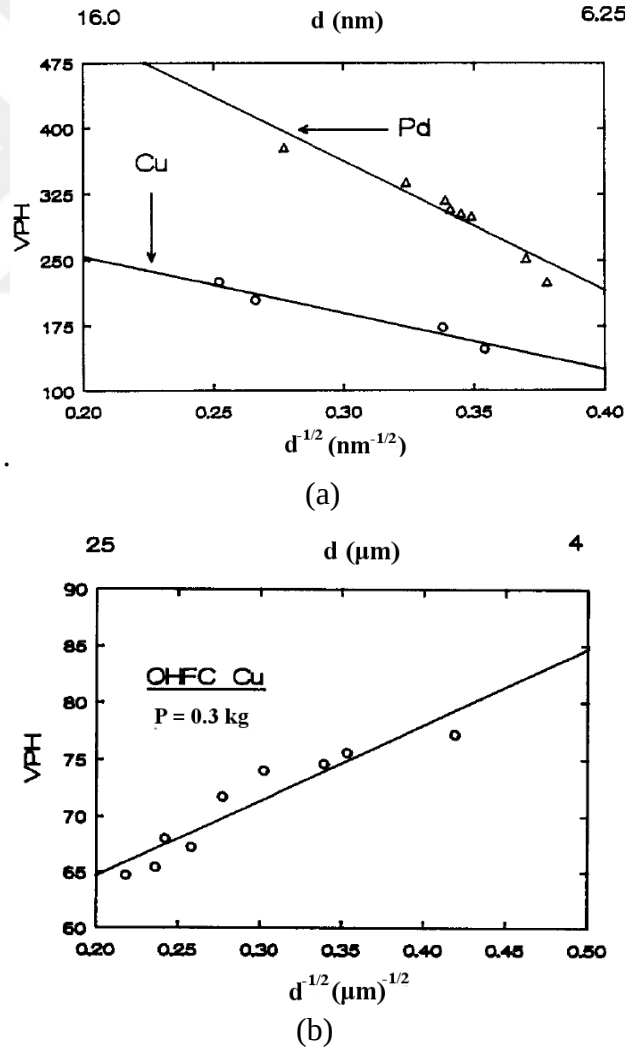
Şekil hatırlama etkisinde martensit fazın başlangıç sıcaklığının önemi oldukça büyüktür ve tane boyutu da bu martensit başlangıç sıcaklığını değiştirme kabiliyetine sahiptir [31]. Ayrıca, tane boyutunun malzemenin iç zorları üzerinde de etkisi vardır. Tane boyutundan kaynaklanan iç zorları açıklamada Hall-Petch etkisinden yararlanılır. Bu ilişkiye göre tane boyutundan kaynaklanan akma zoru,

$$\sigma_y = \sigma_0 + k d^{-1/2} \quad 2.7$$

şekilde ifade edilir [32]. Burada σ_0 sürtünme zoru, k Hall-Petch sabiti, d ise tane boyutunu temsil etmektedir. Hall-Petch ilişkisine göre, tane boyutunun karesinin tersi, akma zoru ile doğru orantılıdır. Yani tane boyutunun azalmasıyla malzemede oluşan akma zoru artar.

Ancak, deneysel çalışmalar 1 μm den daha küçük tane boyutlarında Hall-Petch etkisinin akma zoru-tane boyutu ilişkisini açıklayamadığını göstermiştir. Bazı çalışmalar 25 nm tane boyutunun altında farklı bir davranışın oluştuğunu göstermektedir ve klasik Hall-Petch etkisinin tersine davranan bölge ters Hall-Petch etkisidir [32]. Bu durum Şekil 2.3 de örnek olarak verilmiştir.

Chokshi ve arkadaşları yapmış oldukları çalışmada klasik Hall-Petch etkisini incelemek için farklı boyutlarda Cu ve Pd nanokristal örnekleri hazırlamışlardır [33]. Hazırlanan bu numuneler sertlik testine tabi tutulmuştur ve klasik Hall-Petch sınırını 50 nm olarak belirlemişlerdir. Şekil 2.3 (a) da Hall-Petch ilişkisinin 16 nm mertebesinde daha düşük tane boyutlarına ulaşıldığında ortaya çıkan ters bölge görülmektedir.



Şekil 2.3 Hall-Petch ilişkisini gösteren sertlik test sonuçları [33]. (a) nm ve (b) μm ölçekli sonuçları göstermektedir. Burada VPH Vickers sertliğidir.

Şekil 2.3 (b) de ise tane boyunun 16 nm den daha büyük olduğu zaman görülen ve klasik Hall-Petch davranışının sergilendiği bölgeyi tasvir etmektedir. Nieh ve Wadsworth, farklı numuneleri kullanarak da benzer sonuçlara ulaşmışlardır [34].

Klasik Hall-Petch etkisinde kesme zoru τ aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\tau = \frac{k_{hp}}{\sqrt{D}} \quad 2.8$$

Denklem 2.8 yukarıda bahsettiğimiz nano boyutta farklılık gösterir. Nanometre mertebesindeki boyutlara inildiğinde dislokasyon çevrimlerinin hesaba katılması zorunludur ve bu noktada kesme zoru ifadesi

$$\tau \approx \frac{Gb}{D} \quad 2.9$$

şekline dönüşür. Burada G kesme modülünü, b Burgers vektörünü ve D tane boyutunu temsil etmektedir [35]. Hall-Petch olayı bu τ değeri ile sınırlandırılır.

Boyut daha da küçüldüğünde τ ifadesi de farklılaşarak aşağıdaki şeklini kazanır:

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi D} \ln \frac{D}{r_0} \quad 2.10$$

Denklem 2.10 da r_0 alt kesim mesafesidir [35]. Tane güçlendirme etkisi, tane boyutunun (D) tane sınırı kalınlığına (δ_b) yaklaştığında azalmaktadır [36].

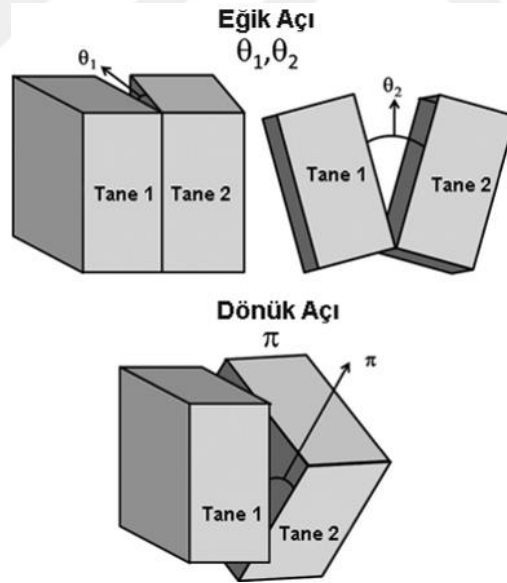
Tane sınırında bulunan atomlar tane içerisindeki atomlara nazaran daha reaktiftir ve daha düzensiz bir yapıya sahiplerdir [28]. Tane sınırları beş serbestlik derecesine sahiptirler: üçü örgüler arasındaki dönmeleri ifade ederken diğer ikisi tane sınır alanlarını temsil eder veya her bir tane sınırına ait iki parametre tanımlanır (iki etkileşme için toplamda dört serbestlik derecesi anlamına gelir) bir de örgüler arasındaki dönme parametresi yani serbestlik derecesi olarak ele alınır [37].

Tane sınır tipleri birkaç yolla tanımlanabilir. Ancak geleneksel olarak eğik (tilt) ve dönük (twist) olmak üzere iki temel gruba ayrılır. Eğik ve dönük tane sınırlarının tasviri Şekil 2.4 de verilmiştir. Tane sınır tipleri çoğunlukla bu iki temel sınır tipinin kombinasyonuna sahiptir. Yönelim sapmalarının tane sınırları üzerindeki etkisi de

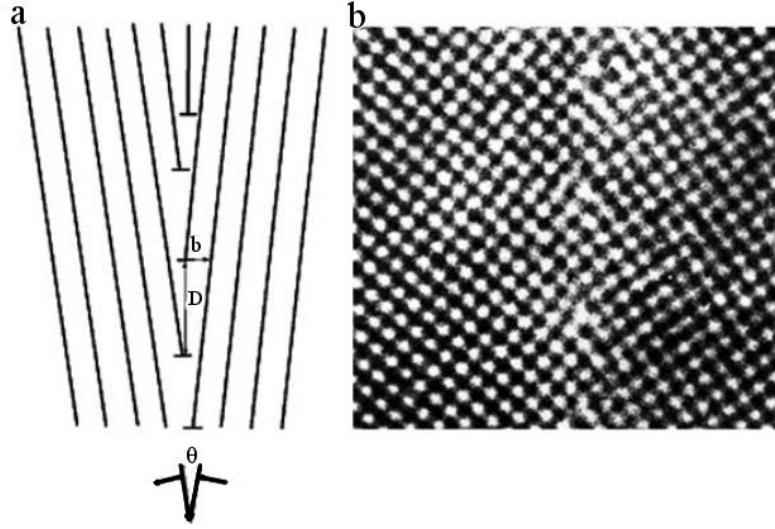
düşünüldüğünde tane sınırlarının karakteristik dağılımı, *yönelim sapması* ve *normal* in toplamı kullanılarak tanımlanır [37].

Eğik sınır, tane sınır alanı içerisindeki bir eksen etrafındaki rotasyondur. Bu nedenle sapma açısı eksenine tane sınırı normaline diktir. Dönük sınır ise, tane sınır alanına dik bir eksen etrafındaki dönmedir. Bu nedenle, sapma açısı tane sınır alanı normaline paraleldir [37]. İki bitişik tane yeterince düşük θ açısı ile yan yana geldiklerinde, bir grup özel dislokasyon oluşumuyla θ yönelim sapması kararlı konumunu alır (Şekil 2.5). Buradaki dislokasyon düzeni Burgers vektörü ile sağlanır, Burger vektörü ise dislokasyonların ilerleme yönünü tayin eder. Eğik tane sınırları kenar dislokasyonları ile formüle edilirken, dönük dislokasyonlar vida dislokasyon dizisinden oluşur [37].

Tane sınırı, yönelim sapma açısının aracılığı ile düşük açılı tane sınırları ve yüksek açılı tane sınırları olmak üzere iki gruba ayrılır. Sapma açısı θ değerinin 15° ye kadar olduğu bölgedeki tane sınırları düşük açılı tane sınırı olarak isimlendirilir. Şekil 2.5 de düşük açılı tane sınırına sahip Molibdenin elektron mikroskobu görüntüsü verilmiştir [5].



Şekil 2.4 Eğik sınır ve dönük sınır gösterimi [38].



Şekil 2.5 Düşük açılı tane sınırına sahip Molibdenin elektron mikroskobu görüntüsü [5].

Sapma açısı θ nın 11° den daha fazla olması durumunda yüksek açılı tane sınırları bölgesine geçilir. Bazı malzemelerde yüksek açılı tane sınırı bölgesi 15° den sonra gözlenir. Yüksek açılı tane sınırına sahip tane sınırlarının davranış biçimleri baştan aşağıya değiştiğinden dolayı buradaki yapıyı farklı bir biçimde tanımlamak gerekir. FCC kristallerde, çok fazla sayıda ve sistematik bir biçimde tane sınırı modellenmiştir. Bunun sonucunda, yüksek açılı tane sınırlarının tanımlanması için yapısal birim modeli geliştirilmiştir [39,40]. Bu modele göre, yüksek açılı tane sınırları yapısal birimlerin tekrarlamaıyla formüle edilir. Bu yapısal birimler, sınırlı sayıdaki atomların belirli düzenlerini temsil eder. Genel olarak tane sınırlarının yapıları, basit yapısal birimlere sahiptir.

Yüksek açılı tane sınırlarının birçok çeşidinin olması nedeniyle bunların sınıflandırılması gerekmektedir. Bu sınıflandırma yöntemleri; tesadüfi-yer örgü modeli, düzlemler arası mesafe ve tane sınır hiyerarşisi şeklindedir [5].

a) Tesadüfi-yer örgü modeli (Coincidence-Site Lattice-CSL)

Tarihsel olarak özel tane sınırlarının kimliklendirilmesi için kullanılan ilk modeldir. Bu model 1949 yılında Kronberg ve Wilson tarafından öne sürülmüştür [5]. Bu modelin dayanak noktası basitçe şunu varsayar; yan yana gelen her iki tane sınırında tane sınırında genişlik arttıkça kırılan bağların sayısı düşer ve atomik konumların tesadüfi oluşma olasılığı yükselir. Bu durumda tane sınır enerjisi düşüktür. Eğer Gibbs serbest enerjisi

minimum kabul edilirse (benzer bir durum örgü pozisyonundaki mükemmel düzenli atomlarda da vardır) bu durum anlaşılabilir. Böylece, mükemmel kristal konumuna sahip tesadüfi pozisyonlu atom sayısı tesadüfi olmayan durumlardakinden daha fazladır. Bu yol ile daha düşük tane sınır enerjisine sahip tane sınırları oluşur.

CSL nin sayısal olarak değerlendirilmesi Σ ile ifade edilir:

$$\Sigma = \frac{\text{Temel hücredeki tesadüfi yer sayısı}}{\text{Temel hücredeki toplam örgü sayısı}} \quad 2.11$$

Kübik bir örgüde bu ifade, yönelim sapmasına karşılık gelen simetrik eğik tane sınırının Miller indislerinden basitçe hesaplanabilir.

$$\Sigma = \delta(h^2 + k^2 + l^2) \quad 2.12$$

b) Düzlemlerarası mesafe (interplanar spacing)

Tane sınırlarını bir birlerinden ayırmak için uygulanan başka bir geometrik parametre ise düzlemler arası mesafedir. Düzlemler arası mesafe basit bir biçimde, iki kristal düzlem arasındaki en kısa mesafedir ve aşağıdaki biçimde tanımlanır:

$$d(hkl) = a \frac{\varepsilon}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad 2.13$$

Burada örgü parametresi a , ε ise tane sınırları için tanımlanan belirli bir değerdir ve 1 veya 1/2 değerlerini alır.

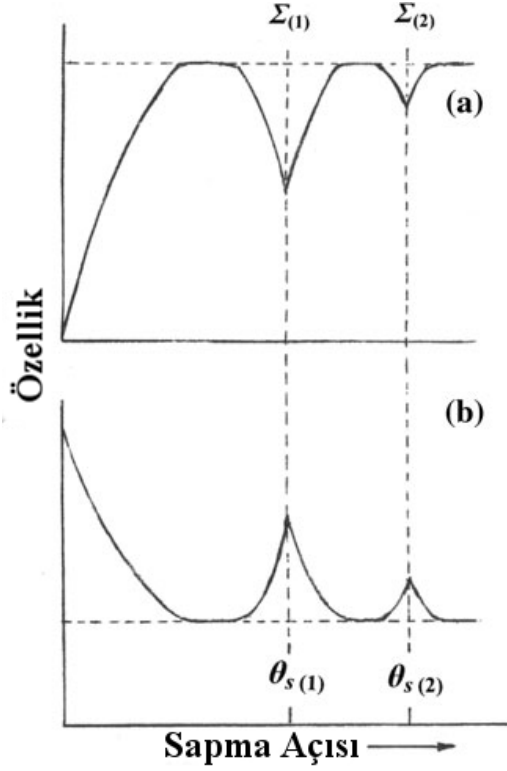
c) Tane sınırlarının hiyerarşisi

Tane sınır düzlemlerinin hiyerarşisinde tane sınırı düzlemlerinin birbirleriyle olan etkileşimlerinden yararlanarak tane sınırlarını sistematik bir biçimde düzenler. Bu hiyerarşi deneysel ve simülasyon çalışmalarına dayanmaktadır. Tablo 2.1 de bu hiyerarşi verilmiştir [5].

Tablo 2.1 Simetrik eğit tane sınır düzlemlerinin hiyerarşik sınıflandırılması [5].

CL	FCC yapısı		BCC yapısı	
	Düzlem	Σ	Düzlem	Σ
1	{111}	3	{112}	3
2	{113}	11	{123}	7
	{133}	19	{013}	5
	{012}	5	{111}	3
3			{114}	9
	{112}	3	{134}	13
	{115}	27	{235}	19
	{122}	9	{012}	5
	{155}	51	{015}	13
	{013}	5	{113}	11
	{023}	13	{116}	19
	{135}	35	{233}	11
			{334}	17
			{124}	15
4	{117}	51	{145}	21
	{114}	9	{257}	39
	{337}	67	{358}	49
	{335}	43	{347}	37
	{355}	59	{035}	17
	{377}	107	{037}	29
	{144}	33	{014}	17
	{117}	99	{017}	25
	{034}	25	{338}	41
	{035}	17	{3 3 10}	59
	{025}	29	{115}	27
	{014}	17	{118}	33
	{179}	131	{122}	9
	{157}	75	{455}	33
	{124}	21	{556}	43
	{357}	83	{223}	17
	{123}	7	{129}	43
	{159}	107	{127}	27
	{139}	91	{138}	37
	{137}	59	{147}	33
	{134}	13	{136}	23
			{124}	21
			{349}	53
			{237}	31
			{239}	47
			{457}	45
			{345}	25
			{356}	35

Tane sınırlarındaki yönelim sapmasına bağlı malzeme özelliklerinin sistematik değişimi Şekil 2.6 da görülmektedir.



Tip A Özellikleri-(a) eğrisi

Tane Sınır Enerjisi (seviye)
Korozyon (kalınlık/derinlik)
Difüzyon, Göç Kayma (oran/aktivasyon enerjisi)
Sertlik (seviye/kalınlık)
Elektriksel Direnç (seviye)

Tip B Özellikleri-(b) eğrisi

Kırılma (zor/zorlanma seviyesi)
Çökelme (nükleon yoğunluğu)
Tane Sınırı Faz Dönüşümü için Kritik Sıcaklık T_c
Süper-iletkenlik için Kritik Akım J_c

Şekil 2.6 Yönelim sapma açısının artması ile değişen malzeme [6].

Şekil 2.6 da yönelim sapmasıyla beraber malzemenin özelliklerinin değiştiği görülmektedir. θ_s sapma açısı değerleri özeldir ve Σ ile tanımlanan tesadüfî bölgelerin olduğu açılardır.

Şekil 2.6 (a) da sapma açısının büyümesiyle tip A da tanımlanan özelliklerde belirli bir açı değerlerine kadar artış gözlenirken θ_s özel açı değerlerine yaklaşıldığında bu özellikler azalma eğilimindedir. θ_s değerlerinden uzaklaşmaya başladıklarında ise yine bir yükseliş söz konusudur. Tip B de tanımlanan özelliklerde ise Şekil 2.6 (b) görüldüğü gibi tip A davranış biçiminin zıttı bir eğilim vardır.

3. ŞEKİL HATIRLAMALI ALAŞIMLAR

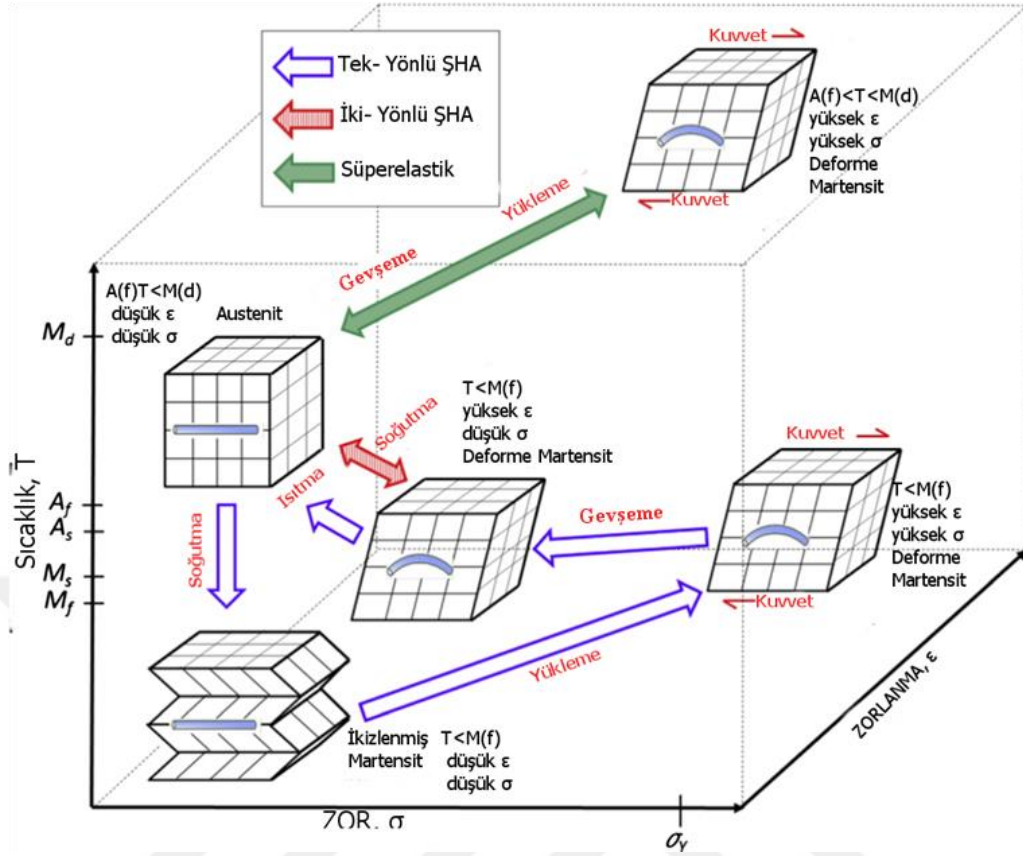
Şekil hatırlama etkisinin meydana gelmesindeki ana unsur katı-katı faz dönüşümüdür. Katı-katı faz dönüşümü; yarı kararlı ve difüzyonsuz, düşük sıcaklık ve düşük simetriye sahip martensit faz ile kararlı ve difüzyonlu, yüksek sıcaklık ve yüksek simetriye sahip austenit fazı arasında gerçekleşerek şekil hatırlama etkisinin ortaya çıkmasını sağlar. Şekil hatırlama olayı hem termal etki ile hem de mekanik etkilerle gerçekleşebilir. Tek yönlü, iki yönlü ve süperelastik davranış olmak üzere üç grupta toplanır [41].

a) Bir yönlü şekil hatırlama etkisi: Düşük sıcaklıktaki martensit fazda deforme durumlarını korurlar ancak sıcaklık artışıyla orijinal şekillerini geri kazanırlar. Bu etkideki, martensitten austenite faz dönüşümü esastır [42].

b) İki yönlü SHE: hem yüksek sıcaklıkta hem de düşük sıcaklıkta asıl şekillerini hatırlayabilirler. Bu etkiyi gösteren alaşımlar yüksek sıcaklıklarda bulundukları sürece yeteneklerini kaybetmeye daha meyillidirler ve “eğitilmelerine” ihtiyaçları vardır. Bu sebeplerden ötürü ticari olarak iki yönlü SHA kullanımı tek yönlü SHA’ya nazaran daha azdır ve tek yönlü SHA daha güvenilirdir. İki yönlü SHA’ların “eğitilmesi” için çeşitli yollar önerilmektedir. Bunlardan ikisi eş zamanlı ve harici yük-yardımlı indüksiyonudur. İki yönlü SHE ne sebebiyet veren faz geçişleri martensit↔austenit arasında çift yönlü gerçekleşir [42].

c) Süperelastiklik (Pseudoelastik): Tek ve iki yönlü SHA’ya nazaran termal aktivasyona gerek duymamaktadır. Bu etkide asıl unsur mekanik tetiklemedir. Malzeme üzerine etkiyen mekanik zor, malzemeyi deforme eder ancak zor kaldırıldığında numune eski halini geri kazanır. Tıpkı kauçuk bir malzemenin mekanik bir zora verdiği tepki gibidir. Süperelastiklik etkisinin gözlenmesi için martensit faz oluşumunda bir zora ihtiyaç duyulmaktadır. Bu martensit fazın başlaması için gerekli olan zor M_d ile ifade edilir. Süperelastiklik M_d ve A_f arasında gerçekleşmektedir [42].

Tek yönlü, iki yönlü ve süperelastik şekil hatırlama olayının şematize edilmiş hali Şekil 3.1 de verilmiştir.



Şekil 3.1 Şekil hatırlamalı alaşımların faz geçişleri ve kristal yapıları [42].

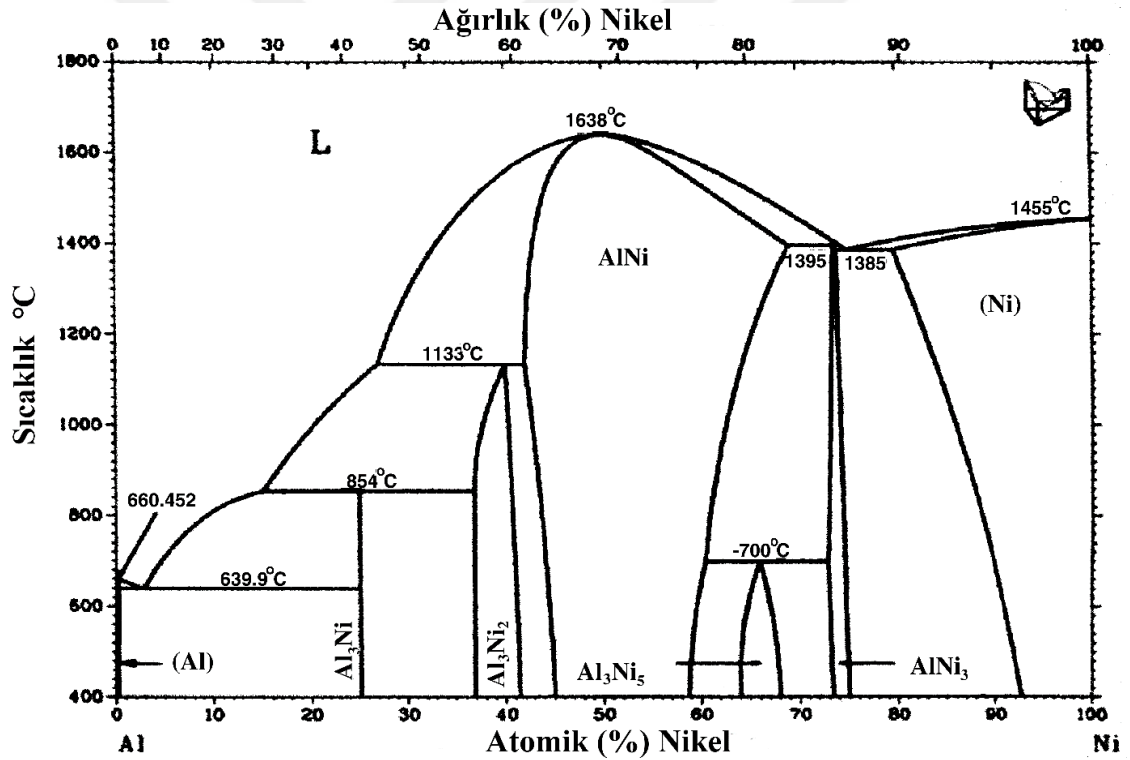
Çeşitli metallerin belirli oranlarda karıştırılmasıyla elde edilen bazı alaşımlarda şekil hatırlama olayı gözlenmiştir. Bu alaşımlar ile ilgili bilgi ve özellikler Tablo 3.1 de verilmiştir.

