



**MAGNEZYUM VE MAGNEZYUM
ALAŞIMLARINDA İŞ FONKSİYONU
İSTİF HATA ENERJİSİ
İLKİŞKİSİ**

Doktora Tezi

YİĞİT TÜRE

Eskişehir, 2022

**MAGNEZYUM VE MAGNEZYUM ALAŞIMLARINDA İŞ FONKSİYONU
İSTİF HATA ENERJİSİ İLKİŞKİSİ**

YİĞİT TÜRE

DOKTORA TEZİ

Malzeme Bilimi ve Mühendisliği A.B.D.

Danışman: Prof. Dr. Servet TURAN

İkinci Danışman: Prof. Dr. Ali Arslan KAYA

Eskişehir

Eskişehir Teknik Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Haziran, 2022

Bu tez çalışması BAP Komisyonu tarafından kabul edilen 20DRP059 no.lu proje kapsamında desteklenmiştir.

15/06/2022

DANIřMAN ONAYI

Daniřmanlıęını yrttęm Doktora ęrencisi Yięit TRE, Magnezyum ve Magnezyum Alařımlarında İř Fonksiyonu İstif Hata Enerjisi İliřkisi bařlıklı tez alıřmasını tamamlamıřtır. Hazırlamıř olduęu tez tarafımca incelenmiř ve ęrencinin tez savunma sınavına alınması bilimsel ve etik aıdan uygun grlmřtır.

Tez Daniřmanı

Prof. Dr. Servet TURAN

ÖZET

MAGNEZYUM VE MAGNEZYUM ALAŞIMLARINDA İŞ FONKSİYONU İSTİF HATA ENERJİSİ İLİŞKİSİ

Yiğit TÜRE

Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Anabilim Dalı

Eskişehir Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Haziran 2022

Danışman: Servet TURAN

İkinci Danışman: Ali Arslan KAYA

Bu tez çalışmasında, Mg-Ca, Mg-Sr ve Mg-Ba ikili alaşımları üzerinden, periyodik tablonun 2A grubu elementlerinin oluşturduğu seyreltik katı çözeltilerde magnezyum (Mg) ile elektronik etkileşimlerinin irdelenmesi amaçlanmıştır. Söz konusu inceleme, atomlar arası bağ kuvvetinden, yani elektronik yapıdan, direkt olarak etkilenen iş fonksiyonu (Work Function) ölçümlerine ilaveten nanoindentasyon ölçümleri ve literatüre dayalı “İstif Hatası Enerjisi” (İHE) değerleri kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Çalışmanın bütünlüğü içerisinde, saf Mg kristaller ve kullanılan ikili magnezyum alaşımlarının mikroyapıları da karakterize edilmiş ve gerektiği yerlerde TEM ve SEM-EDS çalışmaları gerçekleştirilmiştir. Literatürden alınan İHE değerleri kuantum esaslı ‘First Principles’ hesaplarına dayalıdır. Çok önemli olan bu hesaplamalı değerlerin, pratik deneysel yöntemlerin sonuçlarıyla en azından kalitatif korelasyonunun yapılması önemlidir. Çünkü söz konusu hesaplama yöntemleri sıfır Kelvin derece üzerinden yapılmakta ve daha pek çok kabulleri içeren basit ve az sayıda atom ve tek bir farklı atom ihtiva eden atomik modeller için gerçekleştirilmektedir. Çoklu alaşım sistemlerine geçilmesi durumunda ise henüz kuantum hesapları yapılamamaktadır. Bu durum, ikili ve seyreltik alaşım sistemlerinden çoklu alaşım sistemlerine geçişte bir engel teşkil etmektedir. Oysaki, burada sunulan çalışmada olduğu gibi, pratik deneysel ölçüm teknikleri, şayet hesaplamalı sonuçlar ile kalitatif açıdan korele edilebilirlerse, ikili sistemlerden başlayarak sırasıyla üçlü ve daha fazla elementli sistemlerin elektronik yapı anlamında irdelenmeleri mümkün olabilecektir. Bu perspektif ile başlayan çalışmamız, bu tür bir kalitatif korelasyonun mümkün olduğunu ortaya koymuştur. Nihayetinde İHE değerleri, mutlak değerler olarak ele alınmaktan ziyade, ancak kıyaslamalı değerlendirmelerde önem kazanmakta ve alaşımların davranışlarını en temel bazda, yani serbest elektron yoğunluğu dağılımına dayalı olarak açıklayabilmektedir. Böylelikle, çoklu alaşım sistemlerinin geliştirilmesi yönünde elektronik metalürji prensipleri kullanılabilir görülmektedir.

Anahtar Sözcükler: Magnezyum, Magnezyum alaşımları, İstif hatası enerjisi (İHE), KPFM, Nanoindentasyon

ABSTRACT

THE RELATIONSHIP OF WORK FUNCTION STACKING FAULT ENERGY IN MAGNESIUM AND MAGNESIUM ALLOYS

Yiğit TÜRE

Materials Science and Engineering Program

Eskişehir Technical University, Institute of Graduate Education, June 2022

Supervisor: Servet TURAN

Co-Supervisor: Ali Arslan KAYA

The aim of this thesis work was to investigate the electronic interactions of the Group 2A elements of the periodic table with Mg through the dilute solid solutions in the binary systems of Mg-Ca, Mg-Sr and Mg-Ba. This investigation was undertaken via ‘work Function’ measurements as a property directly affected by interatomic bond types, i.e. the electronic structure, as well as nanoindentation measurements, and also incorporating the Stacking Fault Energy (SFE) values present in the literature. For the completeness of the study, the microstructures of some pure magnesium crystals and the binary alloys have also been characterized, therefore when necessary TEM, SEM-EDS examinations were undertaken. The SFE values gathered from the literature are based on the computed ab initio (First Principles) results. It is important to, at least qualitatively, correlate those important calculated values with the results of some experimental measurement techniques. This is because those computational methods are based on zero Kelvin, and also incorporating a number of assumptions as well as simple atomic models that involves a limited number of atoms and a single foreign atom. When it comes to the systems of multi-atomic species the quantum calculations do not yet seem feasible. This, constitutes an impediment when going from dilute and binary systems to poly-atomic systems. Whereas, as asserted by this investigation, if the results of practical measurement techniques can be qualitatively correlated with those of the computational methods, it can be possible to evaluate the electronic structures in alloys, starting from binary systems, going to ternary and then poly-atomic systems. Our investigation, which started with the aforementioned perspective, has shown that such a qualitative correlation is possible. After all, the SFE values are not treated as absolute values but rather gain importance and become useful in comparative investigations when assessing the properties of alloys at a fundamental level, i.e., free electron density distributions. Therefore, it seems possible to use the principles of ‘electronic metallurgy’ in developing poly-atomic alloy systems.

Keywords: Magnesium, Magnesium alloys, Stacking fault energy (SFE), KPFM, Nanoindentation

TEŞEKKÜR

Bilgi birikimi ve tecrübeleriyle tez çalışmamda beni yönlendiren, ilgisini ve desteğini daima hissettiğim, her zaman sevgi ve saygı duyacağım değerli danışmanlarım Prof. Dr. Servet TURAN ve Prof. Dr. Ali Arslan KAYA'ya,

Tez süresince değerli fikir ve önerileriyle desteklerini esirgemeyen Prof. Dr. Ferhat KARA'ya ve Prof. Dr. Mehmet ERDOĞAN'a,

Tez konusu malzemeleri olan tek kristal magnezyum malzemenin tedarikini sağlayan Seoul National University, G. Kore' den Prof. Dr. K.S. Shin'e ve Magnezyum alaşımların tedarikini sağlayan Chongqing University, Çin'dan Prof. Dr. F.S. Pan ve Prof. Dr. J. Peng'e,

Başta Dr. Öğr. Üyesi Umut Savacı olmak üzere analiz süreçlerinde katkıda bulunan bütün Eskişehir Teknik Üniversitesi akademik ve teknik üniversite personeline,

KPFM analizlerinin gerçekleşmesinde sağladığı katkıdan dolayı Prof. Dr. Ahmet ORAL'a, TEM analizlerinin yapılmasında emeği geçen Prof. Dr. Mehmet Ali Gülgün'e ve Nanoindentasyon analizlerindeki desteklerinden dolayı Dr. Hüseyin AYDIN'a,

Hayatım boyunca ilgi, sevgi ve destekleriyle yanımda olan sevgili annem Melike TÜRE ve sevgili babam Cengiz TÜRE'ye,

Beni her zaman sevgi ve sabırla destekleyen sevgili eşim Özgün Duygu TÜRE'ye,

Sonsuz sevgi, saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Yiğit TÜRE

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Bu tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın hazırlık, veri toplama, analiz ve bilgilerin sunumu olmak üzere tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallara uygun davrandığımı; bu çalışma kapsamında elde edilen tüm veri ve bilgiler için kaynak gösterdiğimi ve bu kaynaklara kaynakçada yer verdiğimi; bu çalışmamın Eskişehir Teknik Üniversitesi tarafından kullanılan “bilimsel intihal tespit programı ile tarandığını ve hiçbir şekilde “intihal içermediğini” beyan ederim. Herhangi bir zamanda, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçları kabul ettiğimi bildiririm.

Yiğit TÜRE

İÇİNDEKİLER

Sayfa

BAŞLIK SAYFASI	i
JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI.....	Hata! Yer işareti tanımlanmamış.
DANIŞMAN ONAYI	ii
ÖZET	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR	v
ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ.....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
TABLolar DİZİNİ	xiv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xv
1. GİRİŞ	1
1.1. Magnezyum ve Özellikleri	1
1.2. Magnezyumda Kayma ve İkizlenme Davranışı.....	4
1.3. Magnezyum ve Kritik Kayma Gerilmeleri (CRSS)	7
1.4. İstif Hatası Enerjisi ve Magnezyum	8
1.5. Magnezyumda Deformasyon Anizotropisi (Deformation Texture)	14
2. ELASTİSİTE MODÜLÜ-SÖNÜMLEME KAVRAMI VE RFDA (RESONANCE FREQUENCY DAMPING ANALYSIS) ÖLÇÜMÜ.....	16
3. İŞ FONKSİYONU VE KELVİN PROB KUVVET MİKROSKOBU (KPFM) ..	21
3.1. Miedema Modeli.....	21
3.2. Kısa Mesafe Düzen (Short Range Order-SRO).....	26
3.3. İş Fonksiyonu Kavramı ve Ölçümü.....	28
4. NANOİNDENTASYON	38
5. MALZEME VE METOTLAR	42

5.1. Malzemeler.....	42
5.2. Numune Hazırlama	42
5.2.2. Numunelerin TEM analiz hazırlığı.....	43
5.2.3. Saf magnezyum numunelerin KPFM analizine hazırlığı.....	43
5.2.4. Mg alaşımların optik mikroskop ve SEM numune hazırlığı	45
5.2.5. Alaşımlı numunelerin KPFM analizine hazırlanması.....	46
5.3. Analizler	46
5.3.1 Alaşımların optik mikroskop ve SEM analizleri	46
5.3.2. RFDA analizleri	47
5.3.3. TEM analizleri	48
5.3.4. KPFM analizleri	48
5.3.5. Nanoindentasyon analizleri	49
6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	51
6.1. Numunelerin Optik Mikroskop ve SEM Analizleri	51
6.2. Saf Mg Numunenin Spektroskopi Analizi	55
6.3. Farklı Kristalografik Yönelime Sahip Saf Mg Tek Kristal Numunelerin TEM Analizi	55
6.4. Saf Mg Numunelerin KPFM Analizi.....	57
6.5. Alaşımlı Numunelerin KPFM Analizleri ve İş Fonksiyonunun İstif Hatası Enerjisi İle İlişkilendirilmesi.....	63
6.6. Alaşımlı Numunelerin KPFM Ölçüm Sonuçlarının İHE İle Korelasyonu ...	65
6.7. Alaşımlı Numunelerin Nanoindentasyon Analizleri ve Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi	69
6.7.1. Mg-Sr alaşımına ait nanoindentasyon sonuçları	69
6.7.2. Mg-Ca alaşımına ait nanoindentasyon sonuçları	71
6.7.3. Mg-Ba alaşımına ait nanoindentasyon sonuçları.....	74

	<u>Sayfa</u>
6.7.4. Nanoindentasyon test sonuçlarının değerlendirilmesi	76
6.9. Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr Alaşımlarının RFDA Analizleri.....	79
7. GENEL SONUÇLAR.....	82
ÖZGEÇMİŞ	95



ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1. 1. Magnezyuma ait HSP kristal yapı [14]	3
Şekil 1. 2. Magnezyuma ait temel kayma düzlem ve yönleri [17]	4
Şekil 1. 3. (a) Bir dislokasyonun kısmi dislokasyonlarına ayrılmış haline ait bir illüstrasyon, (b)YMK yapıda $1/2[110]$ Burger vektörüne sahip kenar dislokasyonunun b_1 ve b_2 Burger vektörlerine sahip kısmi dislokasyonlarına ayrılması	8
Şekil 2. 1. Dikdörtgen çubukların (a) eğilme ve (b) burulma titreşim modu örneği [61]	18
Şekil 2. 2. Tipik bir RFDA cihaz bileşen gösterimi [61].....	18
Şekil 3. 1. Mg alaşımları için Miedema şeması, Denklem 3.1’de $R=O$ varsayılarak oluşturulmuştur [66,72].....	25
Şekil 3. 2. A-B alaşım yapısı içerisinde atomların olası konumları	26
Şekil 3. 3. İş fonksiyonu değerine yüzey enerjisinin etkisinin grafiksel gösterimi [84]	29
Şekil 3. 4. AFM uç-numune etkileşiminin görsel ifadesi [85]	30
Şekil 3. 5. Temassız AFM çalışma modunun şematik gösterimi: (a) Genlik modülasyon modu ve (b) Frekans modülasyon modu [86]	30
Şekil 3. 6. Üç durum için numunenin ve AFM ucunun elektronik enerji seviyeleri: (a) uç ve numune elektriksel temas olmadan d mesafesi ile ayrılır, (b) uç ve numune elektriksel temas halindedir ve (c) harici öngerilme (V_{dc}) CPD’yi ve dolayısıyla uç-örnek elektrik kuvvetini geçersiz kılmak için uç ve numune arasına uygulanır. E , vakum enerji seviyesidir. E_{fs} ve E_{ft} , sırasıyla numunenin ve ucun Fermi enerji seviyeleridir [86]	32
Şekil 3. 7. Nikel konsantrasyonu ile iş fonksiyonu arasındaki ilişki [68]	37
Şekil 3. 8. İş fonksiyonun elastisite modülü ve sertlik (HV) ile olan ilişkisi [68]	37
Şekil 4. 1. Nanoindentasyon deney sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulmuş tipik bir sonuç grafiği	38
Şekil 4. 2. İndent yüzey etkileşiminin gösterimi (h_{max} : toplam penetrasyon derinliği, h_r :plastik deformasyon bölgesi, h_e : temas bölgesinde yüzey yerdeğişimi) ...	39

Şekil 4. 3. Farklı kristalografik oryantasyona sahip üç tanenin oda sıcaklığında ve 300 °C’de nanoindentasyon analizi sonucu EBSD analizi.....	41
Şekil 5. 1. Saf Mg numunesine ait görsel	42
Şekil 5. 2. RFDA analizi için kullanılacak olan dikdörtgen şeklinde numune için olması gerek boyut koşulları	43
Şekil 5. 3. İyon inceltme cihazına ait görsel	44
Şekil 5. 4. İyon inceltme cihazı ile hazırlanan saf Mg numunelerin desikatör içerisinde muhafazasına ilişkin görüntü	44
Şekil 5. 5. Numunelerin parlatma aşamasında kullanılan cihaza ait görsel	45
Şekil 5. 6. Tez kapsamında kullanılan a) optik mikroskop ve b) SEM’e ait görseller ...	47
Şekil 5. 7. RFDA cihazına ait görsel	47
Şekil 5. 8. ESTÜ Mal. Bil. Ve Müh. Bölümünde kullanılan TEM	48
Şekil 5. 9. KPFM analizlerinin yapıldığı cihaza ait görseller. a) hpAFM cihazına ait genel görünüm, b) Mg-Ba numunesinin yerleştirilmiş haldeki görünümü. ...	49
Şekil 5. 10. Nanoindentasyon testlerinde kullanılan Bruker-Hysitron TI 950 Triboindenter cihazına ait görsel.	50
Şekil 5. 11. Nanoindentasyon testlerinde kullanılan Berkovich uca ait görsel ve teknik özelliklerine ait görsel.	50
Şekil 6. 1. Çalışmada kullanılan alaşımlara ait optik mikroskop görüntüleri a) Mg-Sr, b) Mg-Ba ve c) Mg-Ca	51
Şekil 6. 2. (a)Mg-Ba, (b)Mg-Ca ve (c)Mg-Sr’a ait faz diyagramları [97,98].....	52
Şekil 6. 3. Mg-Sr alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları	53
Şekil 6. 4. Mg-Ba alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları	53
Şekil 6. 5. Mg-Ca alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları	54
Şekil 6. 6. Saf Mg numunenin farklı bölgelerinden alınmış SEM-In lens görüntüleri...	54
Şekil 6. 7. Saf Mg numunelere (1-6) ait seçilmiş alan difraksiyon desenleri.....	56
Şekil 6. 8. Saf Mg tek kristal numunelere ait KPFM ile ölçüm sonucunda elde edilen iş fonksiyonu haritası ve iş fonksiyonu sonuç grafiği (a) Numune 1, (b) Numune 2, (c) Numune 3, (d) Numune 5 ve (e) Numune 6.	58