Tablo 3.1 Şekil hatırlama ve süperelastiklik gösteren alaşımlar [41]

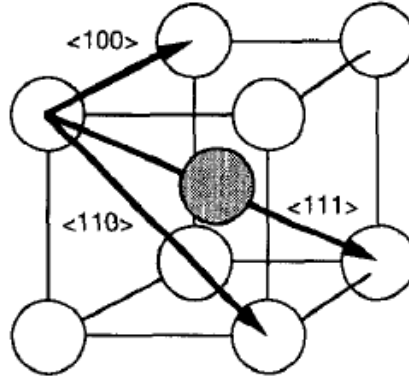
Alaşım	Kompozisyon (atomik %)	Yapı Değişimi	Sıcaklık Histerisizi °C	Düzen Durumu
Ag-Cd	44~49 Cd	B2→2H	~15	Düzenli
Au-Cd	46.5~50 Cd	B2→2H	~15	Düzenli
Cu-Zn	38.5~41.5Zn	B2→9R, rombohedral M9R	~10	Düzenli
Cu-Al-Ni	28~29 Al 3~4.5 Ni	DO ₃ →2H	~10 ~35	Düzenli Düzenli
Cu-Sn	~15 Sn	DO ₃ →2H,18R	---	Düzenli
Cu-Au-Zn	23~28 Au 45~47 Zn	Heusler→18R	~6	Düzenli
Ni-Al	36~38 Al	B2→3R	~10	Düzenli
Ti-Ni	49~51 Ni	B2→monoklinik B2→rambohedral	20~100 1~2	Düzenli
In-Tl	18~23 Tl	FCC→FCT	~4	Düzensiz
In-Cd	4~5 Cd	FCC→FCT	~3	Düzensiz
Mn-Cu	5~35 Cu	FCC→FCT	----	Düzensiz

Şekil hatırlamalı alaşımların ticari kullanımı için yüksek potansiyele sahip alaşımlardan birisi de Ni-Al alaşımıdır. Ni-Al alaşımları yüksek sıcaklık ve kaplama uygulamaları için iyi bir adaydır. Ayrıca çok yüksek erime sıcaklığına, diğer alaşımlara nazaran daha düşük bir yoğunluğa, yüksek sıcaklık korozyonuna ve oksidasyon direncine sahiptir. Bu özelliklerinden ötürü de geniş bir kullanım alanına sahiptir [43]. NiAl alaşımları beş tane farklı yapıya sahip intermetalik bileşiğe sahiptir. Bu bileşikler Al_3Ni , $AlNi_3$, Al_3Ni_2 , Al_3Ni_5 dir [44]. NiAl intermetalik bileşiklerinin faz diyagramı Şekil 3.2 verilmiştir.

Ni-Al alaşımlarının, Al_3Ni_5 alaşımında şekil hatırlama özelliği mevcuttur ve bu alaşım austenit fazda B2 yapısına sahiptir. B2 yapının şematik hali Şekil 3.3 verilmiştir.



Şekil 3.2 Ni-Al faz diyagramı [43].



Şekil 3.3 B2 yapının şematik gösterimi ve kayma vektörleri [45].

NiAl alaşımlar at.%62-69Ni bölgesinde B2 ana fazından termoelastik martensit faz dönüşümü geçirebildiğinden dolayı şekil hatırlama özelliğine sahiptir [46]. NiAl şekil hatırlamalı alaşımlarının M_s sıcaklığı kuvvetli bir biçimde Ni katkısına bağlıdır. Bu alaşımlarda M_s sıcaklığı değeri 503 K e kadar olduğu gözlemlendiğinden dolayı potansiyel bir yüksek sıcaklık ŞHA dir [47]. Ancak NiAl alaşımının doğal yapısı kırılğan olduğundan dolayı zayıflığı gidermek için demir, magnezyum, bor gibi üçüncü veya dördüncü bir elemen eklenebilir. NiAl alaşımları hala faz stabilizasyonu açısından sorunludurlar [47].

3.1 Katılardaki Martensit Faz Dönüşümü

Martensit faz, metal ve alaşımlardaki B2 ana fazın yani austenit (östenit) ana fazında sıcaklık ve dışardan bir zor uygulanarak oluşan ürün fazıdır. Austenit faz kararlı fazdır ve yüksek simetriye sahiptir. Ancak Martensit faz yarı kararlı bir fazdır ve düşük simetriye sahiptir. Martensit fazın oluşumunda difüzyon gözlenmez. Difüzyonsuz faz geçişlerinde atomlar komşuluklarını korurlar [48]. Martensit fazın oluşmasının ana sebebi kesme mekanizmasıdır [49, 50].

Martensit faz dönüşümlerinde termoelastik ve termoelastik olmayan dönüşüm tipleri mevcuttur. Termoelastik olmayan faz dönüşümlerinde, numune soğuma esnasında aniden gelişen patlama (burst) biçimindeki bir reaksiyonla (atermal olarak) faz oluşumu başlar ve ana faz içerisinde sıcaklık değişiminden bağımsız biçimde yayılarak gerçekleşir. Termoelastik faz dönüşümlerinde ise soğuma esnasında martensit faz sıcaklık değişimine bağlı olarak yayılır ve numune içerisinde yeni martensit bölgeler oluşur. Şekil hatırlamalı alaşımlarda genellikle termoelastik faz dönüşümü gözlenmektedir. Martensit dönüşüme ait bu dönüşüm tipleri sistematik bir biçimde Tablo 3.2 de verilmiştir [51].

Tablo 3.2 Martensit dönüşüm tiplerinin genel karakteristikleri [51].

Tip	Çekirdeklenme	Büyüme	Kristal Kusurları
Termoelastik	Soğutma etkisi	Sıcaklık düşüşüyle orantılı	Dönüşüm etkili
Termoelastik olmayan	Soğumanın Ani Etkisi	Ani ve hızlı, soğuma hızından bağımsız	Dönüşüm etkili ve plastik deformasyonla

Martensit faz başlama sıcaklığının bilinmesi şekil hatırlama etkisinin teknolojik uygulamaları açısından önemlidir. Martensit fazın başlangıç sıcaklığını (M_s) etkileyen faktörlerin belirlenmesi de bu nedenle önemlidir. M_s sıcaklığını etkileyen faktörler şöyle sıralanabilir [31]:

1. Kompozisyon: M_s sıcaklığı alaşımın yapı taşı yoğunluğuyla neredeyse doğrusal bir davranış sergiler. Kompozisyon oranı limitleri içerisinde dönüşüm sıcaklığının iyi bir tahmini yapılabilir.
2. Düzen derecesi: M_s sıcaklığı $L2_1$ düzeninin artmasıyla artış gösterir. Bunun sebebi martensit yapıdaki komşu atomlar arasındaki kusurların azalmasıdır. Düzen derecesi hızlı soğutma (quench) vasıtasıyla değiştirilebilir. Hızlı soğutmayla $L2_1$ yapısının anti-faz sınırları meydana gelir.
3. Tane Boyutları: M_s sıcaklığı doğrusal bir şekilde tane boyutunun karekökünün tersiyle bağlantılıdır. Bu durum Hall-Petch etkisiyle ilişkili olarak yorumlanır.
4. Boşluklar (vacancies): M_s sıcaklığı boşluk yoğunluğuyla artış göstermektedir.
5. Dislokasyonlar: Çekirdeklenme için oldukça elverişli yerler olarak davranırlar, dönüşüm sıcaklığını desteklerler ve böylelikle M_s sıcaklığının artmasına sebep olurlar.

3.2 Atermal Faz Dönüşümleri

Örgü içindeki fononsal dalgalanmalar bir faz dönüşümünün meydana gelmesi için gerekli kabul edilir. Ancak bazı katılar orta sıcaklık bölgesinde birinci mertebeden faz dönüşümü olarak kabul edilen atermal faz dönüşümü sergilerler [49]. Bu dönüşümlerin kinetiği üzerinde termal dalgalanmalar hakim rol üstlenmez. Bu nedenle, atermal dönüşümler dış parametrelerin (zor, sıcaklık, manyetik alan gibi) değişimi altında meydana gelir. Atermal dönüşüm üzerinde etkili olan bu parametreler, yüksek ve düşük simetrik fazlar arasındaki serbest enerji farkını değiştirir. Bu türden faz dönüşümleri sergileyen örnekler manyetik ve yapısal faz dönüşüm ailelerinde bulunur [49]. Manyetik ve

yapısal bir faz dönüşümün gerçekleşebilmesi için uzun menzilli etkileşimler gereklidir [49]. Geleneksel olarak martensit faz dönüşümleri atermal olarak bilinir [52].

3.3 Termal Faz Dönüşümü

Termal faz dönüşümlerinde martensit faza ait bölgeler ve plakalar sıcaklığın azalmasıyla veya artmasıyla orantılı olarak değişir [53]. Atermal faz dönüşümlerinden farklı olarak bu faz dönüşümlerinde termal dalgalanmalar etkin rol oynar. Termal faz dönüşümlerinde yapısal kusurlar dönüşümden etkilenerek ortaya çıkar ve termal faz dönüşümlerinin sıcaklık histerisizi atermal dönüşümlere nazaran daha düşüktür [51]. Süper örgüye sahip alaşımlar termal faz dönüşümüne sahiplerdir [43]. Şekil hatırlamalı alaşımlarda görülen martensit faz dönüşümleri termal faz dönüşümleridir [41,51, 53, 55].

4. MOLEKÜLER DİNAMİK YÖNTEMİ

MD metodu, analitik olarak çözülmesi zor problemlerin nümerik çözümlerini bulmayı ve böylece oluşturulan teorilerin deney sonuçları ile uyumluluğunu test etmemize olanak sağlamaktadır. Yani deneysel bilgilerimiz ile teorik bilgilerimiz arasında bir köprü kurar. MD metodu vasıtasıyla deneysel olarak gözlemlenmesi mümkün olmayan veya deneysel gözlemin çok zor olduğu boyutlardaki davranışları incelememize yardımcı olur [9-12].

MD hesaplamaları genellikle üç adımda gerçekleştirilir: **a)** hazırlık, **b)** dengeleme ve **c)** analiz [9]. Birinci adımda, oluşturulan sistem başlangıç değer problemi haline getirilir ve sistemin ilk konumu ile hız değerleri tanımlanarak başlangıç şartları meydana getirilir. İkinci kısımda, sayısal iterasyon algoritmaları vasıtasıyla hareket denklemleri bilgisayarda çözülür ve oluşturulan sanal yapının belirlenen termodinamik koşullar için minimum enerjili bir konuma sürüklenmesi sağlanır. Son adımda ise termodinamik olarak dengelenmiş sistemde sisteme ait fiziksel ölçümler (hesaplamaların) yapılır. İyi bir MD simülasyonunda dikkat edilmesi gereken temelde iki unsur mevcuttur. Bunlardan birincisi sistemin gözlenmek istenen özelliklerine uygun başlangıç şartlarının seçilmesidir. Diğerisi ise MD sistemini tanımlayan potansiyel fonksiyonunun doğru biçimde tanımlanmasıdır.

MD benzetim çalışmalarında amaca uygun doğru bir hareket denklemi elde etmek için sistem ile ilgili bazı kısıtlamalar getirilebilir. Sistemdeki atom sayısının sabit kaldığı ve basınç ile sıcaklığın sabit tutulduğu topluluklar oluşturulabilir. Buna başka bir örnek ise sistemin atom sayısının, hacminin ve enerjisinin sabit tutulduğu NVE istatistik topluluğu verilebilir. Bunlara ek olarak NPH, NVT toplulukları da kullanılabilir[56].

Şekil hatırlamalı alaşımlarda faz dönüşümünün MD ile incelenmesi çalışmalarında genellikle NPT istatistik topluluğu tercih edilmektedir [18, 20, 55, 57].

4.1 NPT Topluluğu için Moleküler Dinamik Yöntemi

NPT topluluğunda sistemin atom sayısının, basıncının ve sıcaklığının sabit kalması için uygun bir model oluşturulur. Böyle bir modelde bu nicelikler sabit bir ortalama değer etrafında uygun şekilde dalgalanma gösterir. Bu toplulukta sistemin hacmi ve enerjisi ise simülasyon boyunca değişkendir [58]. NPT topluluğunun öncülüğünü Andersen yapmıştır

[59]. Ardından Martyana ve arkadaşları bu yaklaşımı geliştirmişlerdir [60]. Martyana ve arkadaşlarının önerdiği hareket denkleminde konum ve momentum

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \frac{p_\varepsilon}{W} \mathbf{r}_i \quad 4.1$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i - \left(1 + \frac{d}{dN}\right) \frac{p_\varepsilon}{W} \mathbf{p}_i - \frac{p_{\xi_1}}{Q_1} \mathbf{p}_i \quad 4.2$$

şeklinde ifade edilir [60]. Burada N parçacık sayısıdır. ξ_1 , p_{ξ_1} ve Q_1 değişkenleri termostat parametreleridir. Barostat değişkenleri ise ε , p_ε ve W ile tanımlanmıştır. ε sistem hacminin logaritmasını tanımlar ve

$$\varepsilon = \ln(V/V(0)) \quad 4.3$$

ile tanımlanır. $V(0)$ değeri $t=0$ anındaki hacme karşılık gelir. W , ε ile ilişkili ve sistem kütlesini temsil eden bir parametre olup p_ε ise ε nun momentum eşleniğidir. Böylece d boyutlu hacim için hareket denklemi, konum ve momentum ifadeleriyle birleştirildiğinde

$$\dot{V} = \frac{dV p_\varepsilon}{W} \quad 4.4$$

$$\dot{p}_\varepsilon = dV(P_{int} - P_{ext}) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - \frac{p_{\xi_1}}{Q_1} p_\varepsilon \quad 4.5$$

denklemleri elde edilir. P_{ext} dış basıncı temsil eder ve sıcaklık gibi sistemi bu basınçta kalmaya zorlar. P_{int} , sistemin iç basıncını tanımlar ve

$$P_{int} = \frac{1}{dV} \left[\sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} + \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right) - dV \frac{\partial U(V)}{\partial V} \right] \quad 4.6$$

fonksiyonu ile elde edilir. Burada U ifadesi potansiyel enerjiyi temsil eder.

NPT yaklaşımında sistemin hareket denklemi için korunacak büyüklükler

$$H_{N,P_{ext},T} = \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \frac{p_\varepsilon^2}{W} + \sum_{k=1}^M \frac{p_{\xi_k}^2}{Q_k} + (dN + 1)k_B T \xi_1 + k_B T \sum_{k=1}^M \xi_k + P_{ext} V \quad 4.7$$

denklemleri ile sağlanır.

4.2 Gömülü Atom Metodu

Moleküler dinamik simülasyon çalışmalarında metal ve alaşımların atomları arasındaki fiziksel etkileşimleri tanımlamak için yaygın olarak çok cisim etkileşme potansiyel fonksiyonlarından yararlanılır. Kullanılan bu fonksiyonlar metaller için deneysel çalışmalarla uyumlu sonuçlar üretir. Çok cisim etkileşmelerini dikkate alan ve en çok kullanılan yaklaşım gömülü atom metodudur [61].

EAM yaklaşımı, kristal yapı içerisine bir atomu yerleştirmek için gerekli olan gömme enerjisi ile itici etkileşmeleri temsil eden bir enerjinin toplamı şeklinde tasvir edilir. Burada gömme enerjisi, gömülmek istenen atomun yerleştirilmek istendiği koordinattaki komşu atomlardan kaynaklanan elektronik yük yoğunluğu nedeniyle oluşan çekici etkileşmelerden doğan enerji terimlerinin toplamı şeklinde ifade edilir. Böylece, N atom sayısına sahip bir kristalin toplam potansiyel enerjisi

$$E_T = \sum_{i=1}^N E_i \quad 4.8$$

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \varphi(r_{ij}) + F_i[\bar{\rho}_i] \quad 4.9$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i}^N \rho(r_{ij}) \quad 4.10$$

olarak hesaplanır [25,61-66]. Burada $\varphi(r_{ij})$ ifadesi itici etkileşmeleri, $\rho(r_{ij})$ fonksiyonu herhangi bir komşu atomun i koordinatındaki yük yoğunluğunu tanımlar. $F_i[\bar{\rho}_i]$ fonksiyoneli ise gömülme enerjisine karşılık gelir. EAM metodunun bu üç fonksiyona bağlı olarak farklı biçimleri mevcuttur. Genel olarak en çok bilinenleri Finnis-Sinclair (FS) [62], Johnson [63], Voter-Chen (VC) [64] ve Sutton-Chen (SC) [65] modelleridir.

EAM yaklaşımında herhangi bir i atomu üzerine etki eden kuvvet ifadesi E_i potansiyel enerji fonksiyonun gradyentine karşılık gelir ve aşağıdaki gibi hesaplanır [61].

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i} \left[\frac{\partial F_i \partial \rho_i}{\partial \rho_i \partial r_{ij}} + \frac{\partial F_i \partial \rho_i}{\partial \rho_j \partial r_{ij}} + \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right] \hat{r}_{ij} \quad 4.11$$

NiAl alaşımının farklı kompozisyonları için atomlararası etkileşmeleri doğru bir biçimde tanımlamak maksadıyla çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Mevcut çalışmalar

içerisinde NiAl alaşımı için en iyi sonucu veren EAM yaklaşımı 2009 senesinde Pun ve Mishin [25] tarafından geliştirilmiştir. Geliştirilen bu potansiyel enerji fonksiyonu, NiAl alaşımının birçok özelliğini deneysel sonuçlar ile örtüşecek biçimde hesaplayabilme kabiliyetine sahiptir.

4.2.1 Pun-Mishin gömülü atom yaklaşımı

Pun ve Mishin tarafından NiAl için geliştirilen potansiyel enerji fonksiyonu, Ni ve Al için ikili etkileşme ifadesi daha önceki çalışmalarda olduğu gibi

$$\Phi(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) \left[\frac{V_0}{b_2-b_1} \left(\frac{b_2}{zb_2} - \frac{b_1}{zb_2} + \delta \right) \right] \quad 4.12$$

biçiminde ifade etmiştir [66]. $\Phi(r)$ Fonksiyonunda $z = r/r_1$ ve geriye kalan b_1 , b_2 , V_0 ve δ değişkenleri potansiyel enerji fonksiyonunun parametreleridir. Bu parametreler deneysel veriler ile örtüşecek biçimde denklemin fit edilmesiyle elde edilir. Pun-Mishin EAM yaklaşımında elektronik yük yoğunluğu ifadesi

$$\rho(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) [A_0 z^y e^{-\gamma z} (1 + B_0 e^{-\gamma z}) + C_0] \quad 4.13$$

şeklinde tanımlanmıştır. Buradaki A_0 , B_0 , C_0 , r_c , h , y ve γ ifadeleri $\rho(r)$ fonksiyonunun parametreleridir.

Bu yaklaşımda Ni ve Al atomları arasındaki atomik etkileşmeleri ifade etmek için

$$\varphi_{NiAl}(r) = \psi\left(\frac{r-r_c}{h}\right) [a_1 e^{-b_1 z} \varphi_{NiNi}(c_1(r-r_1)) + a_2 e^{-b_2 z} \varphi_{AlAl}(c_2(r-r_2))] \quad 4.14$$

şeklinde bir potansiyel kullanılır. Burada $\psi(x)$ ile tanımlanan çarpan fonksiyonu potansiyel kesme fonksiyonu olarak adlandırılmıştır ve

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{x^4}{1+x^4}, & x < 0 \\ 0, & x \geq 0 \end{cases} \quad 4.15$$

fonksiyonuyla hesaplanır. Bu fonksiyon vasıtası ile r_c kesim mesafesinin yumuşak bir şekilde sıfıra inmesi kesinleştirilir. Bu şekilde $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, r_1, r_2, r_c$ ve h olmak üzere on iki tane fit parametresi bulunur. Bu parametreleri belirlemek için NiAl alaşımasının B2 fazındaki deneysel örgü sabitleri (a_0), elastik sabitleri (c_{ij}) ve düzenlenme enerjisi (E_f) kullanılır. E_f düzenlenme enerjisi Ni_nAl_m kompozisyonlu bir alaşım için

$$E_f = \frac{E_0(Ni_nAl_m) - nE_0(Ni) - mE_0(Al)}{n+m} \quad 4.16$$

şeklinde verilir. Bu ifadedeki E_0 , elementlerin veya alaşımların ayrı ayrı kohesif enerjilerini tanımlar. Deneysel verilerden faydalanılarak hazırlanan bu potansiyel enerji fonksiyonu ile Ni, Al ve NiAl için hesaplanan erime sıcaklıklarının deneysel veriler ile karşılaştırılması Tablo 4.1 de verilmiştir.

Tablo 4.1 Ni, Al ve NiAl için Pun-Mishin EAM yaklaşımından elde edilen erime sıcaklıklarının deneysel veriler ile karşılaştırılması.

Faz	Ni	Ni ₃ Al	NiAl	Al
EAM (Pun-Mishin)	1701	1678	1780	1042
Deneysel	1728	1645	1911	933
Fark (%)	1,6	1,9	6,8	11,7

NiAl alaşımı için EAM yaklaşımına göre geliştirilen Pun-Mishin potansiyeli deneysel sonuçlar ile örtüşmesi ciddi bir avantaj olsa bile bu potansiyel fonksiyonun sahip olduğu birçok parametre fonksiyonun analitik hesaplanmasını güçleştirmektedir. Buna benzer potansiyel enerji fonksiyonlarının kullanıcılar tarafından daha rahat kullanılması adına bu potansiyeli geliştiren araştırmacılar, kendi kodlarını yazarak potansiyel fonksiyona ait veri tabloları oluşturmuşlardır. Üretilen bu veri tabloları güvenilir internet kaynaklarından temin edilebilmektedir [67].

4.3 Moleküler Dinamik Paket Programları

MD benzetim çalışmaları yapabilmek için MD algoritmalarından birisini kullanmak ve tasarlanan sistem için uygun bir potansiyel enerji fonksiyonunun analitik biçimlerinin herhangi bir programlama dili ile yazılması gerekmektedir. Bunun için *Fortran*, *C/C++* veya *Python* gibi programlama dillerinin üst seviyede bilinmesine ihtiyaç duyulmaktadır. Buna ek olarak zamandan ciddi tasarruflar sağlanması adına paralel programlama ve *CUDA*

hesaplama yöntemlerinin bilinmesine de ihtiyaç duyulmaktadır [68]. Ancak, günümüzde simülasyon çalışmaları yapan araştırmacılara kolaylık sağlanması adına çeşitli MD paket programları geliştirilmiştir [13]. Bu programların bir kısmı ücretli iken bir kısmı da açık kaynak kodludur. Bu programlar ile ilgili bilgiler Tablo 4.2 de verilmiştir.

Bu tez çalışmasında *LAMMPS* paket programı kullanılmıştır [14]. Çalışmalarda zaman kazanmak için daha hızlı işlem yapabilen *CUDA* hesaplama yönteminden ve ULAKBİM bünyesinde faaliyet gösteren ulusal hesaplama ağı (*TRUBA-TRGRID*) yoğun olarak kullanılmıştır [69].

Tablo 4.2 MD simülasyon çalışmaları için kullanılabilecek ücretli ve ücretsiz programlar [13].

Program İsmi	Kullanım Alanı	Lisans	Erişim
<i>NAMD+ VMD</i>	Hızlı, Paralel MD, <i>CUDA</i>	Açık kaynak, Akademik kullanım	Beckman Institute
<i>LAMMPS</i>	Katıhal ve yumuşak malzemeler için potansiyel fonksiyonlarına sahip	Ücretsiz, açık kaynak kodlu. (GNU GPLv2)	Sandia
<i>GROMACS</i>	Yüksek Performanslı MD	Ücretsiz (GNU GPLv2)	gromacs.org
<i>CP2K</i>	Katıhal, sıvılar ve biyolojik sistemler için atomistik ve moleküler dinamik simülasyon yapabilir.	Ücretsiz (GNU GPLv2)	<i>CP2K</i>
<i>CHARMM</i>	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi	Ticari	charmm.org
<i>BOSS</i>	OPLS	Ticari	Yale University
<i>AMBER</i>	Moleküler yapılara ait potansiyel enerji fonksiyonlarının üretilmesi	Ticari	ambermd.org
<i>ACEMD</i>	<i>CHARMM</i> veya <i>AMBER</i> kuvvet alanlarını kullanarak MD simülasyonu yapar. Yüksek dereceden optimize edilmiş <i>CUDA</i> kullanarak NVIDIA GPU üzerinde çalışabilir.	Basit sürümü ücretsiz. Ticari sürümü bulunmaktadır	Acellera Ltd.
<i>Abalone</i>	Özellikle Biyomoleküler sistemlerin ve protein katlanımının çalışılmasına yöneliktir.	Ücretsiz	Agile Molecule

4.4 LAMMPS Paket Programı

LAMMPS paket programı açık kaynak koduna sahiptir. 1990'ların ortalarından Sandia ve LLNL laboratuvarlarının Gray, Bristol Myers Squibb ve Dupont şirketleri ile aralarından imzaladıkları CRADA araştırma geliştirme anlaşması neticesinde Steve Plimpton öncülüğünde yazılmaya başlanmıştır. *LAMMPS* paket programının temel amacı

büyük ölçekte klasik moleküler dinamik simülasyonları geliştirmektedir. İlk *LAMMPS* paket programı *Fortran-77* ile yazılmaya başlanmış, ardından *Fortran-90* ile güncellenmiş ve günümüzde *C++* sürümü ile yayınlanmıştır. Açık kaynak kodlu olması sebebiyle araştırmacıların sürekli eklemeleri sayesinde MD simülasyonlar ile ilgili güncel konulara çok çabuk şekilde adapte olabilmektedir. Program yangın olarak kullanılan bütün işletim sistemlerine destek vermektedir. Buna ek olarak MPI, OPENMP gibi paralel programlara kütüphaneleri ile çalışmaları desteklemekte olup son dönemlerde önemi daha iyi anlaşılmaya başlanan GPU (*CUDA*, *OpenGL*) hızlandırıcılarını da kullanmaktadır.

LAMMPS paket programının EAM, MEAM, Stillinger-Weber, Tersoff ve ReaxFF gibi karmaşık yapıları üst düzey potansiyel enerji fonksiyonlarını rahat bir biçimde kullanması, onu diğer programlardan üstün kılar. *LAMMPS* paket programında sıkça kullanılan komutlar ve bu komutların işlevi Tablo 4.3 de verilmiştir. *LAMMPS* paket programının diğer komutlarına ulaşmak için *LAMMPS* in internet sitesinde bulunan *LAMMPS* Manuel dosyası incelenebilir.

Tablo 4.3 Sıkça kullanılan bazı *LAMMPS* kodları ve kodların işlevleri.

units	Hesaplamalarda kullanılacak birim sisteminin tanımlanması
dimension	Hesaplamaların kaç boyutlu gerçekleşeceğini tanımlanması
boundary	Periyodik sınır şartı uygulanacak doğrultuların belirlenmesi
lattice	Örgü modeli ve örgü sabiti değerlerinin programa verilmesi
read_data	Başlangıç model sistem dosyasının tanımlanması
pair_style	Atomlararası etkileşmeler, potansiyel fonksiyonun tipinin seçimi
pair_coeff	Potansiyel fonksiyonunun parametreleri ve etkileşme dosyasının tanımlanması
group	Belirli bir atom grubu tanımlama
timestep	İntegrasyon için zaman adımı büyüklüğünün tanımlanması
velocity	Başlangıç atom hızlarının oluşturulması ve sıcaklık tanımlama
compute	İstenilen niceliklerin hesaplanması
variable	Program içinde yeni bir değişken tanımlanması
thermo	Sonuçların yazdırma formatının ayarlanması
dump	Atom koordinatları ve niceliklerinin dosyaya yazdırılması
fix	MD parametrelerinin tanımlanması ve hesaplamaların tanımlanması
run	Simülasyon toplam integrasyon adımının tanımlanması

4.5 Moleküler Dinamikte Analiz Yöntemleri

Üç boyutlu bir moleküler dinamik simülasyonunda sadece atomik konumlar ve hızlar dikkate alındığında tek bir MD zaman adımında $6N$ adet veri oluşmaktadır. Ortalama bir simülasyon süresinin 1 milyon MD adımı kadar olacağı düşünülürse bu tür simülasyonlardan elde edilen sonuçların çeşitli analiz programları kullanılarak incelenmesine ihtiyaç duyulmaktadır. *OVITO* [26] ve *VMD* [70] gibi analiz programları bu ihtiyacı karşılar ve *LAMMPS* paket programı ile elde edilen veriler bu analiz programlarından yararlanılarak incelenebilir. Bu analiz programları yardımıyla simülasyona ait ek hesaplamalar yapılabilir, anlık yapısal ekran görüntüleri elde edilebilir veya animasyonlar üretilebilir.