Şekil 6. 9. Numune 1'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen iş fonksiyonu değişim grafiği (a-c iş fonksiyonu haritası, b-d iş fonksiyonu ölçüm grafiği).....	60
Şekil 6. 10. Numune 2'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen iş fonksiyonu değişim grafiği (a-c iş fonksiyonu haritası, b-d iş fonksiyonu ölçüm grafiği).....	61
Şekil 6. 11. Numune 3'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen iş fonksiyonu değişim grafiği (a-c iş fonksiyonu haritası, b-d iş fonksiyonu ölçüm grafiği).....	61
Şekil 6. 12. Mg-Ba alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d).....	64
Şekil 6. 13. Mg-Ca alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d).....	64
Şekil 6. 14. Mg-Sr alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d).....	65
Şekil 6. 15. %11-%25 konsantrasyona bağlı alaşım elementlerinin SFE değişimi üzerindeki yüzdece etkisi ile iş fonksiyonu değişimi arasındaki ilişki [110].....	67
Şekil 6. 16. %11-%25 konsantrasyona bağlı Ba, Ca ve Sr elementlerinin İHE üzerinde etkilerinin yüzdece değişimi ile yapılan KPFM ölçüm sonuçlarını bir arada gösteren grafik	67
Şekil 6. 17. Mg- Sr alaşımında nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı bölgenin görsel	69
Şekil 6. 18. Mg-Sr alaşımının nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği	70
Şekil 6. 19. Mg-Ca numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı α -Mg bölgesinin görseli	71
Şekil 6. 20. Mg-Ca alaşımının α -Mg bölgesinin nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği	72
Şekil 6. 21. Mg-Ca numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı ötektik bölgesinin görseli	73

Şekil 6. 22. Mg-Ca alaşımının ötektik bölgenin nanoindentasyon ölçüm soncunda elde edilen yük-derinlik grafiği	73
Şekil 6. 23. Mg-Ba numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı α -Mg ve ötektik bölgenin görseli (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)	75
Şekil 6. 24. Mg-Ba alaşımında α -Mg ve ötektik bölgeden nanoindentasyon ölçüm soncunda elde edilen yük-derinlik grafiği (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)	75



TABLÖLAR DİZİNİ

Sayfa

Tablo 1. 1. Alaşım elementlerinin latis parametresi ve c/a oranına etkileri [15]	3
Tablo 3. 1. İş fonksiyonu ölçümü yapabilen yöntemlerin karşılaştırılmasına ait veriler[86]	36
Tablo 6. 1. Saf Mg numuneye ait spektroskopi analiz sonucu.....	55
Tablo 6. 2. Saf Mg numunelerin TEM SAED metoduyla belirlenen yüzey normalleri (kristalografik yönüne zone eksenleri).....	56
Tablo 6. 3. Saf Mg numunelerin kristalografik yönlerine bağlı iş fonksiyonu değerleri.....	59
Tablo 6. 4. KPFM ölçümü ile matris ve matris-Mg dendrit bölgelerinden elde edilen iş fonksiyonu değerleri	65
Tablo 6. 5. Mg, Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımları için hesaplanan SFE değerleri (konsantrasyon: %11-25) [110]	66
Tablo 6. 6. Tablo 6.5'deki %11 ve %25 alaşım elementleri için Mg'nin İHE'sindeki yüzdece değişim.....	66
Tablo 6. 7. Mg-Sr alaşımının nanoindentasyon test sonuçları	70
Tablo 6. 8. Mg-Ca alaşımında α -Mg bölgesine ait nanoindentasyon test sonuçları	72
Tablo 6. 9. Mg-Ca alaşımında ötektik bölgeye ait nanoindentasyon test sonuçları.....	74
Tablo 6. 10. Mg-Ba alaşımında α -Mg ve ötektik bölgeye ait nanoindentasyon test sonuçları (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)	76
Tablo 6. 11. Nanoindentasyon analizlerinden alınan verilerin alaşımlar ve bölgeler açısından ortalama değerleri	77
Tablo 6. 12. RFDA analizi yapılan Mg alaşımlarının fiziksel özellikleri ile elde edilen elastisite modülü ve damping değerleri	80

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

γ	: İstif Hatası Enerjisi
ν	: Poission Oranı
ϕ	: Yüzey Enerjisi
ω	: Frekans
Φ	: İş Fonksiyonu
ΔH	: Oluşum Entalpisi
Δn	: İki Atomik Hücre Sınırındaki Elektron Yoğunluğu Farkı
Q^{-1}	: İç Sürtünme Parametresi
AFM	: Atomik Kuvvet Mikroskobu
CRSS	: Kritik Çözünmüş Kayma Stresi
FM	: Frekans Modülasyonu
GM	: Genlik Modülasyonu
HAADF	: Yüksek Açılı Açısal Karanlık Alan
HSP	: Hekzagonal Sıkı Paket
İF	: İş Fonksiyonu
İH	: İstif Hatası
İHE	: İstif Hatası Enerjisi
KPFM	: Kelvin Prob Kuvvet Mikroskobu
LPSO	: Uzun Periyotlu İstif Düzeni
SRO	: Kısa Mesafe Düzen
SEM	: Taramalı Elektron Mikroskobu
STEM	: Taramalı-Geçirimli Elektron Mikroskobu

1. GİRİŞ

1.1. Magnezyum ve Özellikleri

Periyodik tabloda 12 atom numarası ile yer alan magnezyum (Mg) elementi en hafif yapısal metal ve alaşım grubunu oluşturur. Mg ilk olarak 1808 yılında magnezyum oksit (MgO) ve civa oksit (HgO) karışımının elektrolizi yoluyla İngiliz kimyager Sir Humphry Davy tarafından izole edilerek elde edilmiştir. Günümüzde ise Mg çoğunlukla deniz suyundan elde edilmekle birlikte (1 km³ deniz suyunda yaklaşık olarak 1,3 milyar kilogram Mg bulunmaktadır) dolomit (CaCO₃.MgCO₃) ve karnalit (KCl.MgCl₂.6H₂O) bileşiklerinden de üretim mevcuttur. Amerika Birleşik Devletleri Jeoloji Araştırmaları Kurumu'na göre evrende en fazla bulunan sekizinci ve yer kabuğunda ise yedinci elementtir. Mg'yi ilginç kılan ve rekabet içerisinde olduğu alüminyuma göre avantaj sağlayan özelliklerden biri Mg'nin hem hidrosferden hem de litosferden çıkarılabilen benzersiz bir yapısal element olmasıdır. Ancak sahip olduğu elektron donör yapısı yüzünden, magnezyum doğada hiçbir zaman elementel formda bulunmamaktadır [1,2].

Magnezyum sahip olduğu 1.738 g/cm³ özkütlesi ile kullanım alanı olarak ortak sayılabilecek alüminyumdan %30 ve çelikten %70 daha düşüktür. Sahip olduğu yüksek spesifik mukavemeti ve mühendislik uygulamalarında vadettiği ağırlık tasarrufu sebebiyle üzerinde halen yoğun araştırmaların yapıldığı bir metalik malzeme grubunu oluşturur. Uluslararası Enerji Ajansı (IEA), taşımacılık sektörünün yıllık yanma gazları emisyonlarının dörtte birinden sorumlu olduğunu bildirmektedir. Örneğin, Birleşik Krallık 'ta, ulaşım emisyonları 1990'da %21'den 2013 yılında %25'e yükselmiştir. Bu emisyon miktarının %94'ü sadece karayolu taşımacılığı tarafından üretilmektedir [3]. Araçların yakıt tüketiminin yaklaşık %60'ı araç ağırlığını taşımaya harcanmaktadır. Bu açıdan, tüm taşımacılık sektöründe yakıt tüketiminin azaltılmasının, büyük ölçüde araç ağırlıklarında tasarruf yapılmasına bağlı olduğu görülmektedir. Özetle söylemek gerekirse, Mg ve alaşımlarının kullanımının artması ulaşım araçları açısından ekolojik dengelerin korunmasında büyük bir pozitif etkiye sahip olacaktır.

Endüstriyel uygulamalarda, özkütle bakımından daha ağır olmalarına rağmen alüminyum ve çelik, Mg'ye göre daha fazla kullanılmaktadır. Mg ve alaşımlarının kullanım alanlarının bu metallere kıyasla daha yaygın olmamasının sebepleri Mg'nin fiyatı ve geliştirilmesi gereken mühendislik özelliklerinin olmasıdır. Kullanım alanının artması için mevcut özelliklerinin kullanım alanına uygun şekilde iyileştirilmesi ve

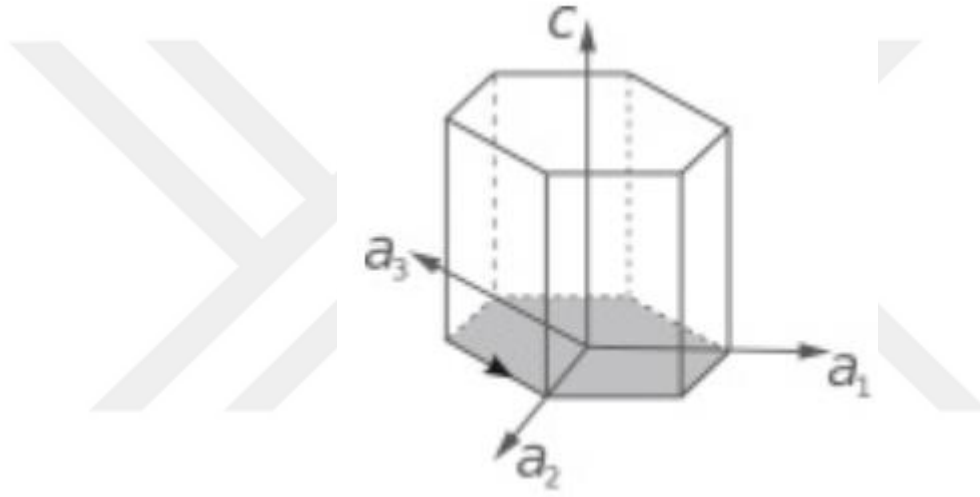
geliştirilmesi gerekmektedir. Bunun gerçekleştiği durumda halen geliştirilmiş pek çok Mg alaşımı, endüstriyel kullanıma zaten sahiptir. Kullanım oranının artırması için temel olarak oda sıcaklığında göstermiş olduğu düşük şekillendirilebilirlik kabiliyetinin, korozyon direncinin, çekme-basma asimetrisinin ve yüksek olan deformasyon tekstürü oluşturma ve bu tekstürün yeniden kristalleşme işlemi ile giderilememe eğiliminin değiştirilmesi, diğer bir deyişle, alaşımlama, termomekanik prosesleme veya bunların her ikisinin bir arada kullanılarak geliştirilmesi gerekmektedir.

Mg tüm metaller içinde biyo-uyumluluğu en yüksek metaldir. Bu özelliği nedeniyle tıbbi bir malzeme olarak da dikkati çekmekte, ve özellikle biyo-çözünür implant malzemeye ihtiyaç olması durumlarında, ikinci bir cerrahi müdahale işlemini ortadan kaldırma nedeniyle halen kullanılmaktadır [4]. Bu uygulama alanı için de korozyon dayanımını, yani insan vücudunda çözünme sürelerini ihtiyaca göre belirlemek amacıyla, toksik etkiler yaratmayan Mg bazlı alaşım geliştirme çalışmaları sürmektedir.

Mg ve alaşımlarının yukarıda sıralanan geliştirilmesi zorunlu mühendislik özellikleri açısından iyileştirilmesinin birincil ve kaçınılmaz yolu alaşımlamadır. Literatür incelendiğinde Al, Ba, Ca, Ce, Cu, Fe, K, La, Li, Mn, Na, Nd, Pr, Si, Sn, Sr, Y, Zn, ve Zr elementleri bazında pek çok ikili sistem farklı alaşım bileşimleri bazında incelenmiştir [5–7]. Bu elementlerin ikili alaşım sistemleri incelendiğinde her bir elementin Mg'ye kazandırdığı özellikler çok daha net anlaşılmaktadır. Elbette ki alaşım elementlerinin her birinin etkileri farklıdır. Geline nokta daha zengin alaşım bileşimlerine yönelim söz konusudur. Elementel çeşitliliği daha yüksek Mg esaslı alaşımlar, alüminyum veya demir gibi, kendisine rakip diğer elementler bazındaki alaşımlara kıyasla çok ilginç örneklerle sahiptir. Bu sistemlerin bazıları yarı-kristalin (quasi-crystalline), veya “uzun periyotlu kısa mesafeli düzen” (Long Period Short-range Order- LPSO) fazlar içeren sistemlerdir [8–10].

Mg HSP (Hekzagonal Sıkı Paket) kristal sistemine sahiptir (Şekil 1.1). Mg'nin latıs parametreleri olarak $a=3.18 \text{ Å}$ ve $c=5.19 \text{ Å}$ 'dır. HSP yapılarda farklı düzlemler için CRSS (Critical Resolved Shear Stress) değerlerini değişebilmektedir. Fiziksel ve mekanik pek çok özellikler ile ilişkili olan Mg'nin $c/a=1.623$ oranı ise diğer HSP metallere kıyasla biraz daha büyüktür [8,9]. Mg, bu c/a oranı ile daha büyük bir birim hücre hacmine sahiptir. Mg ayrıca serbest elektron yoğunluğu dağılımı açısından diğer metallere kıyasla en homojen konfigürasyona sahip olması nedeniyle istif hatası enerjisi

(İHE) daha küçüktür [13]. Mg sahip olduğu bu c/a oranı ve İHE seviyeleri, diğer metalik sistemler için olduğu gibi, alaşım elementi ilavesi tipi ve miktarlarına bağlı olarak değişir. Tablo 1.1’de c/a oranının alaşım elementleri ile değişim eğilimi görülmektedir. Bu orandaki değişim sadece ilave edilen atom çapına bağlı olarak irdelenemez. İlave edilen alaşım elementinin ev sahibi Mg atomu ile yarattığı bağın yapısındaki değişimler, örneğin c veya a eksenleri yönünde oluşabilecek kovalent bağ komponentleri c/a oranında etkin değişimler yaratır. c/a oranındaki değişimler, esasen İHE değişimlerinden de bağımsız değildir. Nihayetinde İHE seviyesi, ilgili düzlem veya yön için oluşan bağ mukavemeti değişimi ile sıkı bir ilişki içindedir. İHE seviyesinin değişimine ileride değinilecektir.



Şekil 1. 1. Magnezyuma ait HSP kristal yapı [14]

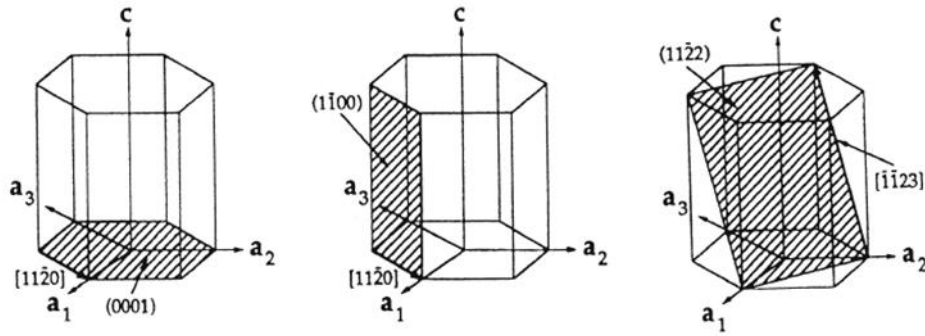
Tablo 1. 1. Alaşım elementlerinin latis parametresi ve c/a oranına etkileri [15]

Etki	Element
Mg'nin a parametresinde azalma	Au, Mn, Rh, Zr
Mg'nin a parametresinde artma	As, Ba, Ce, La, Ni, Pd
c/a oranında azalma	Au, Ce, Pd
c/a oranında artma	Ba, Ir, Pt, Rh, Ti, Zr
Latis parametrelerine etki yok	Ca, Cu, Sb, Si, Te, W

1.2. Magnezyumda Kayma ve İkizlenme Davranışı

Mg, plastik deformasyon açısından von Mises kriterine uymaz. Mg için, HSP kristalin bazal kayma düzlemleri yalnızca 2 bağımsız kayma sistemi sunar ve von Mises kriterine göre Mg, plastik deformasyon göstermemesi gereken bir metaldir. Ancak Mg metalinde sıkı paket bazal düzlemlerdeki kayma ile gerekli CRSS değeri açısından hemen hemen eş zamanlı olarak ikizlenme (twinning) de gerçekleşir. Böylelikle kriterin zorunlu kıldığı oda sıcaklığında 5 farklı kayma sistemine sahip olma kuralı gerekli olmaktan çıkar [15,16]. Mg metali için 225 °C'nin üzerine çıkıldığında, prizmatik ve piramidal düzlemlerde de dislokasyon hareketi görülür.

HSP metallerde mevcut kayma sistemleri Şekil 1.2'de gösterilmiştir. Polikristalin Mg ve alaşımlarının deformasyon kapasitelerinin artırılması, prizmatik ve piramidal kayma sistemlerinin, bazal düzlemlerde kaymanın ve buna paralel olarak ikizlenmenin gerçekleştiği gerilme seviyelerinde aktif hale gelmelerine bağlıdır. Bu ise CRSS değerlerinin değiştirilmesi, diğer bir deyişle İHE değerlerinin alaşımlama ile değiştirilmesi gerektiği anlamını taşır.



Şekil 1. 2. Magnezyuma ait temel kayma düzlem ve yönleri [17]

Kayma ile eş zamanlı ikizlenme aktivasyonu, Mg tek kristalinde bir anomali meydana getirir. Mg, çekme ve basma modlarında akma dayanımı asimetrisi gösterir, çekme akma dayanımı, basmadakinden çok daha yüksektir [18]. Hem oda sıcaklığında ikizlenme hem de akma asimetrisi, ikizlenmenin kutupsal yapısı ve farklı ikizlenme düzlemlerinin kritik kayma gerilimi (CRSS) değerleri ile ilgilidir [2].

Çekme (uzama) ikizlenmesi basitçe, bir Mg tek kristalini c eksenini boyunca uzatan, basma ikizlenmesi ise kısaltan bir ikizlenme hareketidir. İki ikizlenme modu için kullanılan terminolojinin biraz yanıltıcı olabileceğine dikkat edilmelidir. Çekme (uzama) ikizlenmesi olarak bilinen olgunun düşük CRSS değeri ve iki ikizlenme modu arasındaki CRSS farkı ve farklı Schmid faktörleri (m) [19–21], çekme ikizlenmesinin neden baskın olduğunu anlamamızı sağlar [18]. Tek bir kristalin anizotropisi, tekstür ile birleştiğinde, anizotropik polikristal bir malzemede kendini tekrar gösterir.