OVITO (Open Visualization Tool), Almanya'daki Darmstadt teknoloji üniversitesinden Alexander Stukowski tarafından geliştirilen atomik simülasyonlar için bilimsel görüntüleme ve analiz programıdır. Programın Windows, Linux ve MacOS işletim sistemlerine yönelik sürümleri bulunmaktadır. Açık kaynak kodlu bu yazılım gün geçtikçe kendisini geliştirmekte, yeni özellikler eklenmekte ve programdaki hatalar giderilmektedir. *OVITO* programı MD ve Monte-Carlo tabanlı simülasyonların görüntülenmesi ve incelenmesinde son derece kullanışlı bir zemin oluşturur [26]. *Python* programlama dilini bilen kullanıcılar için de *Python* ara yüzü mevcuttur. *OVITO* sayesinde benzetime ait çeşitli parametrelerde hesaplanabilir ve hesaplanan bu parametrelerin çıktısı alınabilir. Bu çıktılar grafik çizme veya başka analiz programlarında da kullanılabilir. *OVITO* programında hali hazırda bulunan bir simülasyon dosyasına çeşitli analizler ve görüntüleme özellikleri eklenebilmektedir. Bu analizlere faz tayini, dislokasyon analizi, atomik zorlanma gibi örnekler verilebilir [26].

OVITO, faz dönüşümlerini rahat biçimde görmemiz için CNA (Common Neighbor Analysis) yöntemini bizlere önermektedir. Bu analizde atomların çevrelerindeki komşulukları dikkate alınarak atom çiftlerinin bir bakıma parmak izleri çıkartılarak hangi kristal yapıda oldukları tespit edilir [71]. Bu yöntemin temeli radyal dağılım fonksiyonuna dayanır. Sistemi temsil eden radyal dağılım fonksiyonunun ilk piki en yakın komşulukları temsil eder. Bu ilk pikin belirlenmesinde $r < r_c$ şartı aranır. Bu şart ifadesindeki r , referans noktasının komunu, r_c ise radyal dağılım fonksiyonunun ilk minimum konumunu tanımlar. Bu şart sayesinde “sınırlanmış” atom çiftleri elde edilir. Her atom çifti jkl biçiminde üç indeks ile sınıflandırılır [71]. İlk indeks j paylaşılan en yakın komşuluk sayısını, ikinci

indeks k ortak komşular arasındaki bağların sayısını temsil eder. Son indeks l ise paylaşılan komşular tarafından oluşturulan en uzun bağ zincirindeki bağların sayısını temsil eder [71]. Ortak komşu analizinde genel ifadesiyle radyal dağılım fonksiyonu

$$g(r) = \sum_{jkl} g_{jkl}(r) \quad 4.17$$

ile tanımlanır. Radyal dağılım fonksiyonunda her pike karşılık çiftlerin toplam sayısı incelenen yapının etkili bir ölçümüdür.



5. BULGULAR ve TARTIŞMALAR

Bu tez çalışmasında, farklı boyutlarda ve farklı kompozisyonlarda 12 adet tek kristal model ile farklı boyutlarda ve farklı tane sayılı 18 adet polikristal model olmak üzere toplamda 30 adet model yapı oluşturulmuştur. Bu yapılar Voronoi hücreleme tekniğinin [72,73] bilgisayar kodu haline getirilmiş formu olan *Voro++* [23] kod kütüphanesinden yararlanan *LATGEN* [24] yazılımı kullanılarak Linux (Ubuntu) işletim sisteminde üretilmiştir. Üretilen modellerin atom koordinatlarını içeren dosya *data.pos* olarak kaydedilmiştir. Üretilen hem tek kristal hem de polikristal bütün modeller, x , y ve z koordinatlarında periyodik sınır şartlarına sahip, B2 kristal yapılı ve [001] örgü yönelimine sahip nano ölçekli küp biçimlidir. Her model sistem için NPT istatistik topluluk şartları kabul edilmiş olup *LAMMPS* programı yardımıyla simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Model sistemlerin hareket denklemlerinin integrasyonunda Verlet hız algoritması kullanılmış olup integrasyon zaman adımı büyüklüğü bütün sistemlerde 2 fs olarak seçilmiştir.

5.1 Tek Kristal Modeller

Termodinamik özelliklerinin incelenmesi için oluşturulan tek kristal modellerin, model numaraları ve modellere ait örgü parametreleri cinsinden boyutları ve her bir modelin Ni, Al ve toplam atom sayıları Tablo 5.1 de verilmiştir.

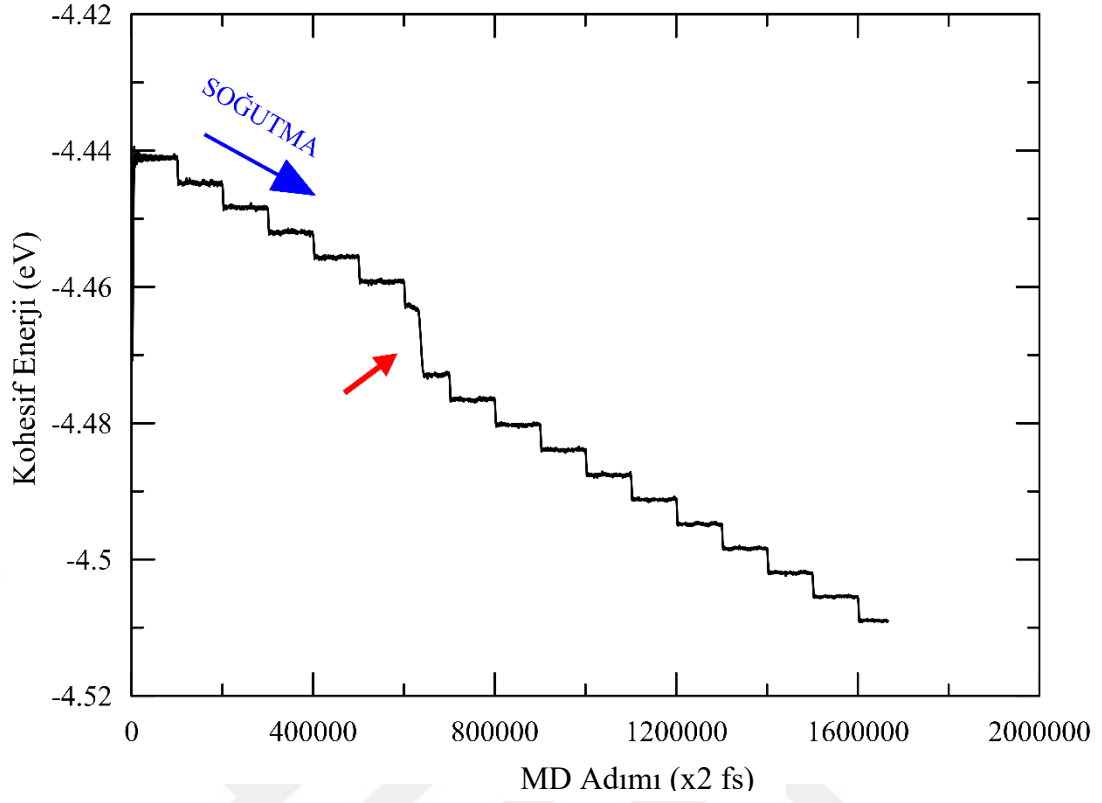
Tek kristal yapı için oluşturulan bütün modellerde başlangıç sıcaklık değeri 800 K dir. Oluşturulan modellerin termodinamik incelemesini yapmak ve sistemin simülasyon boyunca davranışını incelemek maksadıyla, kohesif enerji-MD adımı, hacim-MD adımı, kohesif enerji-sıcaklık ve sıcaklık-hacim grafiklerinden yararlanılmıştır. Tek kristal için oluşturulan 13 modelde de analizler bu grafikler üzerinden yapılmıştır. Yapılan bu analizler, tez çalışmasında tek kristal için yalnızca S4.75 (%75Ni kompozisyonlu ve büyüklük sıralamasında 4. sırada yer alan tek kristal model) modeli için gösterilecektir. Bu model için yapılan çalışmada başlangıç sıcaklığı 800 K alınarak sıcaklık her 100.000 MD adımında 25 K düşürülmüş ve son olarak 300 K ne indirilmiştir.

Tablo 5.1 Tek kristalli modellere ait bilgiler.

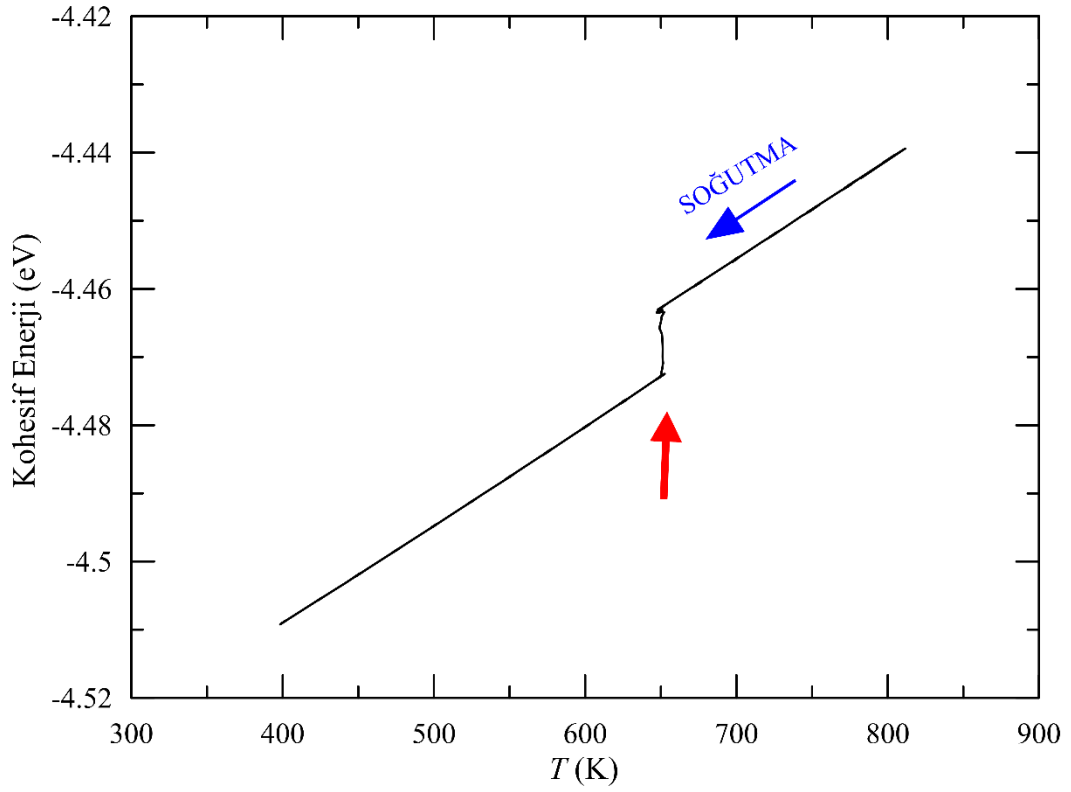
Model Numarası	Örgü parametresi cinsinden ölçüler	Ölçüler (nm)	Ni Atom Sayısı	Al Atom Sayısı	Kompozisyon (%Ni)	Toplam Atom Sayısı
	x x y x z	x x y x z				
S1.75	10 x 10 x 10	2,88 x 2,88 x 2,88	1500	500	75	2000
S2.68	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2350	1106	68	3456
S2.69	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2385	1071	69	3456
S2.70	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2419	1037	70	3456
S2.71	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2454	1002	71	3456
S2.72	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2488	968	72	3456
S2.73	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2522	934	73	3456
S2.74	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2557	899	74	3456
S2.75	12 x 12 x 12	3,54 x 3,45 x 3,45	2592	864	75	3456
S3.75	20 x 20 x 20	5,76 x 5,76 x 5,76	12000	4000	75	16000
S4.75	30 x 30 x 30	8,64 x 8,64 x 8,64	40500	13500	75	54000
S5.75	40 x 40 x 40	11,52x11,52x11,52	96000	32000	75	128000

S4.75 Model sistemi için kohesif enerjinin zamana göre değişimi Şekil 5.1 de verilmiştir. Grafik incelendiğinde, kohesif enerjinin zamanla (sıcaklık azalmasıyla) kademeli olarak azaldığı görülür. Şekilde görülen kademeli azalmalar sistem sıcaklığının düşürülmesine karşılık gelir. Kohesif enerjideki kademeli azalmaların dışında beklenmedik hareketlerin oluşması sistemde bir faz dönüşümü olduğuna işaret eder [74]. Böyle bir değişim Şekil 5.1 de kırmızı ok işareti ile gösterilen 600.000 MD adımıyla görülmektedir.

S4.75 Model sistemi için kohesif enerjinin sıcaklığa bağlı olarak çizilen grafiği Şekil 5.2 de gösterilmiştir. Kohesif enerji sıcaklığın azalmasıyla doğrusal bir biçimde azalmaktadır. Ancak sıcaklık 650 K olduğunda kırmızı ok işaretinin olduğu yerde kohesif enerjide beklenmedik ani bir azalma olması, bu sıcaklıkta bir faz dönüşümü olabileceğini akla getirmektedir. Burada bir faz dönüşümünün olduğunu kesin olarak söyleyebilmek için yapısal özelliklerin de dikkatli şekilde incelenmesi gerekmektedir. İleride verilen yapısal analizlerden bu sıcaklık değerinde yapısal bir faz dönüşümü olduğu anlaşılmaktadır.



Şekil 5.1 S4.75 modeli için Kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi.

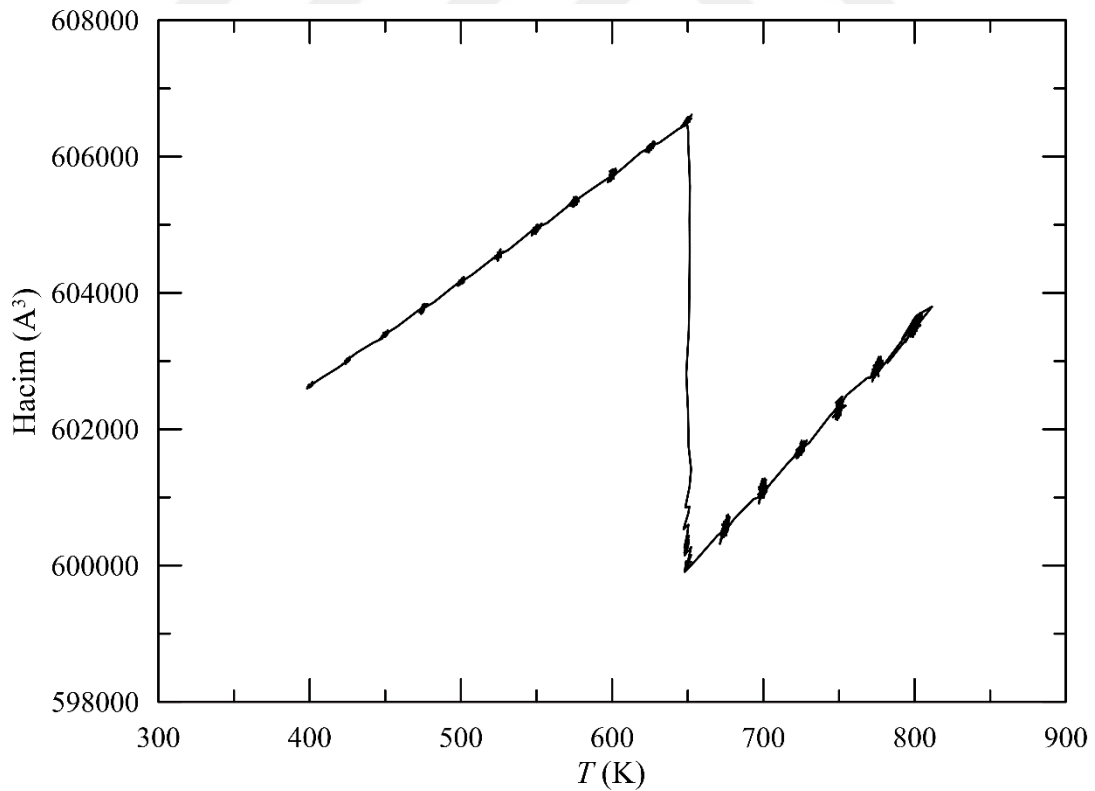


Şekil 5.2 S4.75 modeli için Kohesif enerjinin sıcaklık ile değişimi.

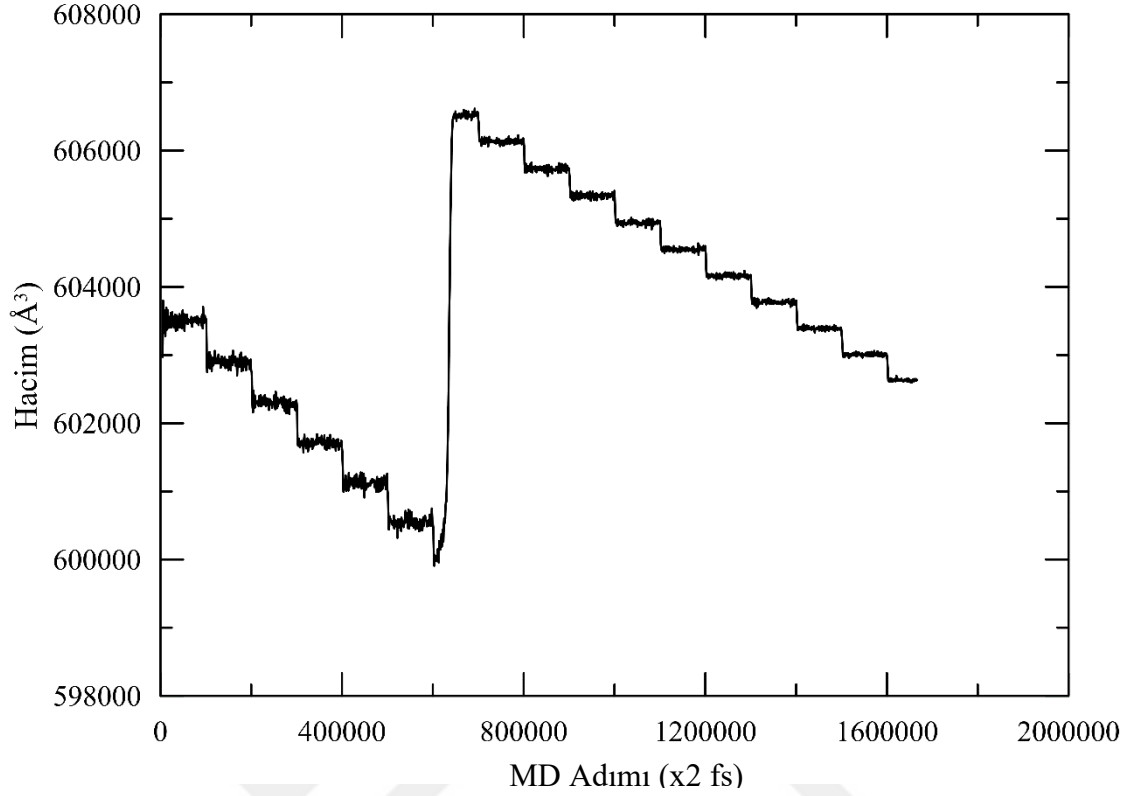
Sıcaklığa bağlı olarak simülasyon hücresinin hacim değişimini veren grafik Şekil 5.3 de verilmiştir. Sıcaklığın azalmasıyla beraber hacimde de bir azalma gözlenmiştir. Ancak, 650 K sıcaklık değerinde, hacim keskin bir pik yaparak aniden artmış ve bu artış bir değere kadar devam etmiştir. Hacimdeki bu değişim simülasyon hücresini oluşturan örgülerin hacimlerinde bir değişim olduğunu gösterir. Buna dayanarak faz dönüşümü esnasında hacimsel bir değişim olduğundan da söz edilir.

Simülasyon hücresi hacminin simülasyon boyunca zamanla değişimi de Şekil 5.4 de görülmektedir. Buradaki değişim karakteristiği hacim-sıcaklık değişimine benzemektedir ve 600.000 MD adımımda hacimdeki beklenmedik değişimin gözlenmesi, bu MD adımımda bir faz dönüşümü olduğuna işaret eder.

Diğer tüm tek kristal modeller için de yukarıda Şekil 5.1-5.4 ile verilen grafiklere benzer grafikler elde edilmiş ve bu grafikler yardımıyla tüm tek kristal model sistemler için M_s sıcaklıkları belirlenmiştir. Modellere ait dönüşüm sıcaklıkları Tablo 5.2 de verilmiştir.



Şekil 5.3 S4.75 modeli için hacmin sıcaklık ile değişimi.

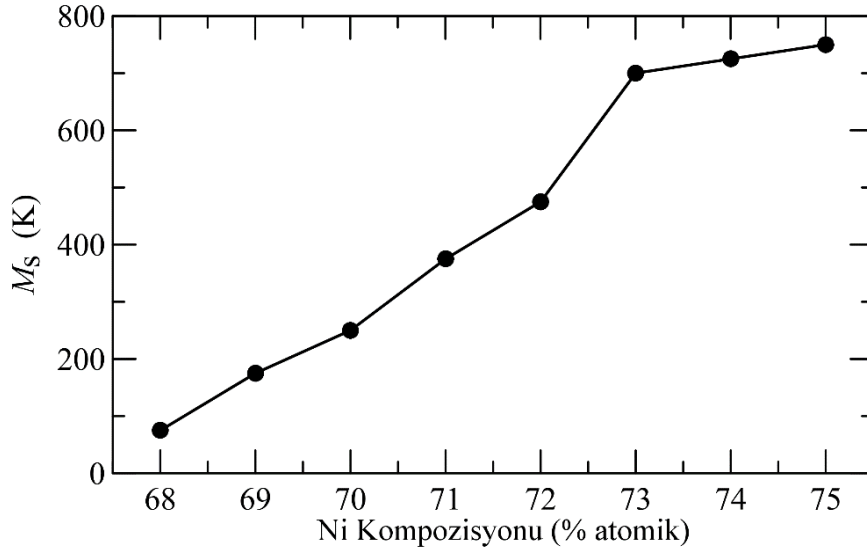


Şekil 5.4 S4.75 modeli için hacmin MD adımına göre değişimi.

Tez çalışması kapsamında tek kristal S2 (3456 atomlu sistemler) modelinde kompozisyonun faz dönüşümünü nasıl etkilediği de incelenmiştir. Kompozisyon ile M_s sıcaklığı arasında sıkı bir ilişki olduğu literatürde ifade edilmektedir [30]. Şekil 5.5 de at.%Ni kompozisyonuna karşılık $M_s(K)$ grafiği verilmiştir. Grafikteki değişim, literatürde sıkça örneklerine rastlandığı gibi lineer fit yapılarak M_s sıcaklığının kompozisyona bağlı lineer denklemi elde edilmiştir [75, 76]. Tez çalışması kapsamında dar bir kompozisyon aralığı incelendiğinden lineer fit işleminin geçerli bir yaklaşım olduğu düşünülmektedir.

Tablo 5.2 Tek kristal modellerine ait M_s sıcaklıkları.

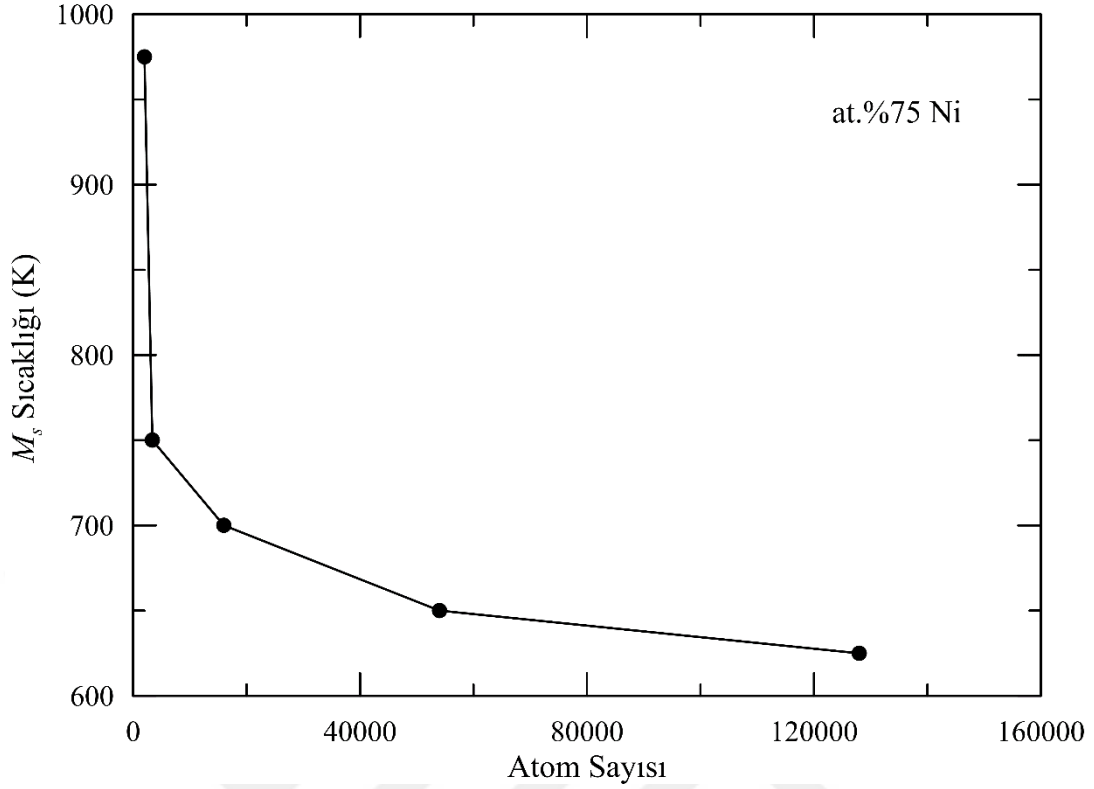
Modeller	S1.75	S2.68	S2.69	S2.70	S2.71	S2.72	S2.73	S2.74	S2.75	S3.75	S4.75	S5.75
$M_s(K)$	975	175	175	250	375	475	700	725	750	700	650	625



Şekil 5.5 S2 modelleri için at.%Ni kompozisyonuna karşı M_s (K) sıcaklığı.

Bu tez çalışmasının önemli bir amacı da atom sayısının yani numune boyutunun M_s dönüşüm sıcaklığı üzerine olan etkisini araştırmaktır. Bunun için en basit biçimde tek kristal yapıda atom sayısının dönüşüm sıcaklığını nasıl etkilediğini incelemek önemlidir. Bu amaçla at.%75Ni kompozisyonu tek kristal yapılar oluşturulmuştur. Oluşturulan bu modellerde atom sayısı 2000 den (S1.75 modeli) 128.000 ne (S5.75 modeli) kadar değiştirilmiştir ve her bir model için dönüşüm sıcaklığı hesaplanmıştır. Şekil 5.6 da M_s sıcaklığının atom sayısı ile değişimi verilmiştir.

Şekil 5.6 da görüldüğü gibi atom sayısına bağlı olarak M_s sıcaklığında değişimler tespit edilmiştir. Bu değişimlerden, atom sayısı arttıkça yarı kararlı ve düşük simetrikli martensit fazın ortaya çıkması daha düşük sıcaklıklarda görülmeye başlanmaktadır. Yani tek kristal B2 süper örgüye sahip atomik yapı, atom sayısının artmasıyla daha düşük sıcaklıklarda difüzyonsuz faz dönüşümü yaparak örgü düzenini değiştirir ve martensit yapıya evrilir. Bu tür değişimlere simülasyon çalışmalarında da rastlanmaktadır [20].