Mg’de iki tür ikiz tipi mevcuttur ve her ikisi de deformasyon sırasında gerçekleşebilir. Ancak CRSS değeri daha düşük olan çekme ikizlenmesi (extension twinning) daha sık gerçekleşir ve bu mekanizma ile oluşan twinler basma ikizlenmesine (compression twinning) göre daha geniş ikizlenme bölgeleri yaratır. Basma ikizlenmesi tipik olarak yaklaşık 1μ kalınlığında bölgeler olarak görülürler [2]. Mg’nin çekme-basma asimetrisi bu farklı iki ikizlenme nedeniyle ortaya çıkar. Çekme ikiz bölgesi $86,3^\circ$, basma ikiz bölgesi ise 56° rotasyona sahip tanecik gibi davrandığı gözlemlenmiştir [22]. Matris içerisinde ikizlenme miktarı doygun seviyeye gelince daha yüksek CRSS seviyeleri gerektiren kayma sistemleri (piramidal ve prizmatik) aktif hale gelmeye zorlanırlar. Bununla birlikte, plastik uyumsuzluğunun bir sonucu olarak, plastik deformasyon sırasında, tane sınırları civarında büyük gerilmeler birikir. Bu bölgelerde, tane içlerine göre daha erken bir aşamada bazal olmayan kayma sistemlerinin aktivasyonu olduğu görülmüştür [23–25]. Bu açıdan ikizlenme, kendi başına bir deformasyon mekanizması olduğu gibi aynı zamanda bazal düzlemlerin uygun yönlerde yeniden oryantasyona uğraması ile kayma sistemlerinin aktive olmasını ve plastik deformasyona katkıda bulunmasını sağlayan bir mekanizma olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu nokta da hem ikizlenme hem de (c+a) dislokasyonlarının varlığı (yani, piramidal kayma sistemindeki dislokasyonlar) yapılan çalışmalarda gösterilmiştir [17].

İkizlenme mekanizması, Mg’nin oda sıcaklığındaki deformasyon kapasitesini sağlar. İkizlerin, taneleri kristalografik sınırlarla (twin boundaries) bölmeleri ve böylelikle adeta tane küçültücü bir etki yapmaları nedeniyle mukavemet artırıcı bir rol oynarlar. Bunun yanı sıra deformasyonun erken aşamalarında ikizlenen bölgeyi, buradaki bazal düzlemler dışarıdan uygulanan gerilmeler altında kolayca kayma gösterecek şekilde yeniden yönlendirebilmesi sayesinde ilave bir deformasyon kapasitesi artışına da neden olabilirler [22].

Mg'nin deformasyon kapasitesinin artması, esasen bazal dislokasyonların piramidal düzlemlere çapraz kayması (cross slip) mekanizmasına da bağlıdır. Bu hareketleri yapabilecek olan dislokasyonlar ise dislokasyon çizgisi ve Burger vektörünün üst üste olduğu (paralel) vida tipinde (screw dislocations) olanlardır. Elektron mikroskobu çalışmaları, artan gerilmelerde vida dislokasyonlarının Mg'da çapraz kayabildiği rapor edilmiştir [26]. Vida dislokasyonlarının bazal düzlemden prizmatik düzlemlere çift çapraz kayması (double cross slip) da mümkündür. Ayrıca farklı sıcaklık ve gerilme kuvvetleri altında saf Mg kristalinin deformasyonu sırasında, bazal olmayan (piramidal) kayma sistemlerinde de dislokasyon hareketleri gözlemlenmiştir [27]. Çapraz kayma esasen deformasyon kabiliyetini artırırken, deformasyon sertleşmesi hızında bir düşüş yaratır [28]. Ayrıca, ikizlenme mekanizmaları tane boyutu büyüdükçe daha kolay hareketlenirler. Mg'de belirli bir tane boyutunun altına inildiğinde ise (yaklaşık 1 μ) [29,30] ikizlenme görülmez.

Mg'nin sahip olduğu anomalileri, yorulma davranışını anlaşılmasını daha da zor hale getirirken, ikizlenme ve ikizlenmenin geri dönmesi ile bu durum son derece karmaşık hale gelir [31]. Bunun bir sonucu olarak da stres ve gerinim kontrollü yorulma testlerinin ayrı ayrı yorumlanması gerekmektedir [32–34]. Belirli bir tane boyutu eşiğinin altında ikizlenme sona erdiğinden, yorulma üzerindeki bu tür yorumlar, malzemelerin ilk tekstürünün yanı sıra, tane boyutunun etkisini de dikkate alınmasını gerektirir [35].

Gharghoury, magnezyumdaki ikizlenmenin Schmid yasasına uyduğunu belirten ilk kişi olmuştur [36]. En yüksek Schmid faktörüne sahip mekanik deformasyon sistemleri, dışarıdan uygulanan gerilmelerden, açısız konumlarının bir sonucu olarak en fazla pay alırlar ve böylelikle öncelikli olarak aktifleşirler. Bu nedenle, deformasyon sistemlerinden biri, çok kristalli (polycrystalline) yığın içinde herhangi bir yerde etkinleştirilirse, aynı sistemlerin hepsinin malzemenin her tanesinde zorunlu olarak tetiklenmiş olması beklenemez. Yaygın olarak bazal olmayan kayma sistemlerinin yalnızca daha yüksek sıcaklıklarda etkinleştirildiğine inanılmasına rağmen, Obara ve arkadaşları [37], daha önceki bir çalışmada ikinci dereceden piramidal kaymanın bile oda sıcaklığından 500 °C'ye kadar çalıştığını ve 200 °C'ye kadar çok yüksek bir deformasyon sertleşmesi sağladığını ve vida dislokasyonlarının kenar tipine göre daha hareketli olduğunu göstermiştir. Bazal harici bu düzlemlerin, büyük Burger vektörü de bu düzlemlerdeki gözlemleri açıklayabilmektedir. Bazal ve bazal olmayan düzlemlerde

CRSS değerlerinin aynı şekilde değişmediği, sıcaklıklar 200 °C'nin üzerine çıktıkça aralarındaki farkın hızla azaldığı belirtilmektedir [1].

1.3. Magnezyum ve Kritik Kayma Gerilmeleri (CRSS)

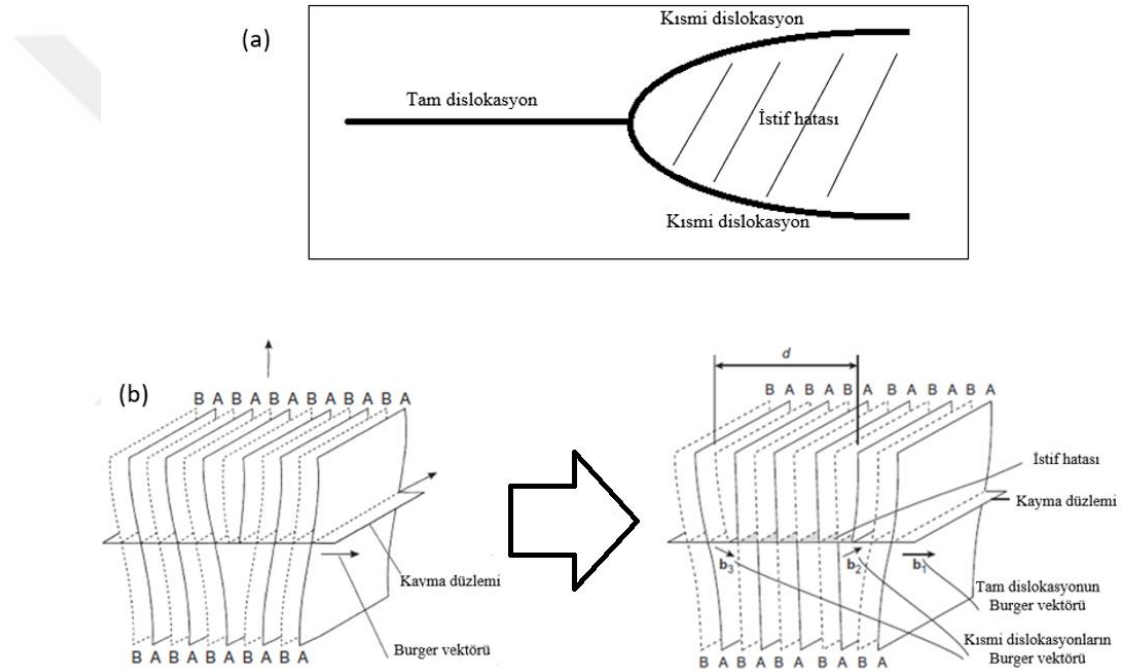
Mg'deki bazal kayma için kritik kayma gerilmesi (CRSS) yaklaşık 0,5 MPa'dır [38]. Prizmatik kayma sistemi için CRSS, artan sıcaklıkla çok güçlü bir şekilde azalır [39]. Sıcaklığın CRSS üzerine bu etkisi incelendiğinde, oda sıcaklığında prizmatik kayma sistemi için CRSS değeri, bazal kayma sistemindekinden yaklaşık 100 kat daha yüksekken, 300 °C'de ise bu değerin yalnızca 2-3 kat daha yüksek olduğu görülmüştür [40]. Oda sıcaklığında bazal kayma ile başlayan deformasyon, buna paralel olarak hemen hemen eş CRSS seviyelerinde ikizlenmenin de eş zamanlı başlaması ile devam eder. Başka bir deyişle, bazal kaymanın hızlı bir şekilde önce başladığını ve doyduğunu, böylece ikizlenmeye yol açtığı yapılan çalışmalar neticesinde belirlenmiştir [23–25,41].