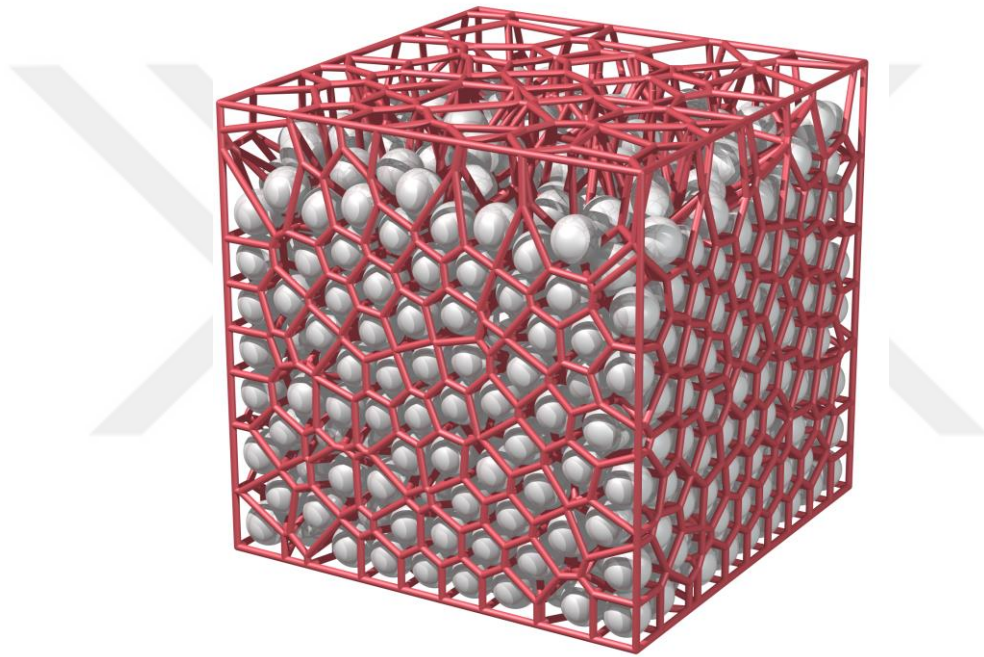


Şekil 5.6 Tek kristal at.%75 Ni kompozisyonlu sistemlerde M_s sıcaklığının atom sayısı ile değişimi.

5.2 Polikristal Şekil Hatırlamalı Alaşım Modelleri

Bu tez çalışmasının ana konusu polikristal şekil hatırlamalı alaşımların termodinamik ve yapısal özelliklerinin incelenmesidir. Polikristal alaşımlarda faz dönüşümünü incelemek için 2 taneli, 3 taneli ve 4 taneli modeller kurulmuştur. En küçük boyutlara sahip model sistemdeki atom sayısı 9000 iken en büyük model sistemdeki atom sayısı 995000 olarak belirlenmiştir. Tane geometrilerinin belirlenmesinde Wigner-Seitz hücre yaklaşımına benzeyen Voronoi diagramları kullanılmaktadır. Bu yaklaşıma göre; simülasyon hesaplama hücresinin boyutları tanımlandıktan sonra bu hücre içinde tane sayısı kadar gelişigüzel nokta belirlenmekte ve bu noktaları birbirlerine birleştiren doğru parçalarının orta noktalarında doğruya dik yüzeyler oluşturulmaktadır [72,73]. Bu yüzeyler kapalı bir hacim oluşturuncaya kadar işlem tekrarlanmakta ve tane geometrileri elde edilmektedir. Bu tanelerin geometrik sınırları, hesaplama hücresinin sınırları dikkate alınarak periyodik veya periyodik olmayacak şekilde belirlenebilmektedir. Böyle bir yaklaşım kullanılarak elde edilecek üç boyutlu bir geometrik hacim oluşumu Şekil 5.7 de

görülmektedir. Tane geometrileri belirlendikten sonra her tane içerisinde farklı kristal yönelimine sahip kristal örgü noktaları sistematik şekilde oluşturulabilir. Oluşturulan bu noktalara da kristal yapının baz atomları yerleştirilerek istenilen birim hücre tipi için tane kristal yapısı elde edilir. Bu tez çalışmasında bu işlemler için *Voro++* kütüphanesini kullanan *LATGEN* yazılımı kullanılmıştır. Her tane içindeki kristal yönelimleri ise gelişigüzel sayılardan üretilen vektörler ile belirlenmiştir. Tane sayısı değiştirilmeden hesaplama hücresinin boyutları artırıldığında doğal olarak tane boyutları da artmakta ve tane içindeki atom sayıları da orantılı olarak artmaktadır.



Şekil 5.7 *Voro++* kütüphanesinden elde edilen üç boyutlu hücre geometrisi.

5.2.1 İki taneli polikristal alaşım modelleri

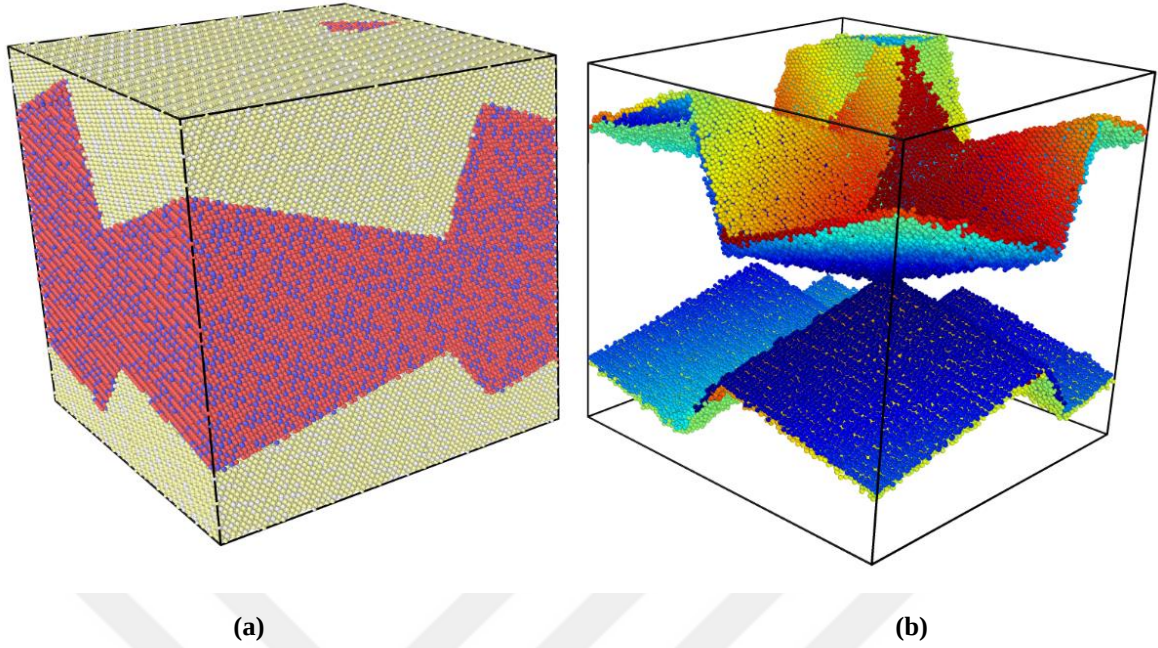
İki taneye sahip polikristal şekil hatırlamalı alaşımlarda faz dönüşümü olayını gözlemek için 6 farklı büyüklükte model kurulmuştur. Bu modellere verilen model numaraları, örgü parametreleri cinsinden modellerin boyutları, her bir modelin Ni, Al ve toplam atom sayıları Tablo 5.3 de verilmiştir.

Tablo 5.3 İki taneli modellerin model numaraları ve model özellikleri.

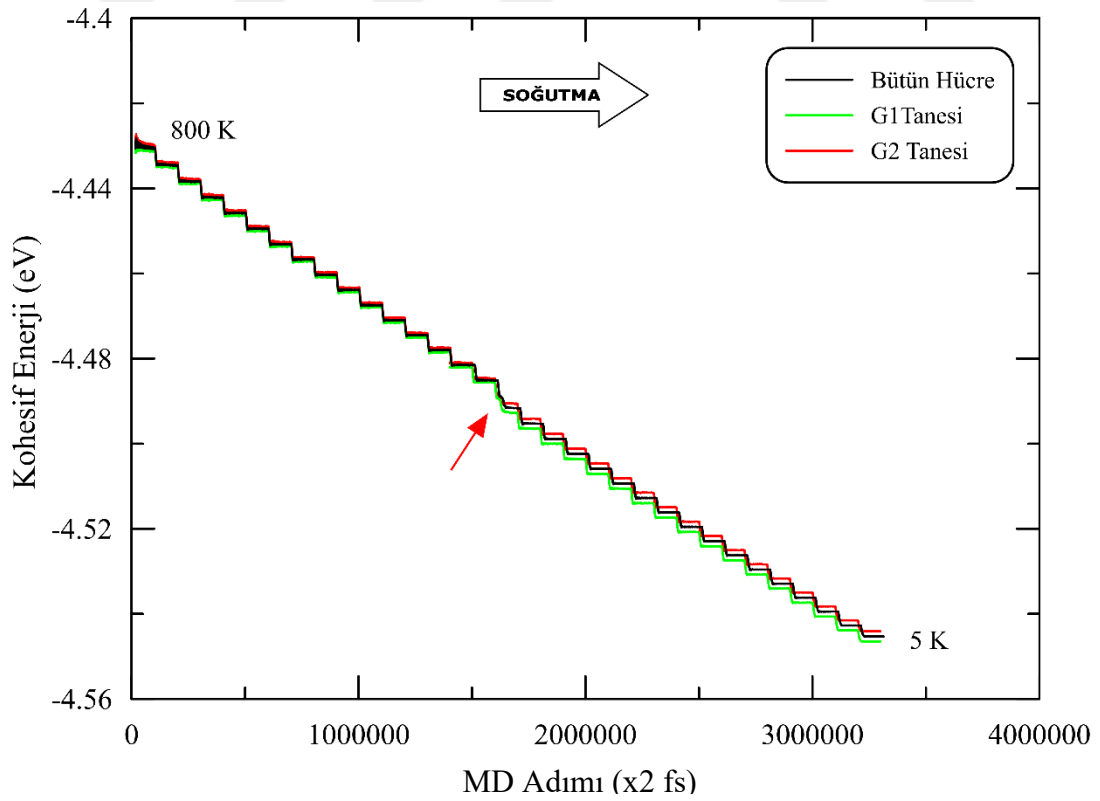
Model Numarası	Ölçüler (nm)	Toplam Atom Sayısı	Tane Atom Sayıları		Tane Sınırı Atom Sayısı	Tane Sınır Alanı (nm ²)
	X x Y x Z		Tane 1 G1	Tane 2 G2		
G2.1	5,0 x 5,0 x 5,0	9186	4844	4342	3720	720.64
G2.2	8,0 x 8,0 x 8,0	39405	20392	19013	8288	1778.67
G2.3	12,5 x 12,5 x 12,5	155802	79528	76274	20541	4345.93
G2.4	14,9 x 14,9 x 14,9	265557	135059	130498	30335	6487.09
G2.5	20,0 x 20,0 x 20,0	650969	330724	320245	51640	10886.10
G2.6	23,0 x 23,0 x 23,0	989055	500125	488930	72599	15450.50

Polikristal yapı için oluşturulan bütün modellerde başlangıç sıcaklık değeri, model kristal örgünün B2 süper örgüde kararlı olduğu 800 K dir ve bütün modeller simülasyona başlanmadan önce bu sıcaklıkta konjigeyt gradyent algoritmasının Polak-Ribiere versiyonu ile minimizasyon işlemine tabi tutulmuştur [77]. Sistem sıcaklığı her 100.000 MD adımında 25 K düşürülerek son olarak 5 K e düşürülmüştür. Üretilen bütün modellerde, tek kristal faz dönüşümü incelemelerinden elde edilen en iyi faz dönüşümünün gözlemlendiği at.%75Ni oranı kullanılmıştır. Modellerin termodinamik incelemesini yapmak ve sistemin simülasyon boyunca davranışını incelemek amacıyla, sistemin ortalama potansiyel enerjisinin MD adımı ile değişimi, ortalama potansiyel enerji-sıcaklık değişimi ve sıcaklıkla yapısal dönüşüm özellikleri belirlenmiştir. İki taneli polikristal bütün modeller için bu analizler yapılmıştır. Şekil 5.8 (a) da iki taneli yapıların simülasyon hücresinin bir örneği ve Şekil 5.8 (b) de tane sınır yapısının görüntüsü verilmiştir. Simülasyon hücresi içindeki iki tanenin birden fazla ara yüzeye sahip olarak görünmesi, simülasyon hücresine periyodik sınır şartlarının uygulanmasından kaynaklanmaktadır. Şekil 5.8 deki tanelerin ve tane sınırının geometrisi kurulan bütün modellerde aynıdır.

İki taneli şekil hatırlamalı polikristal modellerin, kohesif enerjinin zamana bağlı değişimi Şekil 5.9 da verilmiştir. Beş farklı büyüklükte model bulunduğundan incelemeye örnek teşkil etmesi açısından sadece G2.5 modeli üzerinde detaylar verilmiştir.



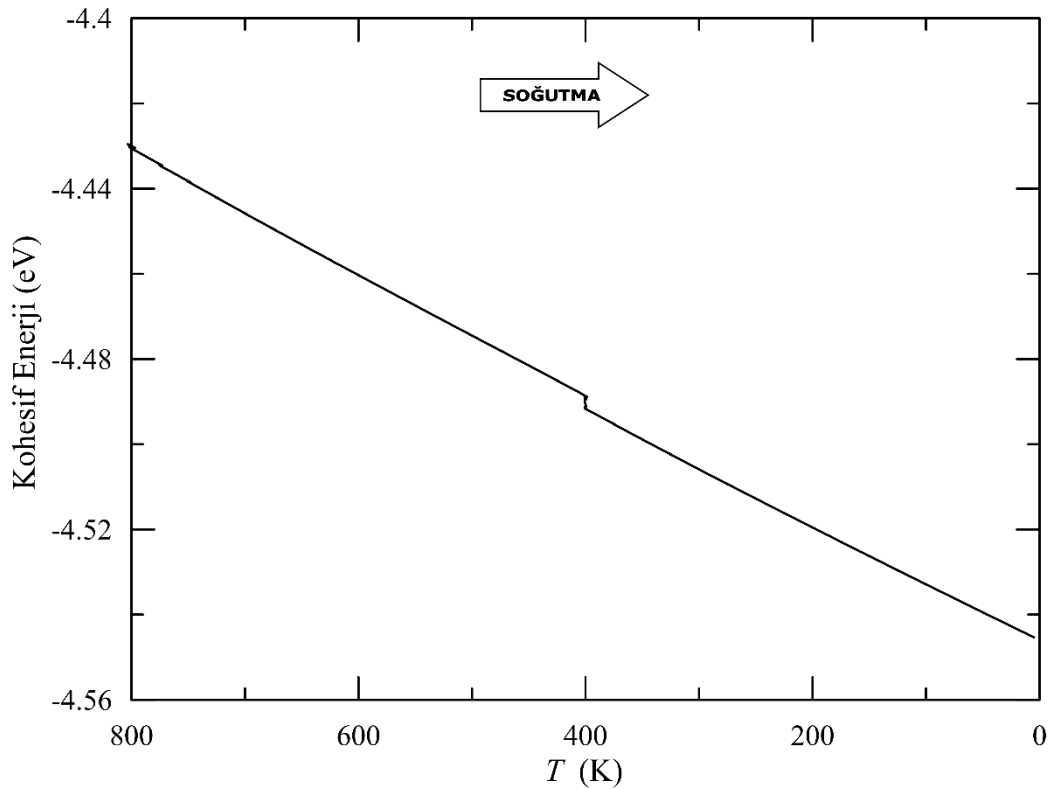
Şekil 5.8 İki taneli G2.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, **(a)** iki taneli G2.5 modelinin simülasyon hücresi ve **(b)** tane sınırı geometrisi.



Şekil 5.9 G2.5 modeli kohesif enerjisinin MD adımına göre değişimi.

Şekil 5.9 da bütün simülasyon hücresi ve simülasyon hücresi içindeki tanelerin MD adımıyla kohesif enerjilerinin değişimi görülmektedir. Simülasyon hücresi ve tanelerin kohesif enerjilerinin davranışları birbirine paralellik gösterir. Sıcaklığın 800 K den 5 K e kademeli olarak düşmesiyle kohesif enerjide de sıcaklık azalmasına bağlı kademeli azalma gözlenmiştir. Ancak, Şekil 5.9 da kırmızı ok işareti ile gösterilen 1.500.000 MD adımında kohesif enerjide beklenmedik ani bir değişim gözlenmiştir. Bu noktada, sistemdeki atomların ortalama potansiyel enerjilerinde negatife doğru daha fazla bir düşme olmuştur. Bu, sistemin daha kararlı bir yapıya yerleşmesi anlamına gelmektedir ve yapısal bir faz dönüşümü olduğu şeklinde yorumlanmıştır. G2.5 modelinde faz dönüşümüne eşlik eden bu kohesif enerji değişimi tek kristal S4 modeline benzer şekildedir.

G2.5 modelindeki faz dönüşüm sıcaklığının belirlenmesi için kohesif enerjinin sistemin sıcaklığı ile değişiminin analiz edilmesi daha doğru bir yoldur. Kohesif enerjinin sistem sıcaklığı ile değişimi Şekil 5.10 da verilmiştir. Şekil 5.10 da görüldüğü gibi G2.5 modelinin kohesif enerjisinin sıcaklıkla değişimi hemen hemen lineer şekildedir. Ancak, sistem sıcaklığı 400 K e geldiğinde kohesif enerjide yapısal faz dönüşümüne eşlik eden keskin bir azalma görülür.



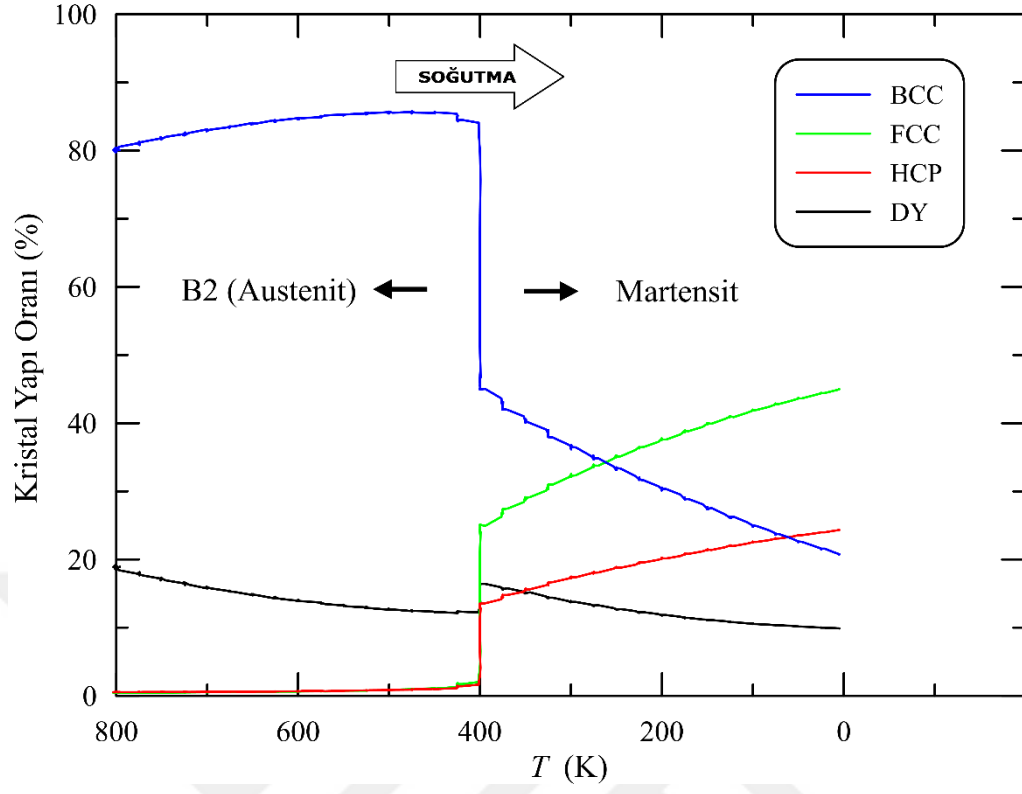
Şekil 5.10 G2.5 modeli için kohesif enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi.

Şekil 5.9 ve Şekil 5.10 dan yararlanarak G2.5 için faz dönüşümünün olduğu ve dönüşüm sıcaklığının 400 K e karşılık geldiği tespit edilmiştir. Bu dönüşüm B2 fazından bir martensit fazına doğru oluştuğundan bu sıcaklık M_s sıcaklığı olarak ifade edilebilir.

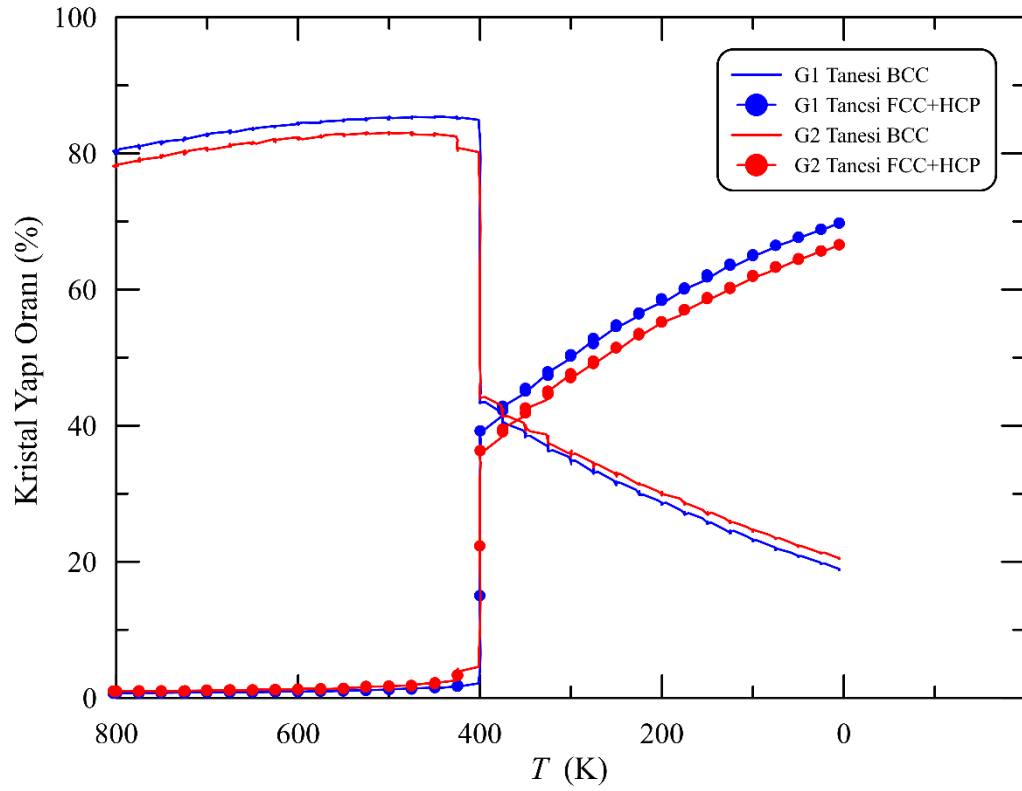
Faz dönüşümü esnasında, simülasyon hücresindeki ve tanelerdeki kristal yapıların ne şekilde ve nasıl değiştiğini anlamak sistemin dönüşüm karakteristiğinin anlaşılmasında son derece önemlidir. Simülasyon hücresindeki kristal yapıların analizini yapmak için OVITO yazılımının bir parçası olan CNA analizinden yararlanılmıştır. Şekil 5.11 ve Şekil 5.12 de G2.5 modelinin kristal yapı analizine yerilmiştir.

Soğutma ile birlikte G2.5 modelinin sahip olduğu faz oranlarındaki değişimler Şekil 5.11 de ve aynı modelin 1. ve 2. tanelerine ait faz oranlarının değişimleri ise Şekil 5.12 de verilmiştir. Her iki şekilde de görüldüğü gibi modeldeki kristal yapıların yüzdelik oranları faz dönüşüm noktası olarak tespit edilen 400 K sıcaklığında aniden değişmeye başlamıştır. Burada ilginç bulunan bir durum, tane sınır atomlarının (“diğer” olarak tanımlanan) atomik yüzdelerinin dönüşümden önce sıcaklıkla azaldığı ve tam dönüşüm esnasında bir miktar arttığı ve akabinde tekrar azalmaya başlamasıdır. Dönüşüm noktasına kadar tane sınırı atomlarının azalma miktarı yaklaşık %6 dır. Benzer şekilde B2 (BCC) yapı oranındaki artış ise %7 civarındadır. Buradan, soğutmayla birlikte tane sınır atomlarının B2 yapıya dahil olarak gevşeme ve kararlı yapı noktalarına yerleşme eğiliminde oldukları ifade edilebilir. Ancak, dönüşümün başlamasıyla birlikte tane sınır atomlarının sayıca aniden artması sınırlardaki hareketliliğin en önemli göstergesidir. Yeni oluşan fazın büyümesiyle birlikte sınır atom sayısında yeniden bir azalma görülmüştür.

Şekil 5.12 de görülen tanelerin içindeki yapı oranlarının değişimi birbirine paraleldir ancak G2.5 modelinin G1 tanesi G2 tanesinden daha sonra kristal yapısını değiştirmektedir. Tablo 5.3 den bakıldığında G1 tanesinin atom sayısı G2 tanesinin atom sayısından daha fazladır. Yani, atom sayısı az olan tanelerdeki yapısal faz dönüşümü atom sayısı fazla olan tanelerden daha düşük sıcaklıkta gerçekleşmektedir. Buradan, atom sayısı az olan tanelerde faz dönüşümü için gerekli olan sürücü kuvvetin daha büyük olması gerektiği sonucuna ulaşılabilir. Daha yüksek sürücü kuvvet ihtiyacı ise, küçük boyutlu tanelerin içinde yeni faz (martensit faz) üretmek için gerekli yeterince kusur noktasının bulunmamasından kaynaklanabilir.

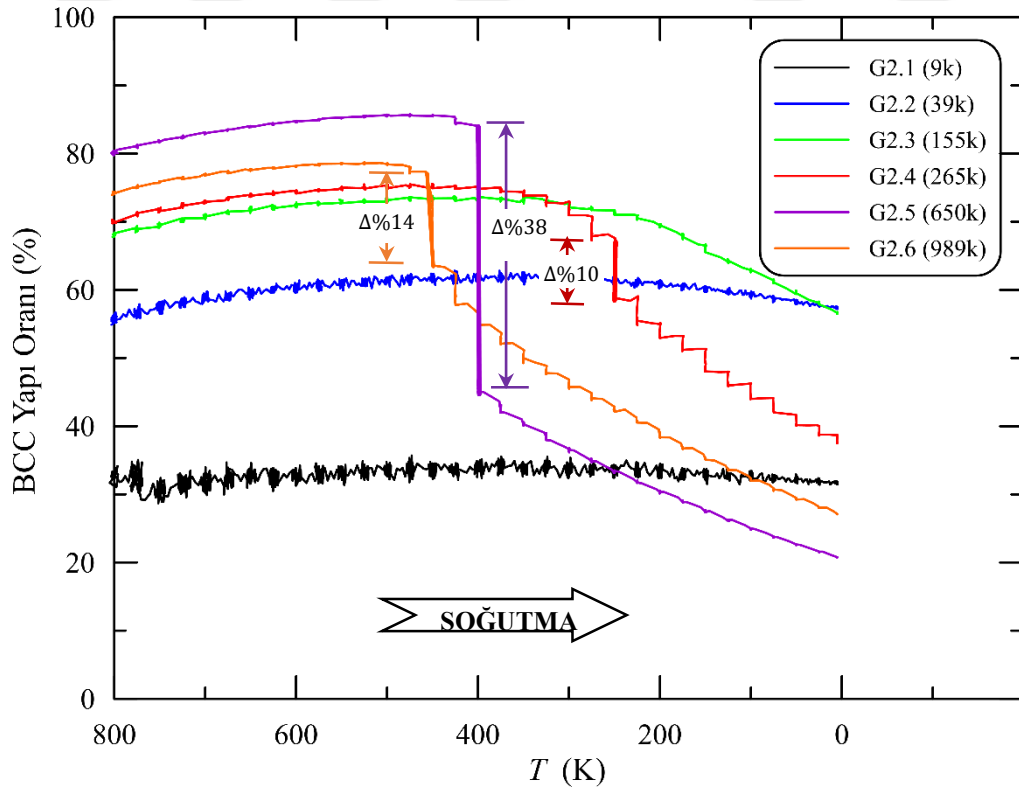


Şekil 5.11 G2.5 modelindeki faz yapılarının (birim hücre oranının) sıcaklığa göre değişimi.