Yapılan çalışmalar alaşım ilavelerinin getirdiği CRSS değerlerindeki ve/veya c/a oranındaki değişiklikleri ilişkilendirmektedir. Gerçekten de alaşımlama yoluyla, CRSS değerleri elektronik etkilerle [42] ve ayrıca Mg kristalinin c/a oranını geometrik olarak değiştirebildiğini göstermiştir [16,43–45]. Farklı düzlemler için CRSS'deki değişiklikler aynı ölçüde olmayıp [46], alaşım elementlerinden kaynaklanan değişikliklere bağlı olabilmektedir.

Ab initio hesaplamaları, CRSS değerlerini kristal geometrisinin basit bir sonucu olarak ele almaz. Alaşımlama etkileri, dislokasyon çekirdek yapısı olarak c/a oranını değiştirmenin ötesine geçer. Böylece dislokasyonların hareketliliğini, ayrışma kabiliyetini ve buna bağlı olarak farklı çözünen atomlarla çapraz kayma olasılığını büyük ölçüde değiştirir [47,48]. Örneğin, c/a oranındaki değişiklikler, çözünen türüne bağlı olarak özellikle Mg atomlarının atom boyutundaki değişikliklere bağlanabilir. Chen ve Boyle tarafından yapılan *ab initio* hesaplamaları, a ve c parametrelerinin ve c/a'nın Mg-Zn'de hafifçe azaldığını göstermiştir. Y'nin ise c/a oranını değiştirmeden a ve c'yi değiştirerek kafes hacminde bir miktar artış sağladığı bildirilmiştir [45].

1.4. İstif Hatası Enerjisi ve Magnezyum

İstif hatası enerjisi genel olarak γ (J/m²) ile gösterilir ve dislokasyon kavramı üzerinden anlaşılması gereklidir. Dislokasyonlar, malzemelerin temel kristal yapısının bozulmadan deforme olmasını sağlayan kristal hatalardır. Sayıları malzemenin deformasyon veya ısıtılma işlemi geçmesine bağlı olarak değişir veya sayı/birim alan veya sayı/birim hacim cinsinden ifade edilir. Dislokasyonların gerilme alanlarının büyüklüğü dislokasyonların doğumun ve kayma hareketinin ne kadar kolay veya zor olduğunu belirlemekle kalmaz, aynı zamanda deformasyon kapasitesini de belirler (Şekil 1.3 a-b).



Şekil 1. 3. (a) Bir dislokasyonun kısmi dislokasyonlarına ayrılmış haline ait bir illüstrasyon, (b) YMK yapıda 1/2[110] Burger vektörüne sahip kenar dislokasyonunun b1 ve b2 Burger vektörlerine sahip kısmi dislokasyonlarına ayrılması

Dislokasyon enerjisi iki nedenle oluşur; eksik olan atomik bağ ve dislokasyonu çevreleyen düzlemlerdeki elastik bükülme. Bu enerji:

$$E_{dist} = Gb^2 \quad (1.1)$$

ile ifade edilir ve burada G kayma modülünü, b ise Burger vektörünü temsil eder. Ancak dislokasyon enerjisi b büyürken sonsuza kadar artamaz. Esasen b, zaten efektif olarak kayma düzlemlerindeki atomlar arası mesafelerle ölçüldüğü için fiziken de sonsuz bir

büyüklik değildir. b değeri her kristal sisteminde belirli bir büyüklüğe ulaştığında dislokasyon iki kısmi dislokasyona ayrışır. Bu durumun gerçekleşebilmesi için iki kısmi dislokasyonun toplam enerjileri, onları doğuran süper dislokasyonun enerjisinden küçük olmalıdır (Denklem 1.2) [49,50].

$$Gb^2 > Gb_1^2 + Gb_2^2 \quad (1.2)$$

Bu parçalanma (dissociation) reaksiyonu gerçekleştiğinde iki kısmi dislokasyon arasında kalan bölge istif hatasını (İH) oluşturur (stacking fault). Böylelikle bir İH, ya bir ekstra düzlem parçası, ki bu durumda İH ‘ekstrinsic SF’ olarak tarif edilir veya kısmi olarak eksik bir düzlem, yani ‘intrinsic SF’, olarak görülmelidir. Tipi ne olursa olsun, bu kristal hatasının bulunduğu lokasyonda atomik düzlemlerin üst üste sıralanması (stacking) sadece kısmi bir düzlem olarak sınırlı bir bozulmaya uğramış demektir. Bir İH (SF) dikey geçilirken, kristalin buna uzak yerlerindeki düzlem dizilimine kıyasla atomlar arası bağ sayısı değişmezken, artık bağ uzunlukları, diğer bir deyişle, bağ açıları değişmiş ve bu nedenle lokal olarak serbest enerjisi artmış olur. İşte bu, istif hatası enerjisini (İHE – SFE) doğurur. W-S atomik modeli hatırlanacak olursa bir istif hatasında serbest elektron yoğunluğu da artık değişmiştir.

Kısmi dislokasyonların birbirlerinden ne mesafede oturacağı, yani İH alanının ne olacağı son derece önemlidir. Bunu belirleyecek gerilme dengesi ise klasik tarifile, iki kısmi dislokasyonun aynı gerilme alanlarına sahip olmaları nedeniyle birbirlerini itecekleri, ancak arada oluşan yeni ekstra düzlemin yüzey geriliminin (burasının bir yüzey olmaması nedeniyle tarife tam uymamakla beraber) ise kısmi dislokasyonların ayrılmasını, yani istif hatasının büyümesini engelleyici davranacağı üzerine kuruludur. Böylelikle zıt yönde kurulu bu iki gerilmenin eşitlendiği seviye, İH ne büyüklükte bir lokal ekstra düzlem yaratabileceğine karar vermiş olur. Sonuç olarak İHE küçük ise sistemin daha geniş bir kısmi dislokasyon ayrılması ile daha geniş alanlı bir İH yaratacağı ve bunun tersinin de doğru olacağı anlaşılır.

İH boyutu elbette ki malzemenin davranışı açısından çok önemlidir. Çünkü deformasyon hareketi esnasında bu iki kısmi dislokasyon birlikte hareket etmek zorundadır. Dolayısıyla hem üzerinde oturdukları kayma düzleminde dislokasyon sayısına doygunluğun seviyesini, hem de çapraz kaymanın olup olamayacağını

belirleyecek bir kavram haline gelir. Diğer bir deyişle, deformasyon kapasitesini belirleyicidir [50,51].

İH'ler bir başka açıdan da ilginçtirler. İH'nin oluştuğu yerde, HMK kristal sisteminde lokal bir SPH doğururken, SPH sistemde ise lokal bir HMK kristal oluşması sonucunu getirirler. Yani sayıları yeterince arttırılır ise bir HMK veya SPH kristal sistemine sahip iki farklı alaşıma, tamamen farklı bir mekanik davranış karakteristiği kazandırabilirler. Nitekim SPH magnezyum alaşımlarından birinde İH sayıları olağanüstü seviyelere çıktığı için deformasyon kapasitesi ve mukavemet artışını çok yüksek düzeylere çekmek mümkün olmuştur [52].

Elbette ki, bu kavram ancak W-S atomik modeli ve buna bağlı serbest elektron yoğunluğu dağılımı kavramı ile yeterince anlaşılabilir. Bohr atom modeli olarak bilinen yaklaşımda, bu kavramların anlaşılabilmesi çok güç, hatta bir anlamda imkansızdır. İHE, ifade edilmeye çalışıldığı üzere, esasen herhangi bir alaşım için tek bir rakamsal değerle belirtilemez. İH'nin kendisinin hangi düzlemde oluştuğu ve hatta diğer kristal hatalarına ne mesafede olduğu ve tabiki oluştuğu düzlemde yabancı atomların neler olduğu ve sayısı ile yakından ilişkilidir. Dolayısıyla da deneysel olarak tespiti çok zordur ve yöntemle bağlı olarak farklı sonuçlar görülebilmektedir. Ancak metaller kıyaslanırken kullanılan bir genel istif hatası enerjisi (Generalized Stacking Fault Energy) kavramı da mevcuttur. Bu kavramda baz alınan şey, esasen kristalin belirli bir düzlem üzerinden kesilerek, oluşan iki kısmı sadece bir atomik adım yer değiştirerek tekrar bir araya getirildiğinde arada yaratılmış olan ve hatalı dizilimi temsil eden (yani istif hatası) düzlemin üst ve alt düzlemlerle yeni oluşturduğu bağ uzunlukları (veya açıları da denilebilir) nedeniyle ortaya çıkan serbest enerji artışını temsilen kullanılacak “yüzey enerjisi” terimidir. Elbette ki bu gerçek bir İH olmadığı gibi söz konusu hayali düzlem de bir yüzey oluşturmadığı için bir yüzey enerjisi ile tarif edilemez. Ne var ki, bu “Generalized Stacking Fault Enrgy” terimi gerçek İHE ile paralel değişim göstereceği için esasen son derece yararlı bir kıyaslama parametresidir.