Şekil 5.12 G2.5 modeli için her bir tanedeki yapısal dönüşümlerin sıcaklık ile değişimi.

İki taneli tüm modellere (G2.1, G2.2, G2.3, G2.4, G2.5 ve G2.6) ait BCC yapı oranının sıcaklıkla değişimleri Şekil 5.13 de verilmiştir. Şekilde aynı tane sayısına ve geometrisine sahip ancak farklı miktarda atom içeren (farklı boyutlardaki) modellerin BCC yapılarının sıcaklık ile nasıl değiştiği görülmektedir. Modellere ait atom sayıları Tablo 5.3 de verilmiştir. Atom sayılarının artmasıyla beraber BCC yapıların hem dönüşüm oranlarında hem de dönüşüm hızlarında farklılıklara yol açtığı belirlenmiştir. G2.1 ve G2.2 modellerinde BCC yapı oranı başlangıçtaki ortalama bir değer etrafında önce yavaşça artmış ve sonra yavaşça azalmıştır. G2.3 modelinde de önce benzer bir artış meydana gelmiş fakat sonra daha hızlı şekilde azalmıştır. G2.4, G2.5 ve G2.6 modellerinde ise BCC yapı oranı sıcaklığın düşülmesiyle birlikte diğer modellerde olduğu gibi önce hafifçe artış göstermiş daha sonra azalmaya başlayarak faz dönüşümüyle birlikte ani şekilde azalmıştır. G2.4, G2.5 ve G2.6 modellerinde yapısal faz dönüşümü reaksiyon hızlarının sistematik olarak arttığı ve dönüşen yapı oranının da birlikte arttığı Şekil 5.13 de açıkça görülmektedir. Buna göre; G2.4 modelinde faz dönüşümüyle birlikte BCC yapısal oranının değişimi $\sim \Delta\%10$, G2.5 modelinde $\sim \Delta\%38$ ve G2.6 modelinde $\sim \Delta\%14$ şeklinde belirlenmiştir.

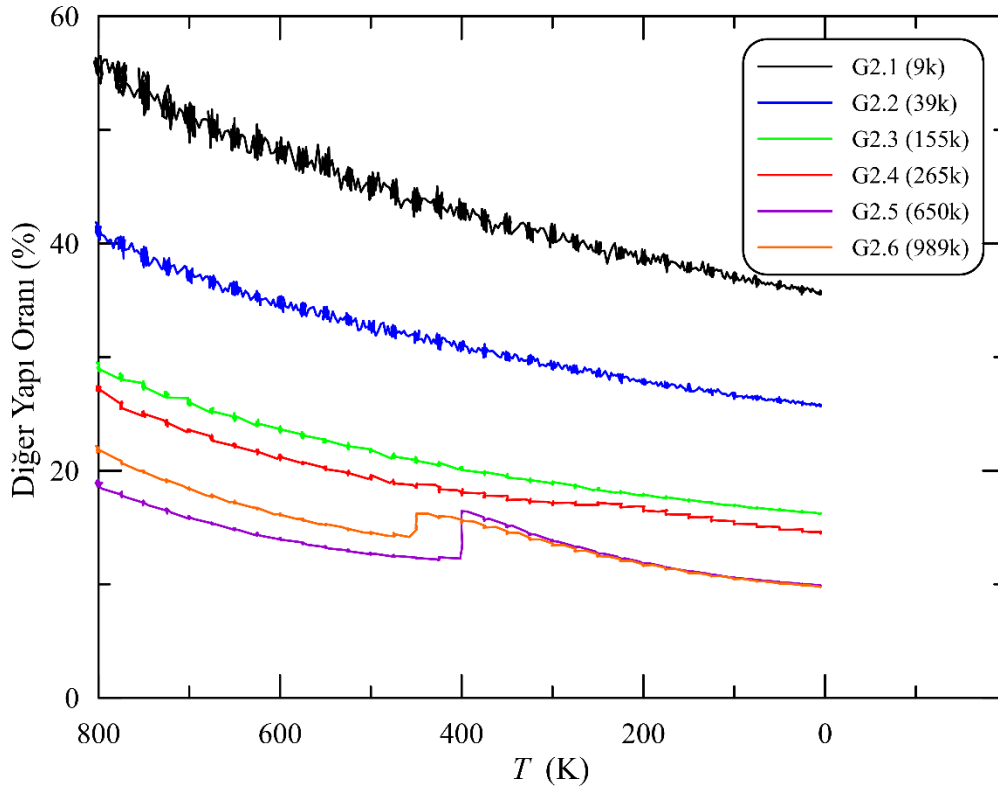


Şekil 5.13 İki taneli modellerin BCC yapılarının sıcaklığa göre değişimi.

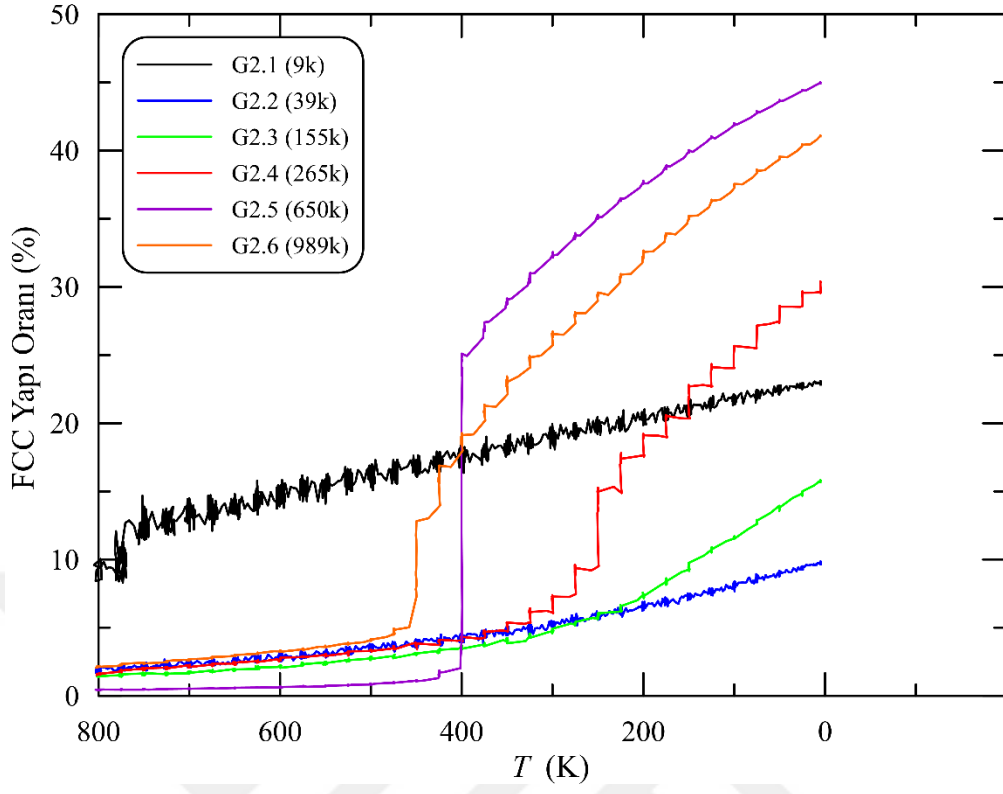
Bu incelemede tane şekillerinin ve tanelerin birbirlerine göre kristal yönelimlerinin sabit kaldığı göz önünde tutulursa, burada tespit edilen değişim miktarlarının sadece atom sayılarındaki değişimden veya tane boyutlarındaki değişimden kaynaklandığı söylenebilir. Bu gözlemler literatürde, tane içi martensit dönüşümlerinde mekanik sınırlandırma etkisi olarak ifade edilmektedir [18, 20, 35, 57, 78]. Burada sistematik davranışı bozan model G2.6 dır. G2.4 ve G2.5 modellerinde %10 ve %38 lik değişimler var iken daha büyük olan G2.6 modelindeki değişim %14 e düşmüştür. Bu modellerin büyüklükleri sırasıyla 14,9 nm, 20,0 nm ve 23,0 nm dir. Model büyüklükleri dikkate alındığında bu sistematik olmayan değişimin nedeni olarak Hall-Petch etkisinin görülmüş olması gösterilebilir. Böylece, Hall-Petch değişiminin zirvesi model sistem büyüklüğünün 20 nm civarının ulaşmasıyla görülmüş olmaktadır.

Şekil 5.14 de kurulan bütün iki taneli modellerin tane sınır atomlarının oranlarının sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Burada, OVITO yazılımının tek kristal modeller için başlangıç yapısında %100 B2 (BCC) yapı bulunduğunu belirtmesi nedeniyle, taneli modellerin başlangıç yapılarında diğer (other) yapılar olarak tanımlandığı yapı gurubunun, tane sınırlarındaki atomik düzensizlik nedeniyle tanımlanamayan yapılara verilen isim olduğu belirtilmelidir. Bu nedenle, tane sınırlarındaki düzensiz yapıya sahip atom gurupları tez çalışmasında “diğer” olarak ifade edilmiştir. Şekil 5.14 den G2.1 modelinde tespit edilen sınır atomlarının oranının soğutmayla birlikte %55 den %38 civarına azaldığı, G2.2 modelinde ise %40 dan %27 civarına düştüğü belirlenmiştir. G2.3 modeli için bu değişim %29 dan %17 ye olarak tespit edilmiştir. G2.6 modelinin atom sayısı (989k) G2.5 modelinden (650k) daha fazla olmasına rağmen tane sınır atomlarının simülasyon hücresindeki yüzdelik oranı daha düşüktür. Bütün sistemlerde tane sınır atomlarının oranı sıcaklığın azalmasıyla düşüş eğilimi sergilemişlerdir. Ancak, G2.4, G2.5 ve G2.6 modellerinde tane sınır atomlarının yüzdelik oranında M_s sıcaklık değerinde bir artış görülmüştür. Bu artış kısa süreli olup faz dönüşümü sonrasında yeniden azalmaya başlamıştır. Bu durum, yapısal faz dönüşümünün başlamasıyla birlikte tane sınırlarındaki yapısal belirsizliğin arttığı ve dönüşüm yüzdesi arttıkça bu belirsizliğin ortadan kalktığı şeklinde yorumlanabilir. Böylece, polikristal yapılarda meydana gelen yapısal faz dönüşümlerinde deneysel olarak da görülen tane sınır hareketliğinin önemli bir bulgusu bu tez çalışmasında gözlenmiş olmaktadır. Bununla birlikte, bu yorumun doğruluğunu ispatlamak için daha detaylı analizlere ihtiyaç duyulabilir.

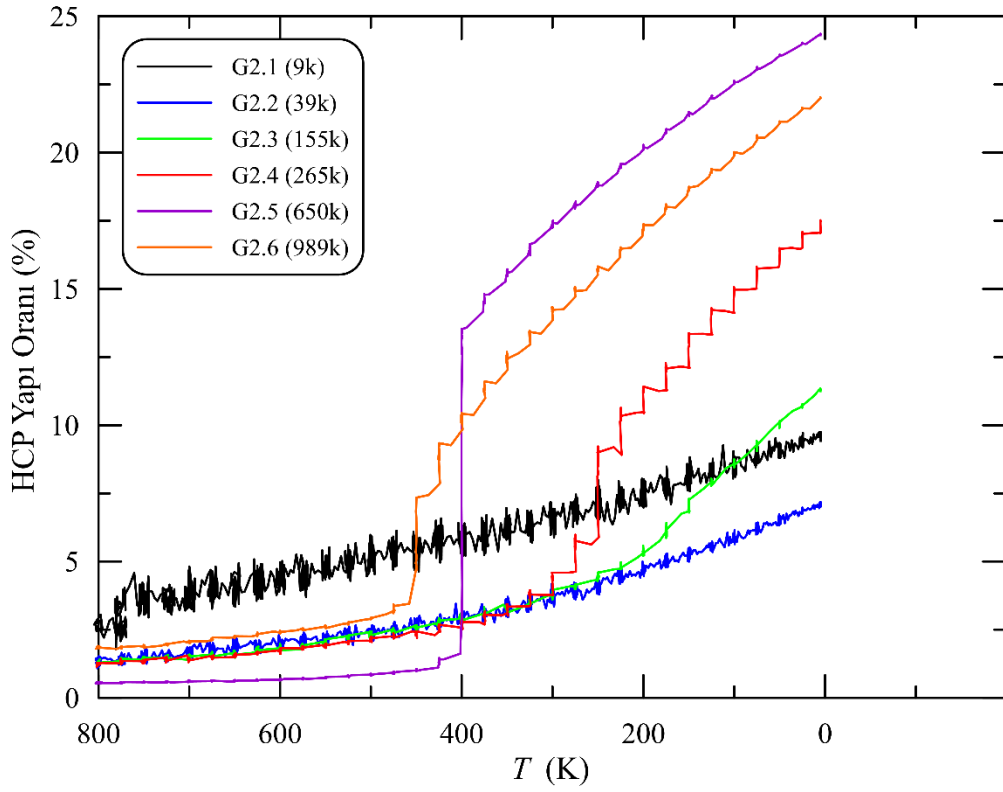
Şekil 5.15 ve Şekil 5.16 da iki taneli modelleri FCC (martensit faz) ve HCP (yığılım kusurları) yapılarının sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Hem FCC hem de HCP yapılarının sıcaklık ile değişim eğilimleri birbirleriyle örtüşmektedir. Ancak, iki taneli bütün modeller için sıcaklığın düşmesiyle FCC yapı oranında meydana gelen yüzdelik değişim, HCP yapı oranındaki değişimden fazladır. Burada ilginç olan nokta, kurulan bütün iki taneli modellerde soğuma ile beraber hem FCC hem de HCP yapılarının miktarındaki artıştır. Bu artış, martensit temel yapılarının bu tip birim hücrelerden oluştuğu dikkate alındığında doğal karşılanabilir [79]. G2.1 ve G2.2 modellerinde sıcaklığın düşmesiyle BCC yapı oranında net bir azalma görülmemişken (Şekil 5.12), tane sınır atomlarının yüzdelik oranlarında azalma olmuştur (Şekil 5.14). İki taneli G2.1 ve G2.2 modellerindeki FCC ve HCP yapılarının artmasının sebebi olarak tane sınırlarındaki belirsiz yapı oranının azalması gösterilebilir. Tane sınırında bulunan atomlar FCC ve HCP yapılara dahil olmaktadır, ancak martensit faz dönüşümü için yeterli miktara ulaşamamaktadır. Böylece, G2.1 ve G2.2 modellerinde martensit çekirdeklerinin kritik yarıçapa ulaşamadığı ve bu nedenle de tam bir yapısal faz dönüşümü sergileyemediği düşünülmüştür.



Şekil 5.14 İki taneli modellerdeki tane sınırı atomlarının sıcaklık ile yüzdelik değişimi.



Şekil 5.15 İki taneli modellerde FCC yapının sıcaklık ile değişim grafiği.



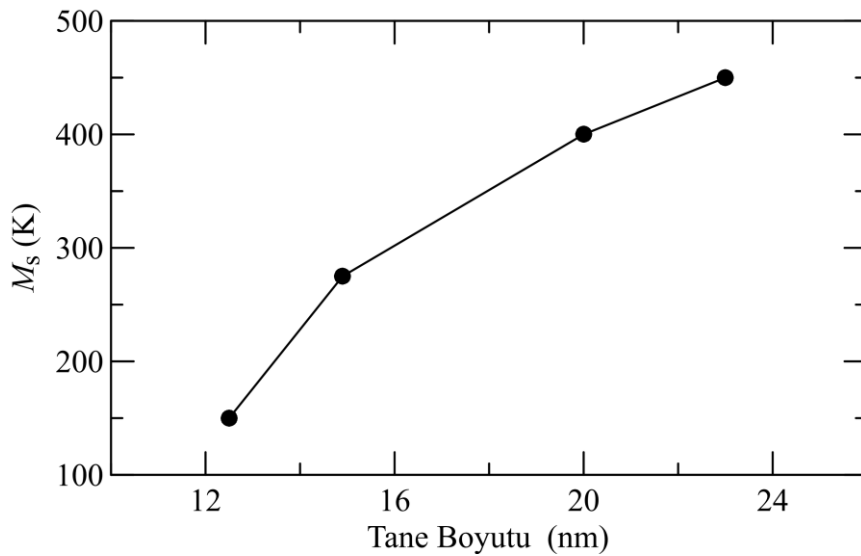
Şekil 5.16 İki taneli modellerde HCP yapının sıcaklık ile değişim grafiği.

İki taneli polikristal modeller için tespit edilen M_s sıcaklıkları Tablo 5.4 de verilmiştir. G2.1 ve G2.2 modellerinde faz dönüşümü gözlenmemiştir. M_s sıcaklığı atom sayısının (model boyutunun) artmasıyla üstel olarak artmıştır (Şekil 5.17).

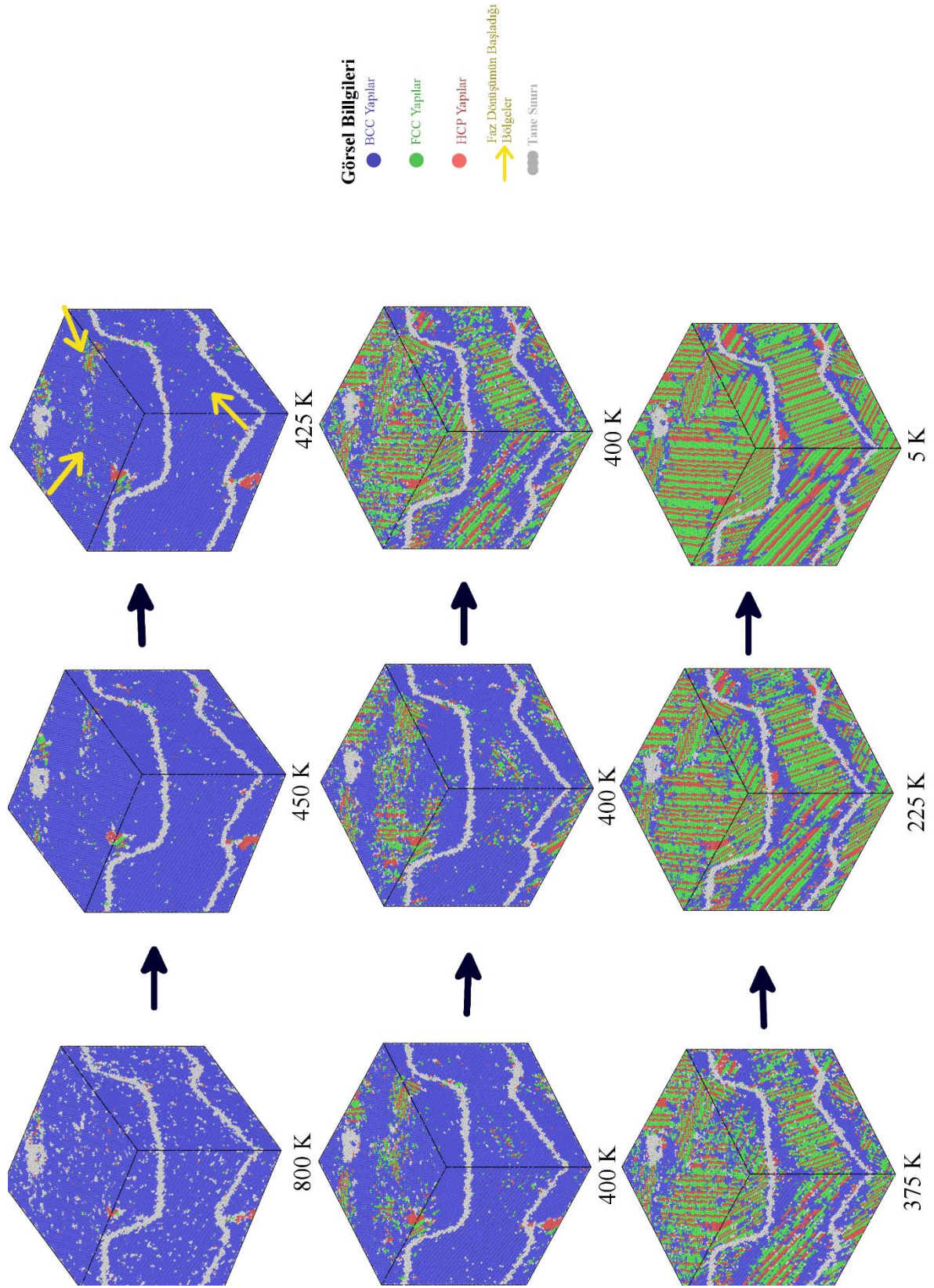
İki taneli G2.5 modelinin çeşitli sıcaklıklarda alınan yapısal görüntüsü Şekil 5.16 da verilmiştir. İki taneli G2.5 modelinde Şekil 5.18 de görüldüğü gibi, sistem sıcaklığı 450 K de iken tane sınırına yakın bölgelerde FCC (martensit) yapılar oluşmaya başlamıştır. Bu oluşuma HCP tipi yığılma kusurları eşlik etmektedir. Sistem sıcaklığı 425 K e düşürüldüğünde Şekil 5.18 de sarı oklarla gösterilmiş bölgelerde, hem bir önceki sıcaklık değeri olan 450 K den miras kalan FCC ve HCP yapılar hem de özellikle tanenin ortalarına doğru küçük boyutlarda yeni yapısal düzenlemelerin olduğu görülmüştür. 425 K sıcaklığında faz büyümesi olmaz iken sarı oklar ile gösterilen bölgeler 425 K de kendilerini muhafaza etmişlerdir. Sistem sıcaklığı 400 K e düşürüldüğünde ise 425 K sıcaklığındaki sarı oklar ile gösterilen bölgelerden başlayan bir faz dönüşümü tetiklenmiş ve büyüme eğilimine girmiştir. G2.5 modeli 400 K de hızlı bir şekilde faz dönüşümü sergilemiştir. Bu model aynı sıcaklıkta oluşan yeni faz bölgeleriyle birlikte hızlı bir faz büyümesi göstermektedir. 400 K de meydana gelen faz dönüşümü atermal karakterde olup daha sonra sıcaklığın düşmesiyle birlikte termoelastik karaktere sahip olmaktadır.

Tablo 5.4 İki taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıkları.

Model No	G2.1	G2.2	G2.3	G2.4	G2.5	G2.6
M_s (K)	-	-	150	275	400	450



Şekil 5.17 Tane boyutu ile M_s sıcaklığının değişimi.



Şekil 5.18 İki taneli G2.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşümü ekran görüntüsü.

5.2.2 Üç taneli polikristal alaşım modelleri

Üç taneye sahip polikristal şekil hatırlamalı alaşımlarda faz dönüşümünü gözlemek için 6 farklı büyüklükte modeller kurulmuştur. Bu modellerin model numaraları, model boyutları, her bir modelin toplam atom sayısı, tanelerindeki atom sayıları ve tane sınırı atom sayıları Tablo 5.5 de verilmiştir.

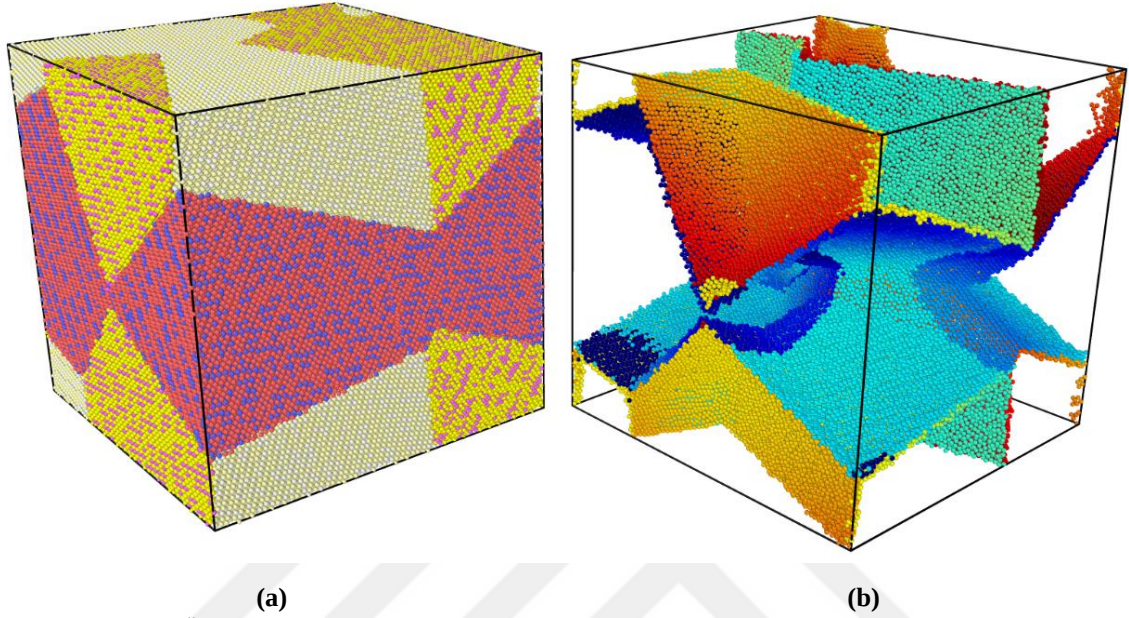
Polikristal yapı için oluşturulan bütün modellerde başlangıç sıcaklık değeri 800 K dir ve bütün modeller simülasyona başlanmadan önce bu sıcaklıkta eşlenik eğim (Conjugate gradient) algoritmasının Polak-Ribiere versiyonu ile minimizasyon işlemine tabi tutulmuştur. Sistem sıcaklığı her 100.000 MD adımımda bir 25 K düşürülerek 5 K'ne kadar düşürülmüştür. Üretilen bütün modellerde Ni oranı atomik yüzde cinsinden %75'dir. Modellerin termodinamik incelemesini yapmak ve sistemin simülasyon boyunca davranışını incelemek amacıyla, kohesif enerji-MD adımı, kohesif enerji-sıcaklık ve yapısal dönüşüm grafiklerinden yararlanılmıştır. Üç taneli polikristal modeller için termodinamik ve yapısal analizler yapılmıştır. Şekil 5.19 da üç taneli yapıların simülasyon hücresinin örneği ve tane sınırının görüntüsü verilmiştir. Şekil 5.19 daki tanelerin ve tane sınırının geometrisi üç taneli olarak kurulan bütün modellerde aynıdır.

Üç taneli şekil hatırlamalı polikristal modellerimizin, kohesif enerjinin zamana bağlı değişimi Şekil 5.20 de verilmiştir. Altı farklı büyüklükte modelimiz bulunduğundan incelemeye örnek teşkil etmesi açısından detaylı analizler sadece G3.5 modeli verilmiştir.