İHE, aslında bir alaşım sisteminin kristal hatalarını oluşturmaya ne kadar toleranslı olduğunun bir ölçüğü olarak görülmelidir. Bu açıdan değerlendirildiğinde, İHE herhangi bir alaşımda ikizlenme ve hatta martenzitik dönüşümün ne kadar kolay veya zor olacağının bir ölçüsü olarak da kullanılır (bkz. yeni nesil AHSS alaşımları).

Bu tez çalışması kapsamında kullanılan kavram olarak iş fonksiyonu (İF) da İHE ile sıkı sıkıya ilişkilidir. İHE, serbest elektron atom yoğunluğunda oluşan polaritelerin ne denli kuvvetli olduğuna bağlı olması ve aynı polarite düzeylerinin İF değerlerini de paralel şekilde etkileyecek olması nedeniyle İHE ve İF birlikte irdelenmelidir. Bu ilişki kalitatif olarak incelendiğinde, farklı alaşım elementlerinin artık çoklu sistemlerdeki etkileri pratik olarak tespit edilebilir. İHE seviyesinin kalitatif olarak ne yönde değiştiğinin anlaşılması, bu değer in mutlak değ er olarak tespitine eş önemde ve değerdedir. Bu tez çalışmasının iddiası da iş te bu kavram üzerine kuruludur.

Mg için önemli bir deformasyon mekanizması olan ikizlenme için İHE irdelemesi yapılmalıdır. Öncelikle, Mg'de iki tür baskın ikizlenme mekanizması olduğu bahsetmiştik. Bunlardan biri çekme ikizlenmesi (extension twinning), diğ eri ise basma ikizlenmesi (compression twinning) olarak adlandırılır [53]. Bu isimlendirmeler dışarıdan uygulanan gerilmenin ne olduğ una dayanan isimlendirmeler değildir. Sadece hekzagonal kristalin c-ekseni boyunca uzaması veya kısalması şeklinde değiş imler yaratmalarına bakılarak verilmiş adlandırmalardır. İlk oluş umları esnasında ikizlenme mekanizması polardır (kutuplu). Yani her iki ikiz tipi de tek yönlü hareket getirirler, ancak oluş umlarını müteakiben geri dönüş leri (detwinning) mümkündür. Esasen bu geri dönüş üm mekanizması, Mg'ye uygulanan gerilmenin tersine yönlendirilmesi ile ikizlenme deformasyonunu geri alıyor olması nedeniyle "pseudoelasticity" (sahte elastisite) [1] olarak bilinir. Ancak bu çevrim sonsuza kadar devam ettirilemez. İkizlenme hareketleri dislokasyonlardan bağımsız değildir ve her "twinning" "detwinning" esnasında mekanizmaya dahil olan dislokasyon sayıları giderek artar. Sonucunda "pseudoelasticity" son bulur ve ikizlerde çatlaklar baş gösterir.

Mg'de kolay ikizlenme deformasyon tekstürü özellikle vurgulanır. Ancak bu, Mg'de başka bir anormalliğ e yol açar. Diğ er sistemlerde tekstür büyük ölçüde azaltılabilir veya kaldırılabilirken, Mg ve alaşımlarının çoğ unda tekstür oluş tuktan sonra, yeniden kristalleş menin toparlanma aş amasından sonra bile kalıcı hale gelir. Toparlanma aş aması sırasında hücre oluş umu gerçekleş mez ve sonuç olarak, yeni oluş an "yeniden kristalize" taneler, zaten tekstürlü ebeveynlerden kaynaklanır, böylece yeniden kristalleştirme iş leminin tekstür kaldırma iş levinin boşa çıkarır. Bu özellik, bazal olmayan düzlemlerde dislokasyon popölasyonlarının olmaması ve ayrıca bazal düzlemin düşük İHE'si ile

yakından ilişkilidir, bu da iyileştirici önlemin Mg'deki farklı düzlemlerin İHE seviyeleri ile ilgili olduğunu gösterir [2].

Tüm diğer kristal hataları gibi ikizlerin ve ikizlenme mekanizmalarının da İHE ile kuvvetli bir ilişkisi vardır. İHE seviyesi yükseldikçe ikizlenme mekanizmaları güçleşir [54,55]. Bu nedenle, ikizlenme mekanizmaları açısından bakıldığında, ikiz düzlemleri üzerindeki İHE değerini yükselten alaşım elementlerinin mukavemeti artırıcı etkiye sahip olmaları beklenebilir.

Makroskopik açıdan deformasyon sertleşmesi davranışı, iki temel etkinin toplamının sonucudur. Bunlar, dislokasyonların kayma düzlemlerinde birikmesi ve dislokasyonların yarattığı gerilme (veya elastik deformasyon) (stress or strain field) alanlarında çapraz kayma hareketleri ile gerçekleşen azalmalardır. Dislokasyonların birikmesi süreci hem dislokasyon-dislokasyon etkileşimleri, yani aynı kayma düzlemi üzerindeki dislokasyon ormanı (dislocation forest), hem de çökelti ve tane sınırları gibi engeller nedeniyle gerçekleşir. Bu süreçte dislokasyonların çekirdek boyutu (core size) boyutu çok önemli bir parametre olarak karşımıza çıkar. Bu boyut ise en temel olarak İHE ile ilişkilidir. İHE azaldıkça “core size” ve buna bağlı olarak dislokasyon etrafındaki gerilme alanı (strain field) (aynı kavram “stress field” olarak da adlandırılabilir) artar. Sonuç olarak kayma düzleminde dislokasyonlara doygunluk, yani deformasyon sertleşmesi daha çabuk gerçekleşir ve çapraz kayma deformasyonunun daha erken aşamalarında tetiklenebilir. Diğer yandan, çapraz kayma hareketi ise İHE değerinin çok düşmesi durumunda dislokasyonların “kısmi dislokasyonlara” ayrışması (dissociation into partial dislocations) nedeniyle güçleşecektir. Bu durumda kristal yapıda İH’ları oluşacaktır. İH’lar, esasen kısmi dislokasyonlar arasındaki düzlem parçasıdır. Mg, İHE’si düşük bir metaldir ve alaşım elementleri ilavesi şayet bazal düzlemdeki İHE’sini düşürecek yönde etki yapacak olursa, çapraz geçiş güçleşecek ve deformasyon kapasitesi artmayacaktır denilebilir. Alaşım elementleri bunun tersi etkiyi yapar ise o durumda hem bazal düzlem üzerinde biriktirilebilecek dislokasyon sayısı artışı ve hem de çapraz geçişin kolaylaşması nedeniyle deformasyon kapasitesinde artış beklenmelidir. Sonuç olarak deformasyon sertleşmesi hızı düşse de bu durumda mukavemette bir düşüş beklenmemelidir. İHE deki artış, esasen serbest elektron yoğunluğu dağılımında daha kuvvetli polarizasyonların doğmuş olduğu anlamına gelir ki bu dislokasyonların doğumunu da güçleştiren mukavemet arttırıcı bir etkidir [2].

Mg alaşımlarında deformasyon kapasitesinin artırılması yaklaşımı sadece bazal düzlem açısından İHE irdelemesi ile tamamlanamaz. Yukarıdaki irdeleme doğru olsa da, kullanılacak olan alaşım elementi(leri)nin prizmatik ve piramidal düzlemlerdeki etkisinin de incelenmesi gerekir. Bu düzlemlerin saf Mg'de 225 °C'nin üzerindeki sıcaklıklarda dislokasyon hareketleri açısından aktif oldukları düşünüldüğünde, bu düzlemler için İHE seviyelerini azaltacak, diğer bir deyişle bu düzlemlerdeki serbest elektron yoğunluğu dağılımlarında polariteleri düşürecek etkileri yapacak elementlerin bulunmasının deformasyon kapasitesini artırması beklenmelidir. Bu tür bir etkinin farklı elementlerce yapılması bir zorunluluk değildir. Aynı alaşım elementi şayet yukarıda belirtilen etkileri hem bazal hem de prizmatik ve piramidal düzlemlere yapıyor ise, daha yalın bir kompozisyonla hedeflenen iyileştirmeler yapılabilir anlamına gelir. Örneğin, bazal düzlemin İHE'si artırılarak ve/veya bazal olmayan düzlemlerin İHE'si düşürülerek termal çapraz kayma kolaylaştırılırsa, deformasyonda azaltılmış bir anizotropi elde edilebilir [56]. Oda sıcaklığında deformasyona katkısı olmayan prizmatik ve piramidal kayma sistemleri etkinleştirilirse birincisi iki, ikincisi beş ilave kayma sistemi sağlar [56].