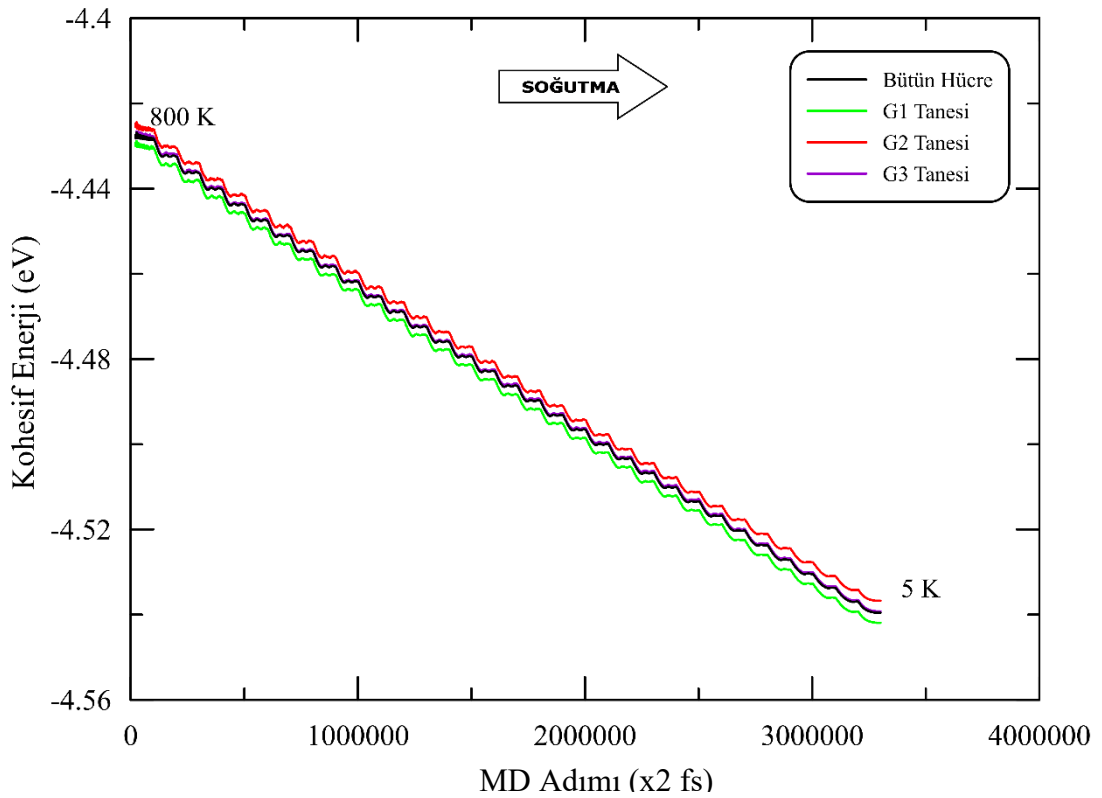
Tablo 5.5 Üç taneli modellerin özellikleri.

Model Num.	Ölçüler Nanometre (nm)	Toplam Atom Sayısı	Tane Atom Sayıları			Toplam Tane Sınır Atom Sayısı	Toplam Tane Sınır Alanı (nm ²)
	X x Y x Z		G1	G2	G3		
G3.1	5,0 x 5,0 x 5,0	9480	3757	2498	3225	3184	647,71
G3.2	8,0 x 8,0 x 8,0	40122	15446	10671	14005	10330	2222,73
G3.3	12,5 x 12,5 x 12,5	157182	59599	42051	55532	26196	5594,24
G3.4	14,9 x 14,9 x 14,9	267445	101040	71379	95026	39895	8594,55
G3.5	20,0 x 20,0 x 20,0	654330	244836	175138	234356	67056	14124,62
G3.6	23,0 x 23,0 x 23,0	995833	372010	266000	357823	95943	20457,20

Polikristal yapılarda tanelerin içinde meydana gelen fiziksel olayların anlaşılması için her tane içindeki kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi de izlenmiştir. Şekil 5.20 de görüldüğü gibi, kohesif enerjide sıcaklık azalmasıyla birlikte kademeli olarak bir azalma görülmektedir.

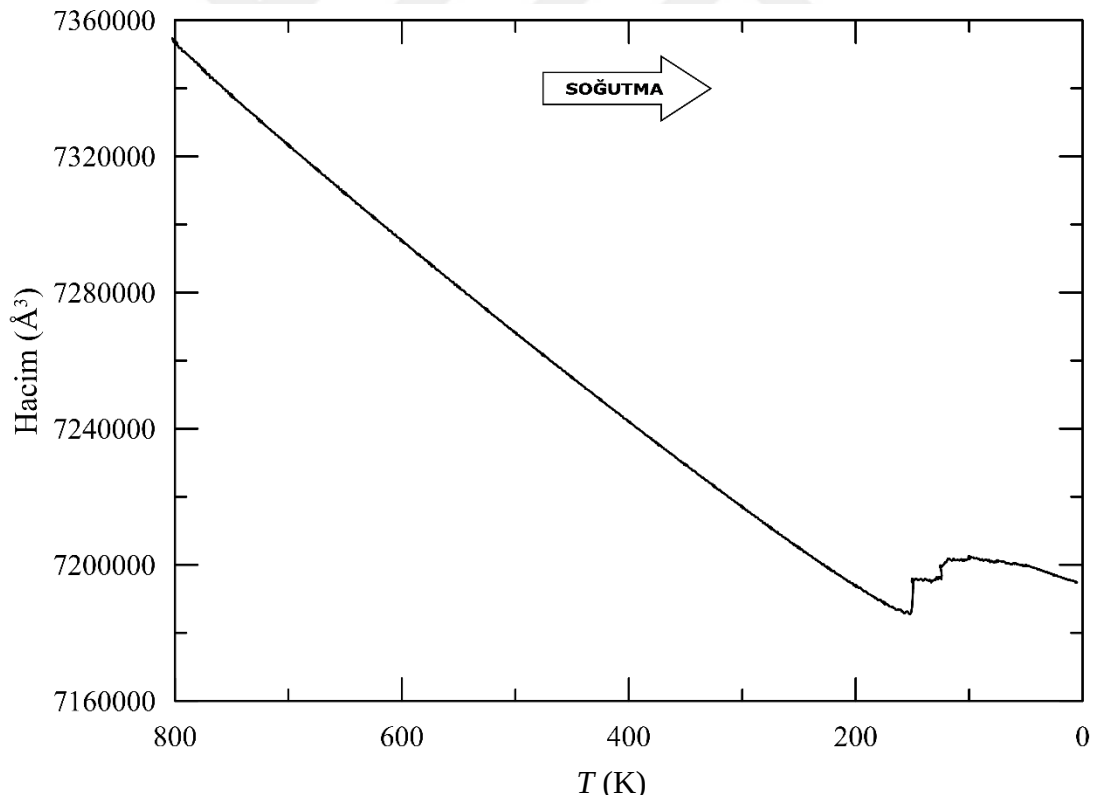


Şekil 5.19 Üç taneli G3.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, (a) üç taneli G3.5 modelinin simülasyon hücresi ve (b) tane sınırı geometrisi.



Şekil 5.20 G3.5 modelin için kohesif enerjinin MD adımına göre değişimi.

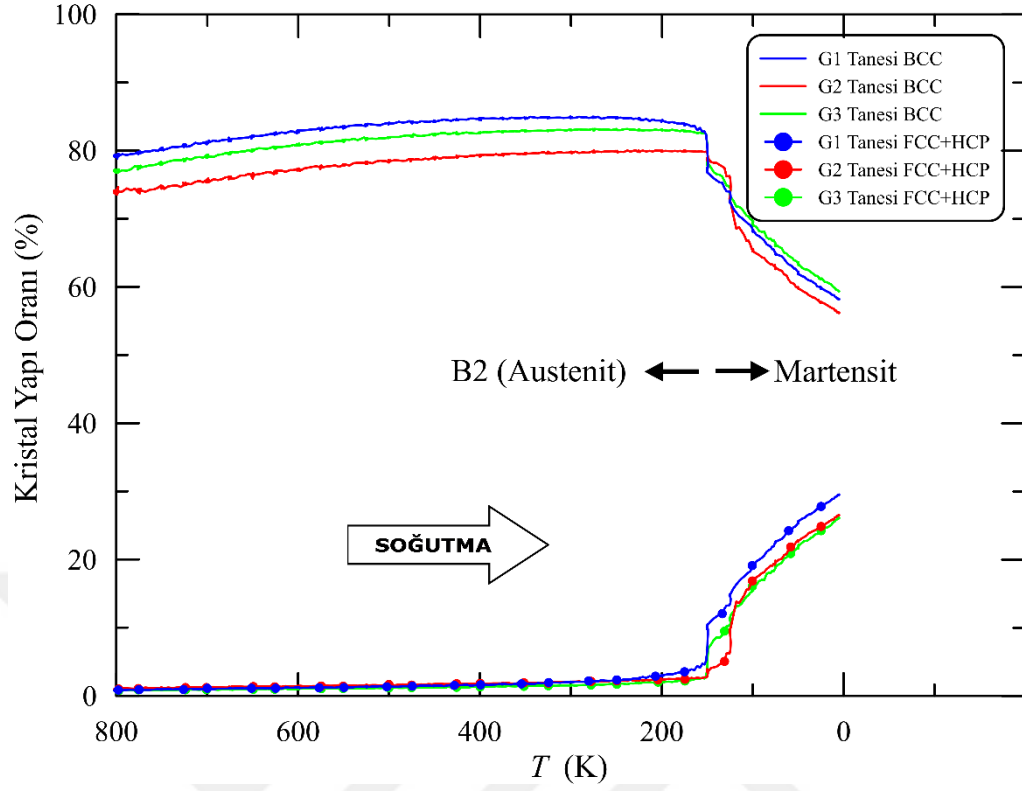
Bu tezdeki simülasyon çalışmalarında faz dönüşümlerinin belirlenmesi için genel olarak kohesif enerjinin MD adımına göre değişiminden yararlanılması planlanmıştır. Ancak, G3.5 modelinde Şekil 5.20 de görüldüğü üzere kohesif enerjideki değişimlerde bir anomali görülmemiştir. G3.5 modelinde faz dönüşümünün bulunup bulunmadığını anlamak için kullanılabilecek diğer bir yaklaşım ise kohesif enerjinin sıcaklığa bağlı değişimidir. Ancak, bu değişimlerden de üç taneli modellerin tamamında model boyutlarının (tane boyutlarının) değişmesine rağmen faz dönüşümüne işaret edebilecek bir bulguya rastlanmamıştır. Faz dönüşümünün olup olmadığını anlamak için kohesif enerji değişimlerinin yerine Şekil 5.21 de verilen hacim-sıcaklık değişimi incelenmiştir. Hacim-sıcaklık değişimi grafiğinde 150 K sıcaklıkta bir faz dönüşümünün olduğu açıkça görülmektedir. Burada bir faz dönüşümünün olduğu OVITO yazılımının CNA yapısal analizinden de anlaşılmıştır.



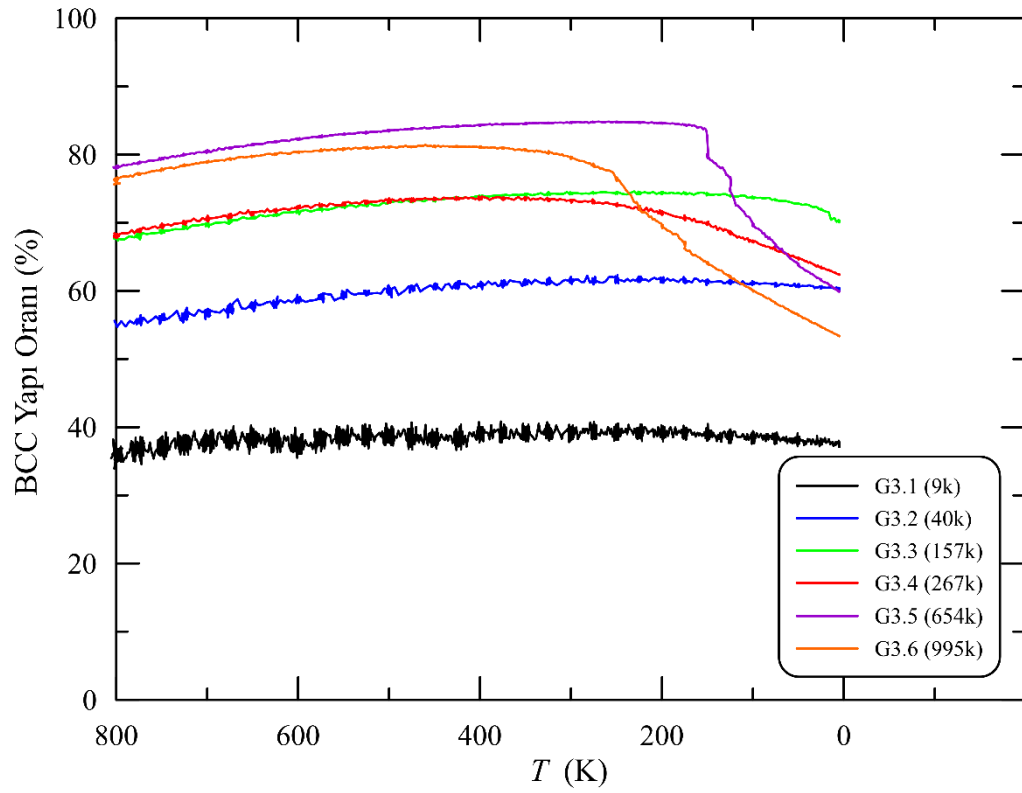
Şekil 5.21 G3.5 modeli için hacim-sıcaklık değişimi.

Şekil 5.22 de ise G3.5 modelindeki her bir tanedeki yapısal dönüşümler sıcaklığa bağlı olarak verilmiştir. Şekil 5.22 de bütün tanelerin aynı sıcaklıkta faz dönüşümüne başladığı görülür. BCC yapı oranı 1, 2 ve 3 numaralı tanelerde sırasıyla %74, %77 ve %79 civarında tespit edilmiştir. Faz dönüşümünün gözlenmeye başladığı 175 K sıcaklığına kadar BCC yapı oranlarında %4 civarında bir artış meydana gelmiştir. Soğutmanın yapıldığı bu bölgede FCC ve HCP yapı oranlarında meydana gelen artış ise %1-2 civarındadır. Buradan, faz dönüşümü öncesinde soğutma süresince sınır atomlarının %4 lük bir kısmının BCC yapıya ve %1-2 lik kısmının ise FCC ve HCP yapılara eklenerek bir tane sınırı gevşemesinin olduğu sonucuna ulaşılabilir. Faz dönüşümü ile birlikte BCC yapı oranlarında ortalama %19 luk bir azalma ve FCC ile HCP yapı oranlarında ise %26 lık bir artış gözlenmiştir. Bu sonuçlardan, %7 civarında tane sınırı atomunun dönüşüme destek verdiği söylenebilir. BCC yapının tamamen martensit fazlarına dönüşmemesi ve martensit faz içinde varlığını koruması deneysel olarak da gözlenen bir sonuçtur [80]. Ayrıca, taneler içindeki faz dönüşümü davranışı birbirlerine göre küçük farklılıklar göstermektedir. Bu farklılıklar tane atom sayılarının farklı olmasından kaynaklanabilir. Tablo 5.5 de verilen tane atom sayıları G1 için 244.836, G2 için 175.138 ve G3 için de 134.356 dır. Bu atom sayıları dikkate alındığında tane içindeki dönüşümlerin atom sayıları ile sistematik ilişkili olmadığı anlaşılır. Atom sayısı fazla olan G1 tanesinin dönüşüm oranı G2 ve G3 e göre daha fazla iken G2 ve G3 arasında atom sayısına göre ters bir ilişki görülür. Bu durum, tanelerin yapısal (geometrik) özelliklerinin de faz dönüşümünde etkili olabileceği düşüncesini doğurur.

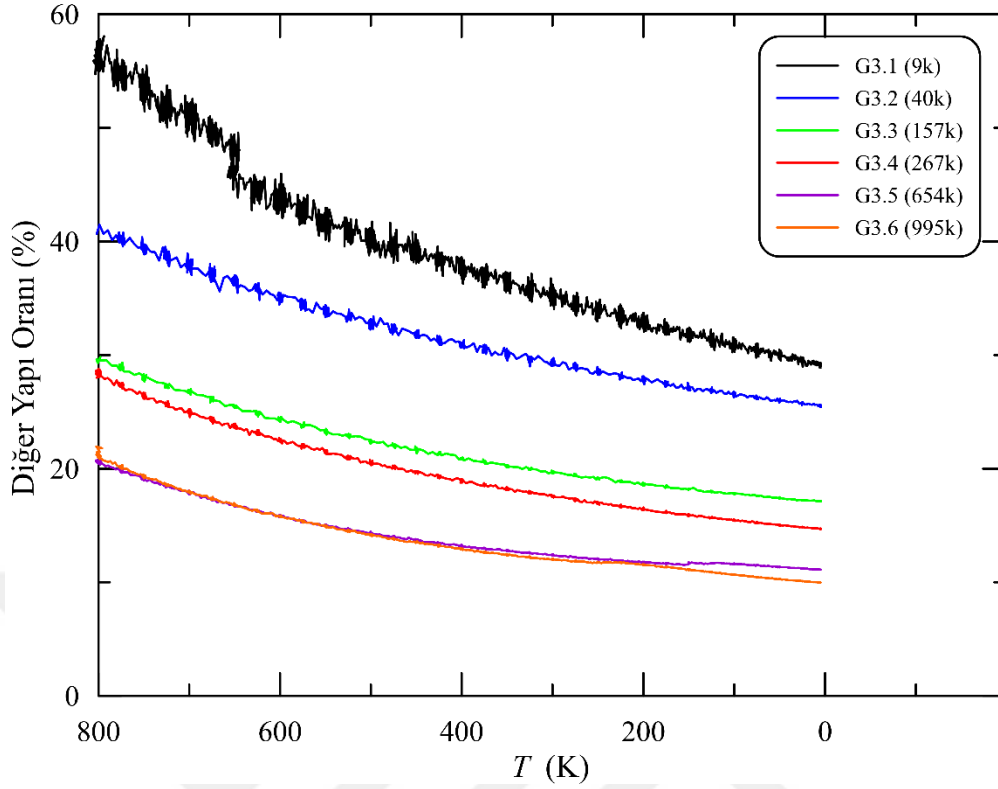
Şekil 5.23 de üç taneli kurulan bütün modellerdeki BCC yapısının sıcaklık ile değiştiği gösterilmiştir. Tablo 5.5 de görüldüğü üzere en düşük atom sayısına sahip G3.1 modelinde, BCC yapıda soğutmayla birlikte belirgin bir azalma söz konusu olmazken atom sayısının artmasıyla BCC yapıda sıcaklığa bağlı bir azalma gözlenmiştir. Üç taneli kurulan en büyük model G3.6 da BCC yapıdaki değişim en fazla olmuştur. Bu durum, model boyutlarındaki artışla birlikte tane sınır atomlarının modeldeki toplam atom sayısına oranının azalması ile açıklanabilir. Başka bir deyişle, model büyüdükçe tane sınır kalınlığı azalmakta ve faz dönüşümüne katılan atom sayısı da beraberinde artmaktadır. Bu yorum, çok küçük tane boyutlarına sahip nano-kristal metallerde mekanik yumuşama konusunu içeren bir başka moleküler dinamik çalışmasında da gözlenmiştir [78, 81].



Şekil 5.22 G3. 5 modeli için her bir tanedeki yapısal dönüşümlerin sıcaklık ile değişimi.



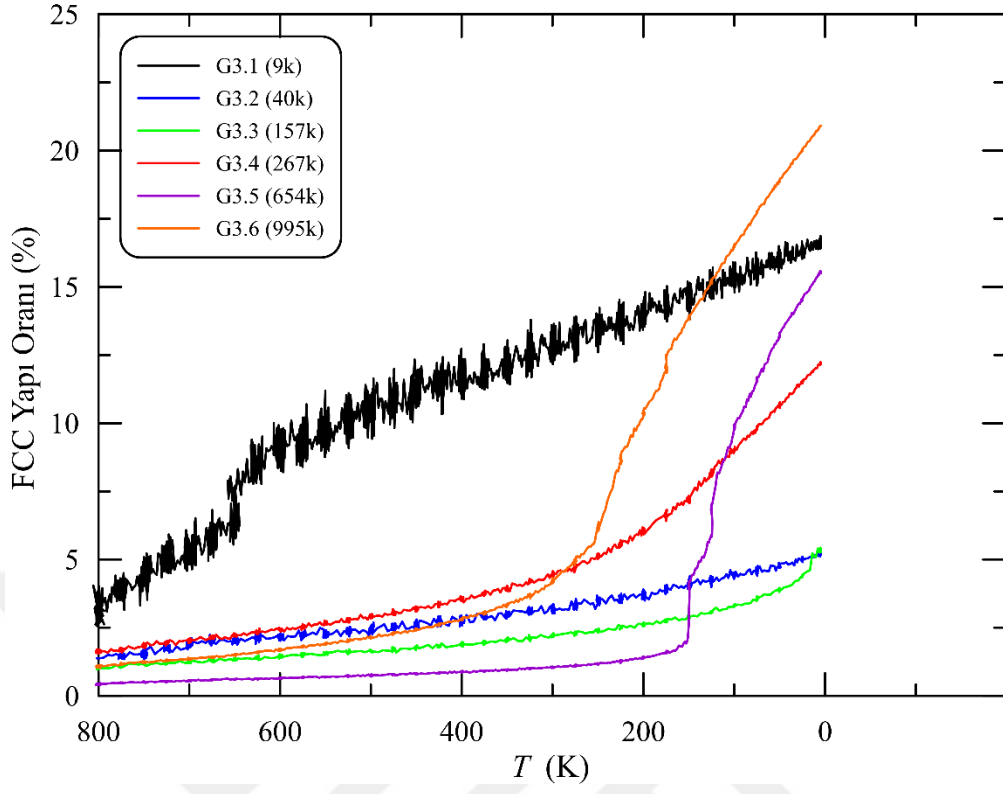
Şekil 5.23 Üç taneli bütün modeller için BCC yapılarının sıcaklık ile değişimi.



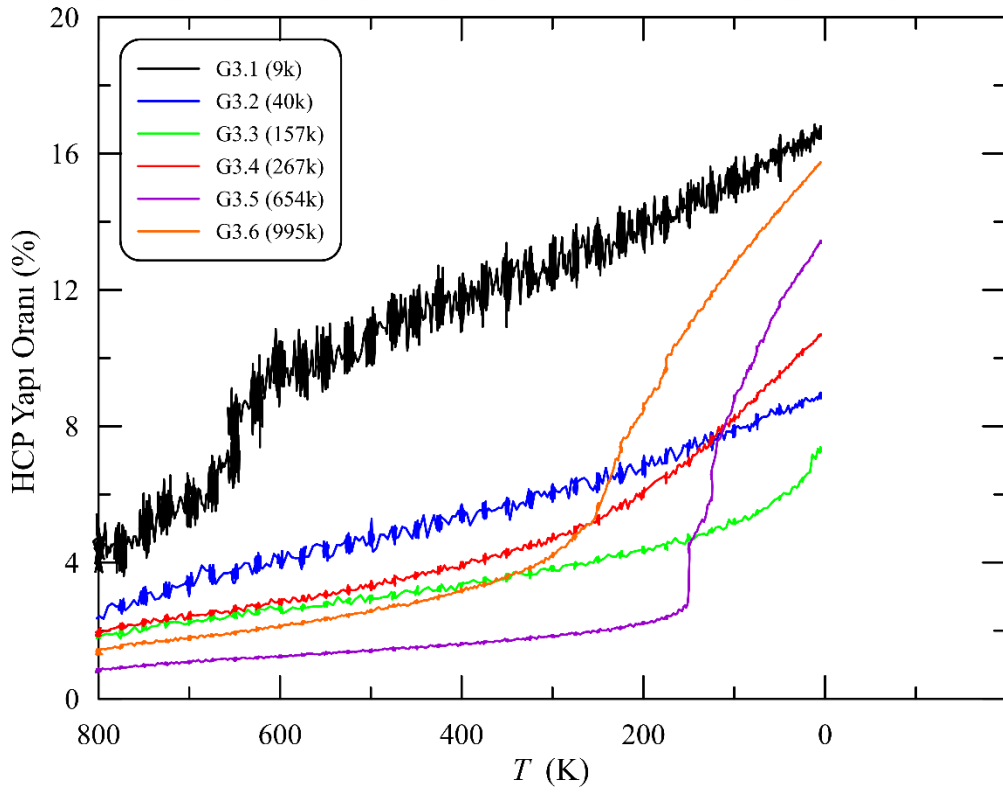
Şekil 5.24 Üç taneli modellerdeki tane sınırı atomların soğuma ile yüzdelik olarak değişimi.

Şekil 5.24 de görüldüğü üzere üç taneli kurulan bütün modellerde tane sınırındaki atomların atomik yüzdeleri sıcaklıkla azalmıştır. Modellerde atom sayısının fazlaşması ile tane sınırında bulunan atomlarda bir azalma söz konusudur. Tane sınırındaki diğer yapıların düşmesi ile beraber tane içindeki düzenli kristal yapı oranı da artmıştır. Bu gözlem Şekil 5.23 için yapılan yorumları ve literatürdeki gözlemleri doğrular [81, 82].

Şekil 5.25 ve 5.26 da görüldüğü üzere FCC yapı ve HCP yapılar sıcaklığın düşmesiyle beraber artış eğilimi sergilemiştir. FCC ve HCP yapıların sıcaklığın azalmasıyla birlikte ani artması modellerde faz dönüşümünün önemli bir göstergesidir. Ancak, bu tek başına yeterli değildir. Çünkü tanelerde bir faz dönüşümünden bahsedebilmek için BCC yapı oranının soğuma ile düşmesi ve FCC ile HCP yapı oranlarının eş zamanlı olarak artması beklenir. Bu eğilimi gösteren modeller G3.4, G3.5 ve G3.6'dır. G3.1, G3.2 ve G3.3 modellerinde BCC yapı oranında net bir azalma söz konusu değildir. Ancak, tane sınırlarındaki atomlarda yüzdece bir azalma varken FCC ve HCP yapılarda yüzdece bir artış söz konusudur. Bu nedenle, tane sınırındaki atomların sıcaklığın düşmesiyle FCC ve HCP yapılara katıldıkları söylenebilir. G3.4, G3.5 ve G3.6 modellerinde, BCC yapı oranı düşmeye başlamadan önce bir artış eğilimi sergiler. Bu artışın sebebi de yine tane sınırlarındaki atomlardan kaynaklanır.



Şekil 5.25 Üç taneli modellerde FCC yapının soğutma boyunca değişim grafiği.



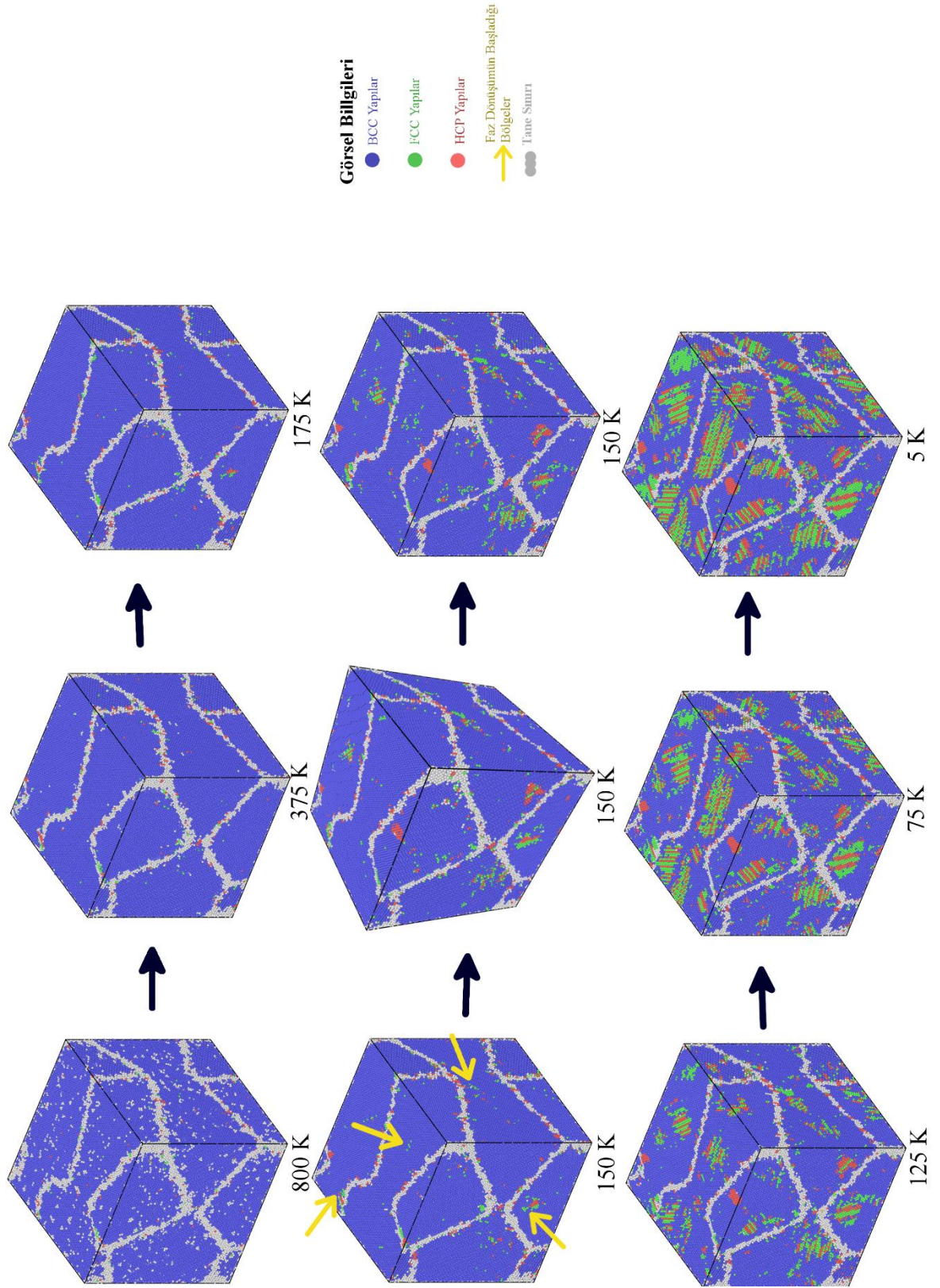
Şekil 5.26 Üç taneli modellerde HCP yapının soğutma boyunca değişim grafiği.

Üç taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıkları Tablo 5.6 da verilmiştir. G3.1, 2, 3, 4 modellerinde faz dönüşümü gözlenmemiştir. İki taneli modellere kıyasla 3 taneli modelde faz dönüşümünün gözlemlendiği atom sayısı daha yüksektir.

G3.4 modelinde G3.5 ve G3.6 modellerine nazaran net bir faz dönüşümü gözlenmediğinden faz dönüşümünün karakteri G3.5 modelinin ekran görüntüsü ile anlaşılmaya çalışılmış ve bu görüntü Şekil 5.26 da verilmiştir. Şekil 5.27 de soğutmayla birlikte 375 K ve 175 K sıcaklıklarında tane sınırındaki atomların kristal yapılarında değişimler görülür. Sıcaklık 150 K e düşürüldüğünde sarı oklar ile gösterilen bölgelerde martensit faz büyümeye başlayarak diğer bölgelere yayılır. Kristal yapı değişiminin başladığı bölgeler ya tane sınırının içerisinde ya da tane sınırına oldukça yakındır.

Tablo 5.6 Üç taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıkları.

Model No	G3.1	G3.2	G3.3	G3.4	G3.5	G3.6
M_s (K)	-	-	-		150	275



Şekil 5.27 Üç taneli G3.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşümü ekran görüntüsü.

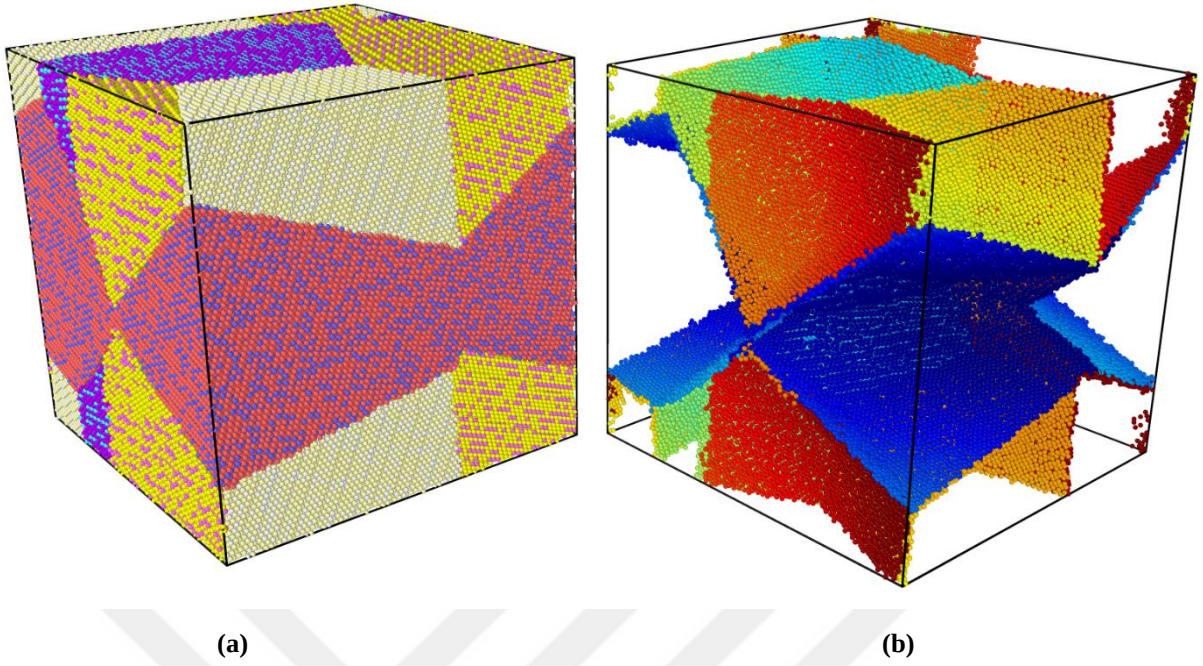
5.2.3 Dört taneli polikristal alaşım modelleri

Dört taneye sahip polikristal şekil hatırlamalı alaşımlarda faz dönüşümünü gözlemek için 6 farklı farklı büyüklükte model kurulmuştur. Bu modellere ait, model numaraları, boyutları, her bir modelin Ni, Al, tane içi ve toplam atom sayıları Tablo 5.7 de verilmiştir.

Dört taneli polikristal şekil hatırlamalı alaşımlarda atom sayısının faz dönüşümü üzerindeki etkisini incelemek için kurulan bütün modellerde iki ve üç taneli yapılarda olduğu gibi tane geometrilerini değiştirmeden yalnızca model boyutları artırılarak tanelerdeki atom sayıları arttırılmıştır. Dört taneli kurulan bütün modellerde de diğerlerinde olduğu gibi simülasyon hücreleri 800 K de ilk önce minimize edilmiş ve sistem sıcaklığı kademeli olarak 800 K den 5 K e kadar 25 K adımlarla düşürülmüştür. Kurulan bütün sistemler için her bir sıcaklık değeri 100.000 MD adımı çalıştırılmıştır. Yani her bir sıcaklık değerinde sistem 100.000 MD adımı bekletilerek yapının dengelenmesi sağlanmıştır. Üretilen bütün modellerde Ni oranı at.%75 dir. Modellerin termodinamik incelemesini yapmak ve sistemin simülasyon boyunca davranışını incelemek amacıyla, sistemin kohesif enerji-MD adımı, hacim-sıcaklık ve yapısal dönüşüm grafikleri kullanılmıştır. Ayrıca, Şekil 5.28 de dört taneli yapıların simülasyon hücresinin örneği ve tane sınırının görüntüsü verilmiştir. İki ve üç taneli modellerde olduğu gibi dört taneli modellerde de tane ve tane sınırı geometrileri sabit tutulmuştur.

Tablo 5.7 Dört taneli modellerin temel özellikleri.

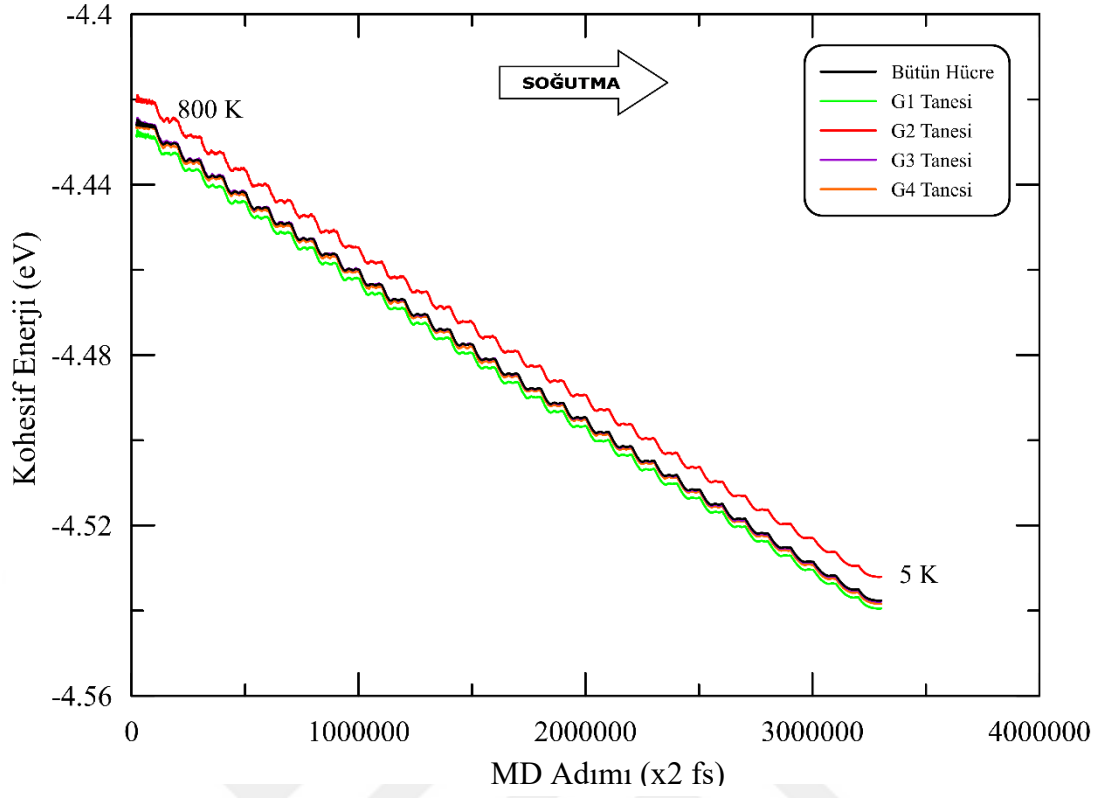
Model Num.	Ölçüler Nanometre (nm)	Toplam Atom Sayısı	Tane Atom Sayıları				Toplam Tane Sınır Atom Sayısı	Toplam Tane Sınır Alanı (nm ²)
	X x Y x Z		G1	G2	G3	G4		
G4.1	5,0 x 5,0 x 5,0	9365	3128	1344	2352	2541	4386	991,36
G4.2	8,0 x 8,0 x 8,0	39914	12890	5911	10449	10664	12174	2672,11
G4.3	12,5 x 12,5 x 12,5	156771	49880	23557	41843	41491	31459	6832,41
G4.4	14,9 x 14,9 x 14,9	267020	84311	40362	71553	70794	44976	9750,90
G4.5	20 x 20 x 20	652558	205032	99160	175828	172538	81946	17573,80
G4.6	23 x 23 x 23	994436	310454	151726	269621	262265	108256	23147,40



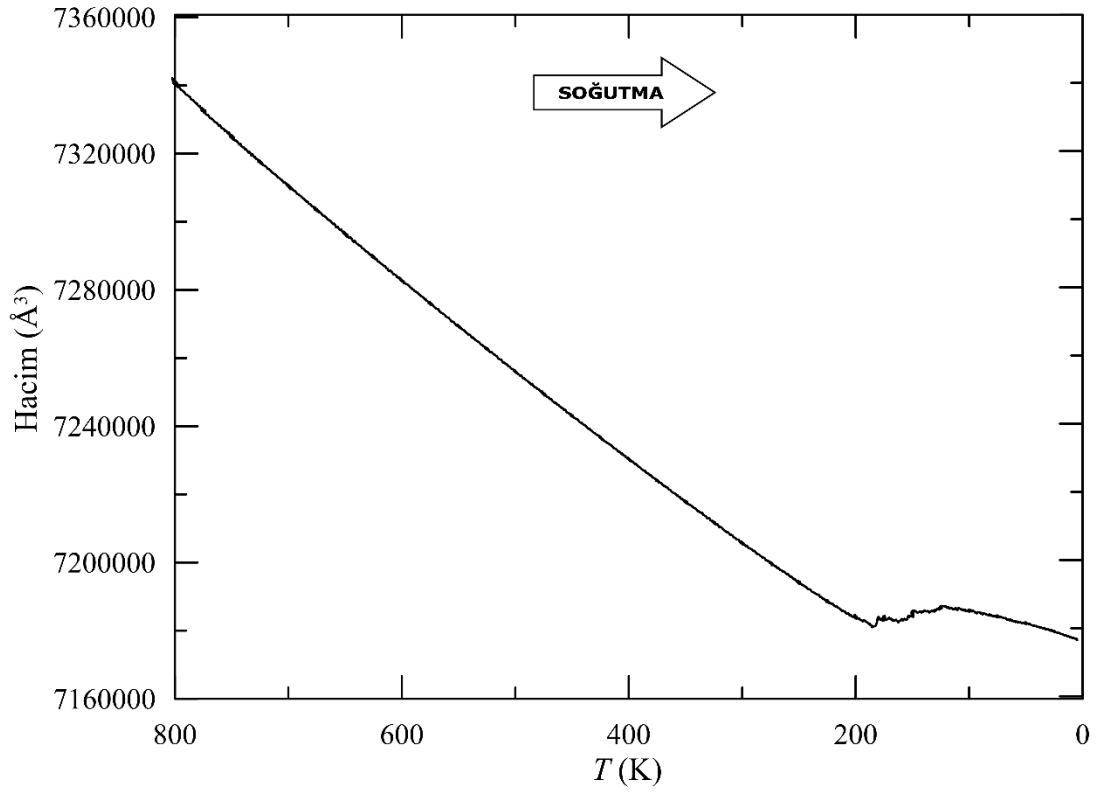
Şekil 5.28 Dört taneli G4.5 modelinin simülasyon hücresine ait ekran görüntüleri, **(a)** dört taneli G4.5 modelinin simülasyon hücresi ve **(b)** tane sınırı geometrisi.

İki ve üç taneli modeller için yapılan analizler dört taneli 6 model için de aynı şekilde tekrarlanmıştır. İlk olarak iki ve üç taneli modellerle karşılaştırma yapılabilmesi için dört taneli model için de beşinci büyüklükteki G4.5 modeli üzerinden detaylar verilmiştir.

Kohesif enerji-MD adımı değişim grafiği Şekil 5.29 da verilmiştir. Her bir tanede ve bütün simülasyon hücresinin kohesif enerjisi MD adımıyla beraber kademeli olarak azalmıştır. Ancak üç taneli G3.5 modelinde olduğu gibi burada da kohesif enerjide bir anomali söz konusu değildir. Bu nedenle hacim-sıcaklık değişimi Şekil 5.30 da verilmiştir. Şekil 5.30 incelendiğinde sıcaklığın azalmasıyla birlikte G3.5 modelinde elde edilen sonuçlara benzer bir değişim görülmektedir. Burada da hacimdeki ani değişim yapısal bir faz dönüşümünü ifade etmektedir.



Şekil 5.29 G4.5 modeli için Kohesif enerji-MD adımına göre grafiği

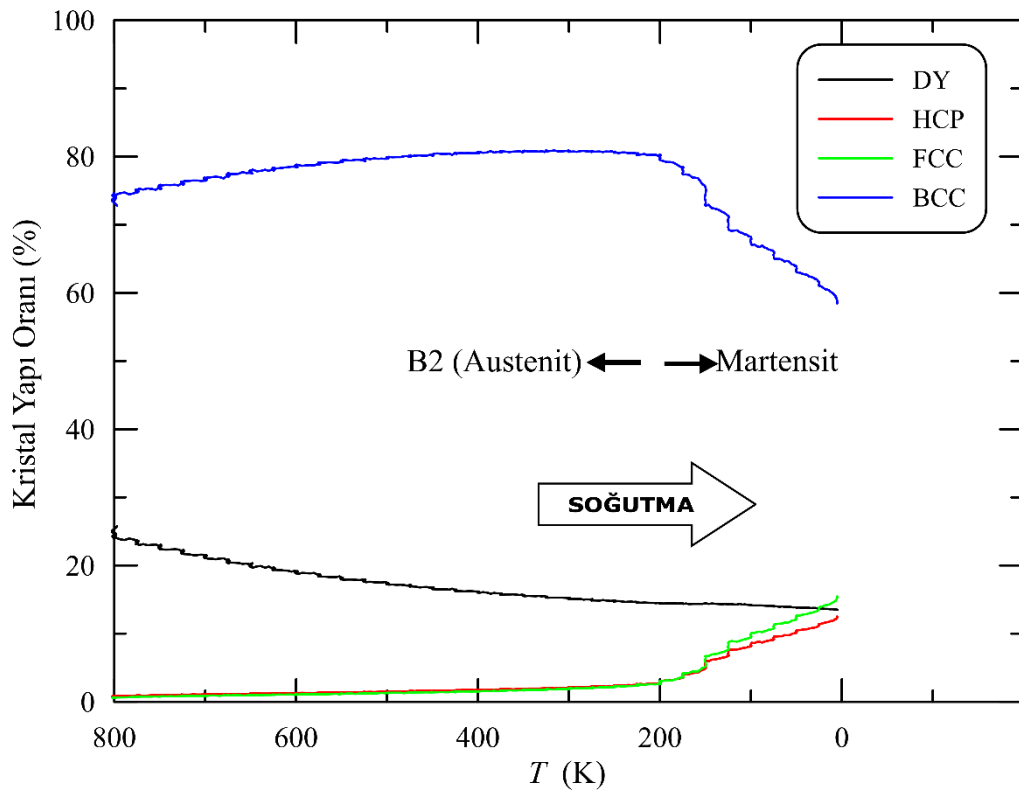


Şekil 5.30 G4.5 modeli için hacim-sıcaklık değişimi.

G4.5 modelinde soğuma ile hem bütün simülasyon hücresindeki hem de tanelerdeki yapısal değişimleri analiz etmek amacıyla Şekil 5.31 de verilen yapısal oran değişimlerinden yararlanılmıştır. Bu model için de G2.5 ve G3.5 modellerinde olduğu gibi BCC yapı oranı önce hafifçe artmış ve sonra 200 K sıcaklığından itibaren kademeli olarak azalmaya başlamıştır. Tane sınırında bulunan “diğer” atomlar soğutma boyunca azalmamıştır. Ancak 200 K sıcaklığında küçük bir artış meydana gelmiş ve sonra yine azalmaya devam etmiştir. FCC ve HCP yapılar ise 200 K sıcaklığına kadar düşük bir artış hızı sergilemişken (bu artış tane sınırındaki atomlardan kaynaklanmaktadır) 200 K den sonra kademeli olarak daha hızlı bir şekilde artmıştır.

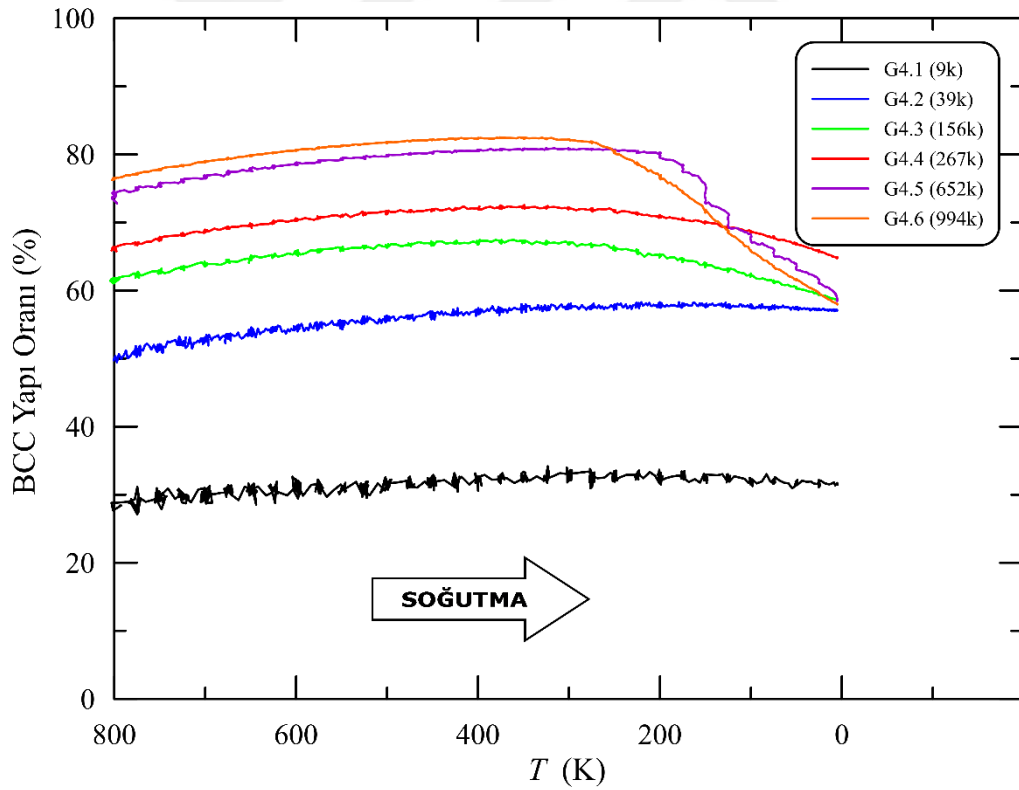
Dört taneli bütün modellerin atom sayısına bağlı olarak yapısal dönüşümlerinin nasıl değiştiğini anlamak için BCC, FCC, HCP ve diğer yapı oranlarının sıcaklığa bağlı değişimlerinden yararlanılmıştır.

Şekil 5.32 de dört taneli olarak kurulan bütün modellerde BCC yapıların değişim karakteristiği atom sayısına bağlı olarak değiştiği görülmektedir. En az atom sayısını sahip G4.1 modelinden (9k atomlu) en büyük atom sayısına sahip G4.6 modeline (994k atomlu) doğru gidildikçe simülasyon hücresinin sahip olduğu BCC yapı oranı artış göstermiştir.

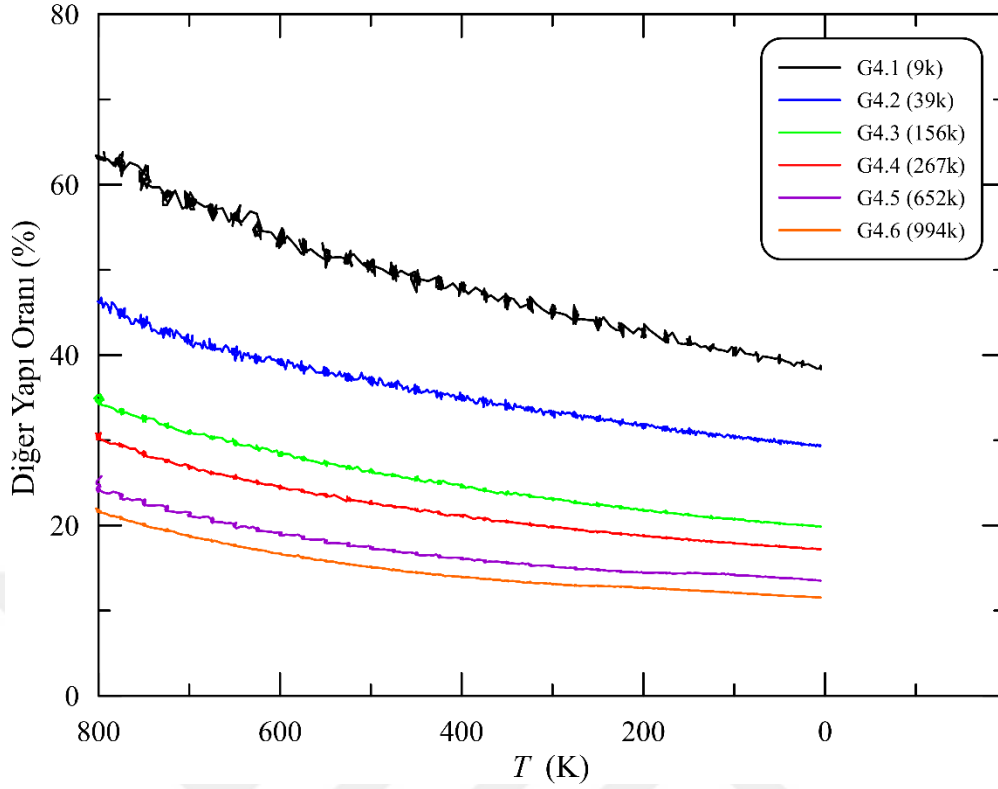


Şekil 5.31 G4.5 modeli yapısal dönüşüm-sıcaklık grafiği

Şekil 5.32 de görüldüğü gibi atom sayısının artmasıyla beraber BCC yapılarının dönüşüm hızlarında da artış mevcut olmasına karşın, BCC yapı dönüşüm hızının en fazla olduğu model G4.5 dir. G4.6 modelinin atom sayısı G4.5 modelinden (652k) fazla olmasına karşın dönüşüm hızı G4.5 modelinden daha da düşüktür. BCC yapılarının azalmaya başladığı sıcaklık değeri ise atom sayısının artmasıyla beraber yükselmiştir. İki ve üç taneli modellerde de aynı durum söz konusudur. Şekil 5.33 incelendiğinde diğer yapıların oranı, atom sayısının artması ile azalmaktadır. Soğuma ile beraber bütün modellerde diğer yapı miktarı azalmaktadır. Ancak G4.5 ve G4.6 modellerinde, iki ve üç taneli modellerde olduğu gibi faz dönüşümünün gerçekleşmeye başladığı sıcaklıkta diğer atomların yüzdece oranında küçük bir artış olmuş ve akabinde tekrardan azalmaya başlamıştır.



Şekil 5.32 Dört taneli modellerin BCC yapılarının sıcaklık ile değişim grafiği.



Şekil 5.33 Dört taneli modellerin diğer yapılarının sıcaklık ile değişim grafiği.

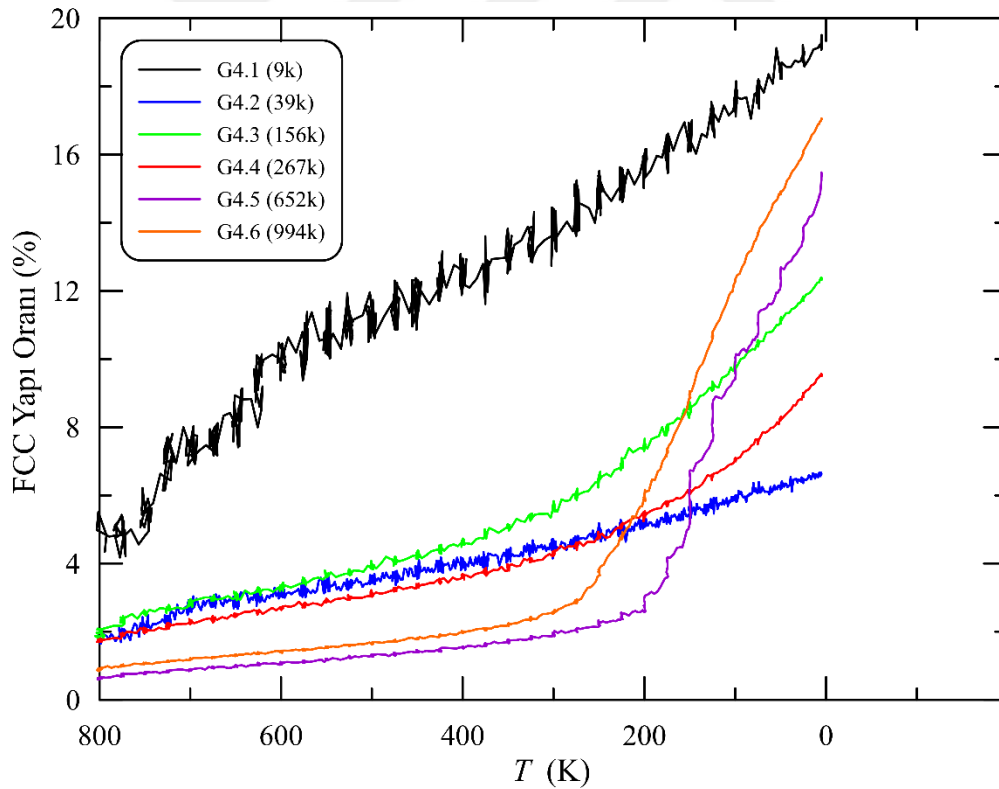
Şekil 5.34 ve 5.35 de FCC ve HCP yapı oranlarının sıcaklık ile değişimi verilmiştir. Dört taneli FCC ve HCP yapılarının değişim karakteristikleri, iki ve üç taneli yapılardakine benzemektedir. G4.1 modeli 9k atoma sahip olup en küçük model olmasına karşın FCC ve HCP yapılarının 800 K de yüzdece en fazla olduğu modeldir. Modellerin atom sayılarının artmasıyla beraber başlangıçtaki FCC ve HCP yapılarının yüzdece oranları gittikçe azalmaktadır ve G4.5 ve G4.6 modellerinin FCC ve HCP oranları neredeyse bir birine eşittir. Sıcaklığın azalmasıyla beraber dört taneli bütün modellerde FCC ve HCP yapılarının oranlarında bir artış olmaktadır. Ancak, yalnızca G4.5 ve G4.6 modellerinde dikkate değer bir faz dönüşümü gözlenmiş, G4.4 modelinde ise açık bir faz dönüşümü gözlenmemiştir. Faz dönüşümünün olmadığı G4.1, G4.2 G3.3 modellerinde FCC ve HCP yapılarının model içerisindeki yüzdece oranının artmasının sebebi tane sınırları atomlarının katkısı olabilir.

Dört taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıkları Tablo 5.8 de verilmiştir. G4.1, 2, 3, 4 modellerinde kayda değer bir faz dönüşümü gözlenmemiştir. Dört taneli modellerden elde edilen M_s sıcaklıkları genel olarak iki taneli modellerden elde edilen dönüşüm

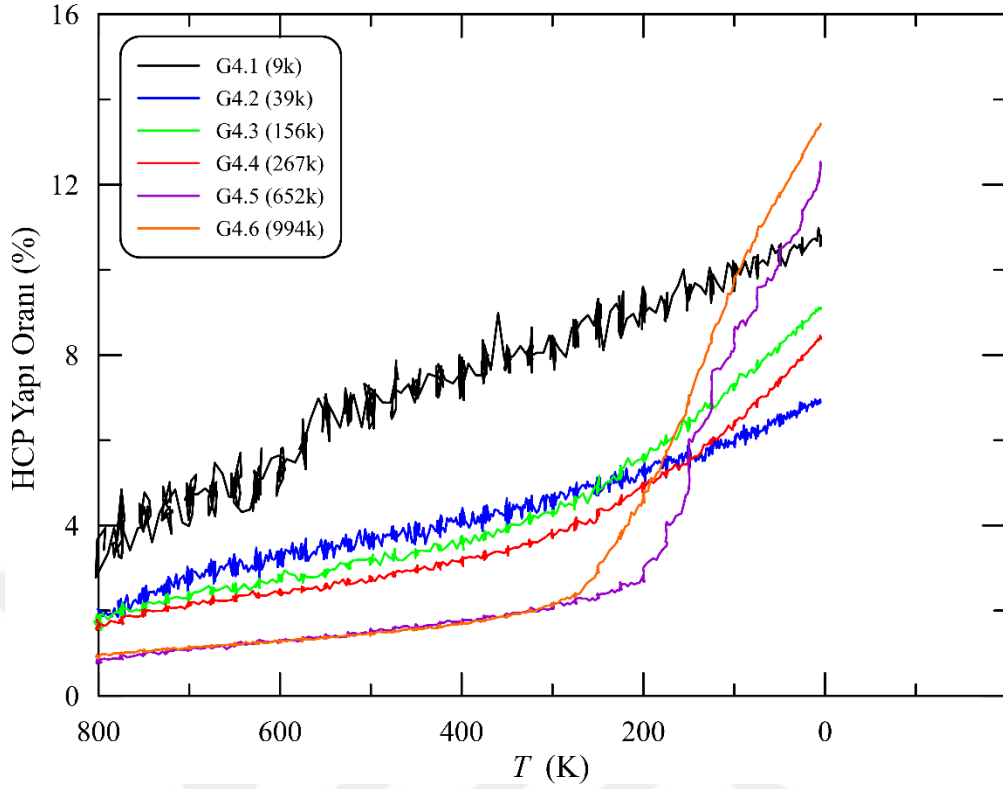
sıcaklıklarından düşük, üç taneli modellerin M_s sıcaklığından yüksektir. Bunun nedeni olarak üç taneli modellerdeki HCP yapı oranlarının dört taneli modellerdekinden daha düşük tespit edilmesi olabilir. HCP yapı oranları simülasyon hücresindeki yığılma kusurlarının önemli bir göstergesidir. Bu nedenle, yığılma kusuru yüksek olan yapılarda martensit faz dönüşümü için gerekli olan sürücü kuvvet daha düşük olmakta ve martensit faz dönüşümünü desteklemektedir.

Tablo 5.8 Dört taneli polikristal modellerin M_s sıcaklıkları.

Model No	G4.1	G4.2	G4.3	G4.4	G4.5	G4.6
M_s (K)	-	-	-	-	175	275

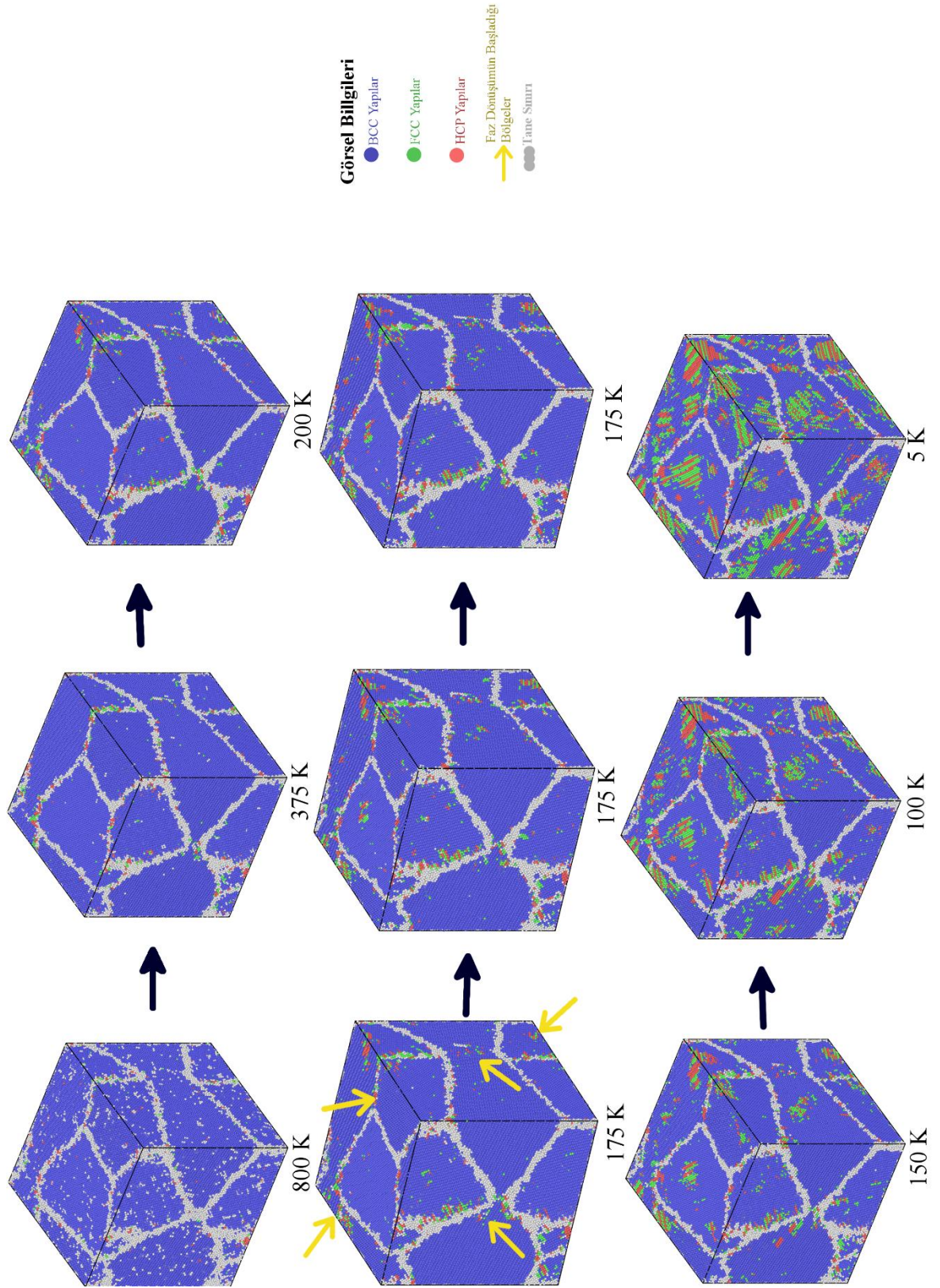


Şekil 5.34 Dört taneli modellerde FCC yapıların sıcaklık ile değişim grafiği.



Şekil 5.35 Dört taneli modellerde HCP yapıların sıcaklık ile değişim grafiği.

Şekil 5.36 da dört taneli G4.5 modelinin soğutma esnasındaki ekran görüntülerine yer verilmiştir. Sistem sıcaklığı düştükçe ilk önce tane sınırlarındaki atomların kristal yapılarında değişimler gözlenmiştir. Benzetim hücresi 200 K sıcaklığına geldiğinde bazı tanelerde bir miktar yapısal dönüşüm gerçekleşmiştir. 175 K sıcaklığına gelindiğinde ise sarı oklar ile gösterilen yerlerde faz dönüşümü başlamıştır. Başlayan bu faz dönüşümünün bir kısmı 200 K sıcaklığından miras kalan yapılardan, bir kısmı tane sınırından veya tane sınırına oldukça yakın bölgelerden ve bir bölümü ise bazı tanelerin merkezlerine yakın bölgelerde başlamıştır. Yaklaşık aynı sayıda atoma sahip iki taneli ve üç taneli yapılardan farklı olarak dört taneye sahip G4.5 modelinde aynı sıcaklık değerinde faz ilerlememiştir. Sistemin sıcaklığı azaldıkça yeni faz ilerlemeye devam etmiştir. Buna ek olarak G2.5 ve G3.5 modellerine kıyasla G4.5 modelinde daha az miktarda faz dönüşümü gözlenmiştir.



Şekil 5.36 Dört taneli G4.5 modelinin 125 K/ns soğutma hızındaki faz dönüşümü ekran görüntüsü.

6. SONUÇLAR

- a) Tek kristal 3456 atoma sahip at.%68-75Ni kompozisyonlu modellerde M_s sıcaklıkları hesaplandı ve kompozisyonun armasına bağlı olarak M_s sıcaklığının hemen hemen doğrusal arttığı gözlemlendi (Bkz. Sayfa 36, Şekil 5.5). at.%68Ni kompozisyonundan daha düşük Ni oranları için faz dönüşümü gözlenmemiştir.
- b) Tek kristal at.%75Ni kompozisyonlu 2000, 3456, 16000, 54000 ve 128000 atoma sahip modellerde M_s sıcaklığının atom sayısının artmasıyla üstel olarak azaldığı tespit edildi. Bir başka deyişle, model boyutunun artmasıyla dönüşüm sıcaklığı azalmaktadır. (Bkz. Sayfa 37, Şekil 5.6)
- c) Atom sayısının artmasıyla faz dönüşüm hızının da arttığı tespit edildi. (Bkz. Sayfa 44, Şekil 5.13)
- d) At.%75Ni kompozisyonlu aynı tane sayılı polikristal modellerde model boyutunun (atom sayısının) artmasının M_s sıcaklığının yükselmesine sebep olduğu görüldü. Model boyutunun artması faz dönüşümü üzerindeki mekanik sınırlama etkisini azaltmakta olduğu düşünüldü. (Bkz. Sayfa 48, Şekil 5.17)
- e) Polikristal modellerde sabit atom sayısında tane miktarı değiştirildiğinde M_s sıcaklığının etkilendiği ancak bu etkilenmenin sistematik olmadığı tespit edildi. Bu duruma, çalışmada tane geometrisi ve/veya tane yönelimlerinin kontrolsüz değişiminin yol açabileceği var sayıldı.
- f) Tane sayısının artması faz dönüşümünü etkiledi ve faz dönüşüm hızı tane sayısına bağlı olarak değişti.
- g) Polikristal modeller için tane içindeki atom sayılarının artmasıyla beraber başlangıçtaki FCC ve HCP yapılarının yüzde oranlarının azaldığı tespit edilmiştir.

7. KAYNAKLAR

- [1] **Hodgson, Darel E., W. H. Ming, and Robert J. Biermann**, 1990. Shape memory alloys, *ASM International, Metals Handbook, Tenth Edition*. **2**, 897-902.
- [2] **Thamburaja, P. and Anand, L.**, 2001. Polycrystalline shape-memory materials: effect of crystallographic texture, *Jornal of The Mechanics and Physics of Solids*, **49**, 709-737.
- [3] **Callister, W.D.**, Malzeme Bilimi ve Mühendisliği, 8. Baskı, Nobel Yayınevi, 2013, Türkiye.
- [4] **Brice, J. C. and Rudolph, P.**, 2000. Crystal Growth. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*.
- [5] **Lejcek P.**, Grain Boundary Segregation in Metals, Springer Series in Materials Science, 2010, Almanya.
- [6] **Watanabe, T.**, 2011. Grain Boundary Engineering: Historical Perspective and Future Prospects, *J. Mater Sci.*, **46**, 4095-4115
- [7] **Askeland, D. R.**, The Science and Engineering of Materials, S.I. Edition, 1988, Amerika.
- [8] **Hirth J.P., Lothe J.**, Theory of Dislocations, Second Edition, John Wiley & Sons, 1982, USA.
- [9] **Haile, J. M.**, Molecular Dynamics Simulation, Elementary Methods, John Wiley & Sons, Inc., 1992, Kanada.
- [10] **Rapaport, D.C.**, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press. 2004, UK.
- [11] **Özgen, S.**, 1997, Sayısal hesaplama yöntemlerinin şekil hatırlamalı alaşımlarda difüzyonsuz dönüşümlere uygulanması, Doktora Tezi, Fırat Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [12] **Sun, D. Y., and Gong, X.G.**, 2002, A new constant-pressure molecular dynamics method for finite systems, *J. Phys. Condens Matter*, **14**, L487-L493.
- [13] http://en.rfwiki.org/wiki/List_of_software_for_molecular_mechanics_modeling: Mart, 2017
- [14] <http://LAMMPS.sandia.gov/>: Mart, 2017
- [15] <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/> : Mart, 2017
- [16] <http://imd.itap.physik.uni-stuttgart.de/> : Mart, 2017
- [17] <http://www.gromacs.org/> : Mart, 2017
- [18] **Morrison, K.R., Cherukara, M.J., Kim, H., Strachan, A.**, 2015, Role of grain size on the martensitic transformation and ultra-fast superelasticity in shape memory alloys, *Acta Materialia*, **95**, 37-43.
- [19] **Farkas D., Mutasa B., Vailhe C., Ternes K .**, 1995, Interatomic potentials for B2 NiAl and martensitic phases, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **3**, 201.
- [20] **Morrison, K.R., Cherukara, M.J., Guda Vishnu, K., Strachan, A.**, 2014. Role of atomic variability and mechanical constraints on the martensitic phase transformation of a model disordered shape memory alloy via molecular dynamics, *Acta Mater.*, **69**, 30.

- [21] **La Roca, P.M., Isola, L.M., Sobrero, C.E., Vermaut, Ph., Malarria, J.**, 2015. Grain size effect on the thermal-induced martensitic transformation in polycrystalline Cu-based shape memory alloys, *Materials Today: Proceedings* 2S, S743 – S746.
- [22] **Zhang, Z., Ding, X., Deng J., Cui, J., Sun, J., Suzuki, T., Otsuka, K., Ren, X.**, 2013. Surface Effects on Structural Phase Transformation in Nanosized Shape Memory Alloys, *The Journal of Physical Chemistry C*, **117**, 7895-7901.
- [23] <http://math.lbl.gov/Voro++/> : 5 Ocak 2017.
- [24] <https://code.google.com/p/LATGEN/>: 5 Ocak 2017
- [25] **PurjaPan, G.P., and Mishin, Y.**, 2009, Development of an interatomic potential for the Ni-Al system, *Philosophical Magazine*, **34-36**, 3245–3267.
- [26] <https://OVITO.org/>, 4 Mayıs 2017.
- [27] **Dasgupta, R., Jain, K.A., Kumar P., Hussein, S., Pandey, A.**, 2014. Effect of alloying constituents on the martensitic phase formation in some Cu-based SMAs, *J. Matter Res. Techhol*, **3**, 264-273.
- [28] **Vlack V.**, 1970, *Materials Science for Engineers*, Addison-Wesley Publishing, World Student Series Edition, USA.
- [29] **Malheiros, L.R.C., Figueiredo, R.B., Langdon, T.G.**, 2015. Grain size and microhardness evolution during annealing of a magnesium alloy processed by high-pressure torsion, *J. Mater. Res. Technol.*, **4(1)**, 14-17.
- [30] **Hishinuma, Y., Kikuchi, A., Shimada, Y., Hata, S., Takeuchi, T., Yamada, S.**, 2014. Effect of boron particle size on microstructure and superconducting properties of in-situ Cu addition MgB₂ multifilamentary wire, *Journal of Physics: Conference Series*, **507**, 22009
- [31] **Pelegrina, J.L., Fabietti, L.M., Condo, A.M., Pozo Lopez, G., Urreta, S.E.**, 2010. The influence of microstructure on the martensitic transformation in Cu-Zn-Al melt-spun ribbons, *Philosophical Magazine*, **90(20)**, 2793-2805.
- [32] **Meyers, M.A., Mishra, A., Benson, D.J.**, 2006. Mechanical properties of nanocrystalline materials, *Progress in Materials Science*, **51**, 427-556.
- [33] **Chokshi AH, Rosen A, Karch J, Gleiter H.**, 1989. On the validity of the Hall–Petch relationship in nanocrystalline materials *Scripta Mater.*, **23**, 1679–84.
- [34] **Nieh TG, Wadsworth J.**, 1991. Hall-Petch relation in nanocrystalline solids, *Scripta Metall Mater.*, **25**, 955–958.
- [35] **Arzt, E.**, 1998. Size effects in materials due to microstructural and dimensional constraints: a comparative review, *Acta Materialia*, **49**, 5611-5626.
- [36] **Karch, J., Birringer, R., Gleiter, H.**, 1987. Cremaics ductile at low temperature, *Nature*, **330**, 556-558.
- [37] **Rollett, A.D.**, Grain Boundaries, Misorientation Distributions, Rodrigues space, Symmetry, http://pajarito.materials.cmu.edu/rollett/27750/L13-Grain_Bndries_RFspace-15Mar16.pdf, 24 Mar. 2016.
- [38] **Gokhale, S., Nagamanasa, K.H., Ganapathy, R., Sood, A.K.**, 2013. Grain growth and grain boundary Dynamics in colloidal polycrystals, *Soft Matter*, **29**, 6634-6644.

- [39] **G.H. Bishop, B. Chalmers**, 1968. A coincidence Ledge Dislocation description of grain boundaries, *Scripta Metall.*, **2**, 133
- [40] **M.F. Ashby, F. Spaepen, S. Williams**, 1978. The structure of grain boundaries described as a packing of polyhedra, *Acta Metall.*, **26**, 1647
- [41] **Otsuka K., Wayman C.M.**, 1998, *Shape Memory Materials*, Cambridge Press, USA
- [42] **Jani, J.M. and Leary, M.**, 2014. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities, *Materials and Design*, **56**, 1078–1113.
- [43] **Morsi, K.**, 2001. Review: reaction synthesis processing of Ni-Al intermetallic materials, *Materials Science and Engineering A*, **299**, 1-15.
- [44] **Ansara, I., Dupin, N., Lukas, H.L., Sundman, B.**, 1997. Thermodynamic assessment of the Al-Ni system, *Journal of Alloys and Compounds*, **247**, 20-30.
- [45] **Baker, I.**, 1995. A review of the mechanical properties of B2 compounds, *Materials Science and Engineering A*, **192/193**, 1-13.
- [46] **Celik, F.A., Yildiz., A.K., Ozgen, S.**, 2011. A Molecular dynamics study to investigate the local atomic arrangement during martensitic phase transformation, *Molecular Simulation*, **37**(5), 421-429.
- [47] **Wei, Z.G., Sandström, R., Miyazaki, S.**, 1998. Shape-memory materials and hybrid composites for smart systems: Part I Shape-memory materials, *Journal Of Materials Science*, **33**, 3743-3762.
- [48] **Porter D.A., Easterling K.E.**, 1992, *Phase Transformation in Metal and Alloys*, Second Edition, Chapman & Hall, London.
- [49] **Pérez-Reche F. J., Vives E., Manosa L., Planes A.**, 2001. On the athermal character of structural phase transitions, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 195701.
- [50] **Z.Nishiyama**, 1978, *Martensitic Transformations*, Academic Press, N.Y., p. 240.
- [51] **Kayalı, N.**, Cu-Zn-Al alaşımlarında martensit stabilizasyonu ve yaşlandırma etkileri, Doktora tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ(Türkiye), 1993.
- [52] **Aspelmeyer M., Klemradt U., Wood L.T., Moss S.C., Peisl J.** 1999. Time-Dependent Aspects of the Athermal Martensitic Transformation: First Observation of Incubation time in Ni-Al, *Phys. Stat. Sol. (a)* **174**, R9.
- [53] **Harikrishnan K, Misra P.S., Chandra K., Agarwala V.S.**, 2009. Characteristic of B2 Transformation in Pseudoelasticity and Shape Memory Effect-a Review, *ESOMAT 2009*, 02019.
- [54] **Uslu, Y.**, 2003. Şekil Hatırlamalı Cu-%13Al-%4Ni ve Cu-%13.5Al-%4Ni Alaşımlarının Termal Özelliklerinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ(Türkiye).
- [55] **Ozgen S, Adiguzel O.**, 2004. Investigation of the thermoelastic phase transformation in a NiAl alloy by molecular dynamics simulation, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **65**, 861-865.

- [56] **Kuşça, H.**, 2015. NiAl Nano Tellerin Mekanik Özelliklerinin Moleküler Dinamik Yöntemiyle İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ(Türkiye).
- [57] **Ko, W-S., Maisel, S.B., Grabowski, B., Jeon, J.B., Neugebauer, J.**, 2017. Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory alloys, *Acta Materialia*, **123**, 90-101.
- [58] **Frenkel D., Smit B.**, 2002, *Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications*, Academic Press, USA.
- [59] **Adersen H.C.**, 1980. Molecular Dynamics at constant pressure and/or temperature, *J. Chem. Phys.*, **72**, 2384-2393.
- [60] **Martyna G.J., Tobias D.J., Klein M.L.**, 1994. Constant-Pressure Molecular Dynamics Algorithms., *J. Chem. Phys.*, **101**, 4177-4189.
- [61] **Daw, S.M., Baskes, M.I.**, 1984. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals, *Physical Review B*, **29**, 6443- 6453.
- [62] **Finnis, M.W. and Sinclair, J.E.**, 1984. A Simple empirical N-body potential for transition metals, *Philos. Mag., A*, **50(1)**, 45-55.
- [63] **Johnson, R.A.**, 1988. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals, *Phys. Rev. B*, **37**, 3924
- [64] **Voter, A.F. and Chen, S.P.**, 1987. Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni₃Al, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Eds.: Siegel, R. W., Weertman, J. R., and Sinclair, R., **MRS-82**, 175-180.
- [65] **Sutton, A.P., Chen, J.**, 1990. Long-range Finnis-Sinclair potentials, *Philos. Mag. Lett.*, **61**, 139-146.
- [66] **Mishin, Y., Mehl, M. J., Papaconstantopoulos, D. A., Voter, A. F., Kress, J. D.**, 2001. Structural stability and lattice defects in copper: *Ab initio*, tight-binding, and embedded-atom calculations, *Physical Rev. B*, **63**, 224106.
- [67] <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>, 4 Mayıs, 2017.
- [68] http://www.nvidia.com/object/cuda_home_new.html, 4 Mayıs 2017.
- [69] <http://www.grid.org.tr/>, 4 Mayıs 2017.
- [70] <http://www.ks.uiuc.edu/Research/VMD/>, 4 Mayıs 2017.
- [71] **Faken D., Jónsson H.**, 1994. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics, *Computational Materials Science*, **2(2)**, 279-286.
- [72] **Toth, C.D., O'Rourke, J., Goodman, J.E.**, 2004. *Handbook of Discrete and Computational Geometry*, Second Edition, CRC Press, USA.
- [73] **Sack, J.R., Urrutia, J.**, *Handbook of Computational Geometry*, Elsevier, 2000, Hollanda.
- [74] **Kazanc S., Ozgen, S.**, 2008. Thermal and pressure-induced martensitic phase transformations in a Ni-Al alloy modelled by Sutton-Chen embedded atom metod, *Molecular Simulation*, **34(3)**, 251-257.
- [75] **Planes, A., Romero, R., Ahlers, M.**, 1990. The martensitic transition temperature in ternary Cu-Zn-Al alloys. Influence of the L₂₁ structure, *Acta Metall. Mater.*, **38**, 757.

- [76] **Pelegrina, J.L., Ahlers, M.**, 1992. The martensitic phases and their stability in Cu-Zn and Cu-Zn-Al alloys. I: The transformation between the high temperature β phase and the 18 R martensite, *Acta Metall. Mater.*, 40, 3205.
- [77] **Polak E.**, *Computational Methods in Optimization: A Unified Approach*, Academic Press, 1971, USA.
- [78] **Yamakov, V., Wolf, D., Phillpot, S.R., Mukherjee, A.K., Gleiter, H.**, 2004. Derformation-mechanism map for nanocrystalline metals by molecular-dynamics simulation, *Nature Materials*, 3, 43-47.
- [79] **Haasan, P.**, *Physical Metallurgy*, Second Edition, Cambridge University Press, 1986, USA.
- [80] **La Roca, P., Medina, J., Sobrero, C.E., Avalos, M., Malarria, J.A., Baruj, A., Sade, M.** 2015. Effects of B2 nanoprecipitates on the phase stability and pseudoelastic behavior of Fe-Mn-Al-Ni shape memory alloys, *Matec Web of Conferences* 33, 04005.
- [81] **Schiotz, J., Di Tolla, F., Jacobsen K.W.**, 1998. Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes, *Nature*, 391, 561-563.
- [82] **Siegel R.W.**, 1994. *Characterization of Nanoparticles and Nanophase Materials*, *Earth Science Frontiers*, 1-15.

ÖZGEÇMİŞ

Oğuzhan Orhan

Kişisel Bilgiler

Doğum Tarihi: 25.10.1991

Doğum Yeri: Elazığ

Uyruğu: T.C.

Medeni Hali: Bekar

Eğitim Bilgiler

Lise: Hıdır Sever Lisesi – Elazığ (2006-2009)

Lisans: Fırat Üniversitesi Fizik Bölümü (2009-2013)

Projeler

- 1) TÜBİTAK 4004, Elazığ Bilim Merkezi Robot Okulu Projesi, Öğitmen, 2017.
- 2) TÜBİTAK 4007, Elazığ Bilim Merkezi Bilim Şenliği Projesi, Öğitmen 2016.
- 3) Fırat Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü tarafından desteklenen FF.16.28 numaralı proje, Araştırmacı, 2016.

Bildiriler ve Kongreler

- 1) Ulusal Fizik Öğrencileri Konferansı 6 (UFOK-6), Sözlü sunum, *Entropi*, 2010.
- 2) Fizik Günleri 11, Sözlü sunum, *Spintronik*, 2011.
- 3) 20. İstatistik Fizik Günleri, Dinleyici, 2013.