Kristalin, piramidal ve prizmatik kayma sistemlerinin c-ekseni boyunca deformasyona sağlayacağı katkı için gereken CRSS değerine ulaşana kadar Mg metali için daha kolay aktive olan ikiz sistemleri kayma sistemlerindeki eksikliği telafi eder. Mg ve alaşımlarında görülen deformasyon ikizlerinin oluşum kolaylığı Mg'nin c/a oranına bağlı olarak açıklanabilmektedir. Ancak bu, geometrik bir açıklamadır ve prizmatik ve piramidal düzlemlerin c/a oranı sayesinde daha yüksek Schmid faktörüne sahip olmaları açıklamasına dayanır. Daha temel açıklama İHE değişimine, diğer bir deyişle serbest elektron yoğunluğunda ikiz düzlemlerindeki düşüşe bağlı olarak da yapılabilir. Prizmatik ve piramidal düzlemlerdeki kaymanın başlaması da benzer bir geometrik açıklamaya dayandırılabilir. Artan sıcaklık ile beraber örneğin 225 °C'nin üzerine çıkıldıkça, birinci ve ikinci Brillouin Zonlarının üst üste binmektedir. Bu durumun bir sonucu olarak kristalin c ekseninde elastik bir uzama olur. Sıcaklığın etkisi ile ortaya çıkan c/a oranındaki değişimler, bazal olmayan düzlemlerin kayma ve ikizlenme davranışı için Schmid faktöründe artış yaratır. Böylelikle 225°C'nin üzerinde bu düzlemlerde de kayma hareketi gerçekleşmeye başlar. Diğer bir deyişle, c/a oranındaki değişimler, deformasyonu meydana getiren kayma ve/veya ikiz sistemleri için gerekli aktivasyon enerjilerinde farklılaşma anlamına gelmektedir [1]. Bu irdelemedeki geometrik yaklaşıma göre uygun bir c/a oranının Mg kristalinin bazal olmayan kayma sistemlerinin

alışmasını, c/a oranı daha yksek diğ r HSP metallere g re daha kolay olacağı  ne srlebilir [21]. Ancak, bu g rş daha sonra, bazal ve prizmatik dzlemlerde kısmi dislokasyonlara (partial dislocations) ayrışmış vida dislokasyonların yarattığı istif hatası enerjilerinin daha titiz bir analizine dayanarak farklılaşmıştır. Mg'nin oda sıcaklığı ve yksek sıcaklıklarda (225  C'nin zerinde) apraz kayma g stermesi veya diğ r HSP metallere kıyasla dşk gerilmelerde deformasyonu, bazal dzlemin İHE'sinin (~10 mJ/m²) prizmatik dzleminkine oranla yaklaşık 7 kat daha dşk olması ile aıklanmıştır. Bu değ r, aynı zamanda dislokasyon ekirdeklenmesi ile ilgili olduėu iin, CRSS değ rlerinin karşılaştırmalı değ rlendirmesi gibi mutlak niceliklerden daha anlamlı kabul edilebilir. Yine de, diğ r metallerde olduėu gibi, magnezyumda da difzyonel olmayan bir deformasyon mekanizmasının, yani kayma veya ikizlenmenin etkinleştiri me kolaylığı, CRSS' e elbette ki baėlıdır [2].

Seyreltik alaşımlara odaklanan deneysel alışmalarla birlikte *ab initio* tekniklerine ba vurma konusundaki nispeten yeni abalar bu perspektiften kaynaklanmaktadır. Alaşım elementlerinin dislokasyon davranışı ve dolayısıyla genel mekanik davranış zerindeki etkilerini tahmin etmede birinci prensip tekniklerinin (yoėunluk fonksiyonel teorisi, g ml atom modeli, molekler dinamikler) ba arısı, temel  zellikleri belirleyen serbest elektron yoėunluğu daėılımları, ortaya ıkan baė kuvveti ve İHE'deki deėişikliklerin dikkate alınmasına dayanmaktadır.

1.5. Magnezyumda Deformasyon Anizotropisi (Deformation Texture)

Malzemeler sahip oldukları kristalografik oryantasyona baėlı olarak farklı fiziksel, kimyasal ve mekanik  zellikler sergiler. Anizotropi kavramı temelde tm kristal sistemlerinde mevcuttur. Ancak polikristalin yapıda istatistiksel olarak bu kristal anizotropisi anlamını kaybeder ve normal olarak bir “bulk” malzemede  zellikler herhangi bir y nde tanelerin  zelliklerinin ortalaması (average) olarak g zlemlenir ve izotropik  zellikler sergilenir. Ancak deformasyon ve  zellikle şiddetli deformasyon, dislokasyonların lokal olarak kristalleri yeniden y nlendirmesi nedeniyle deformasyon anizotropisini, yani y nlenmeyi (texture) doėurur. Mg gibi HSP kristal sistemlerinde bu durum, kbik kristal yapılara g re daha şiddetlidir.

Mg, SPH yapısının güçlü plastik anizotropisinin aksine, elastik sabitleri ve termal elastik katsayıları neredeyse izotropik olan ve HSP kristal yapıya sahip metaller arasında esasen benzersiz bir metaldir [36]. Bu durum Mg'deki atomlararası bağın gerçek metalik karakterini ve HSP kristalin düşük simetrisini telafi edebilen Brilyon bölgelerine sahip olması nedeniyledir. Ayrıca elastik modülü 45 GPa ve Poisson oranı 0,28 olan Mg alaşımları, genellikle rakip alaşım Alüminyum ve çelikten daha düşük değerlere sahiptirler [57]. Bu durum, avantajlı olan hafifliğinin yanında diğer özelliklerinin metalürjik olarak geliştirilmesi gerçeğini bir kez daha işaret etmektedir.

Mg'de, kayma hareketlerinin büyük çoğunluğu bazal düzlemlerde gerçekleştiğinden deformasyon yönlenmesi çok daha şiddetli bir durum sergiler ve “bulk” malzeme tüm özellikleri ile anizotropik hale gelir [53]. Sahip oldukları kristal yapıdan dolayı, HSP metalleri, kübik kristal yapıya sahip metallere göre çekme/basma (yield asymmetry) asimetrisi daha belirgin, dolayısı ile daha yoğun anizotropik özellik gösterirler. Diğer metallerde de doğabilen bu yönlenme, normal olarak deformasyon sonrası uygulanan bir statik bir yeniden kristalleşme tavı (recrystallization annealing) ile büyük ölçüde giderilebilmektedir. Ancak Mg'de, şayet doğru alaşım elementleri ile alaşımlama yapılmamış ve prizmatik ve piramidal düzlemler üzerinde dislokasyonlar yaratılamamış ise yeniden kristalleşme tavlama yönlenmeyi gideremez [2]. Bu hususta iyileşme amacıyla yapılacak doğru alaşım elementi seçiminin bir diğer mekanizma ile de iş görmesi mümkündür. Şayet alaşım sistemi Mg matriste yeniden kristalleşme sırasında çekirdeklenme (nucleation site) noktaları olarak davranacak çökelti partikülleri oluşturuyor ise deformasyon yönlenmesi yeniden kristalleşme ile büyük oranda iyileştirilebilir [26].

2. ELASTİSİTE MODÜLÜ-SÖNÜMLEME KAVRAMI VE RFDA (RESONANCE FREQUENCY DAMPING ANALYSIS) ÖLÇÜMÜ

Katı malzemeler sahip oldukları kütle, boyut, elastisite ve sıcaklığa bağlı olarak karakteristik bir mekanik rezonans frekansına (f_r) sahiptir. Uygun yöntemler ile f_r 'nin ölçümü neticesinde elastisite modülü (E), kesme modülü (G), Poisson oranı (ν) ve bu elastik özelliklerin sıcaklık ile olan ilişkileri hesaplanabilir. Titreşim absorplanması (sönümlleme) elastik modüle bağlı olarak dalga enerjisinin ısıya dönüşerek azalmasına neden olurken, ayrıca iç sürtünme parametresi (Q^{-1}), malzemede dalganın geçişi esnasında gerçekleşebilecek atomik ölçekteki değişimler açısından, yani numunede histerisis değişimler şeklinde de analiz edilebilir. Serbest bir titreşimin genlik azalmasından Q^{-1} değeri belirlenebilmektedir (Denklem 2.1-2-3).

$$E = 0,9465 \left(\frac{mf_f^2}{b} \right) \left(\frac{L^3}{t^3} \right) T_1 \quad (2.1)$$

Burada;

E: Dinamik Young modülü, Pa

m: Barın ağırlığı, g

b: Barın genişliği, mm

L: Barın uzunluğu, mm

T: Barın kalınlığı, mm

f_r : Eğilmede çubuğun temel rezonans frekansı

T_1 : Çubuğun sonlu kalınlığını, Poisson oranını ve benzerlerini hesaba katan temel eğilme modu için düzeltme faktörü

$$T_1 = 1 + 6,585(1 + 0,0752\mu + 2,173\mu^2)\left(\frac{t}{L}\right)^2 - 0,868\left(\frac{t}{L}\right)^4 - \left[\frac{8,340(1 + 0,2023\mu + 2,173\mu^2)\left(\frac{t}{L}\right)^4}{1 + 6,338(1 + 0,1408\mu + 1,536\mu^2)\left(\frac{t}{L}\right)^2} \right] \quad (2.2)$$

Burada;

μ : Poisson Oranı

Eğer $L/t \geq 20$ ise T_1 şu şekilde ifade edilebilir;

$$T_1 = [1 + 6,585(\frac{t}{L})^2] \quad (2.3)$$

Bu değerin mikroyapısal kökeni malzeme türlerine göre değişiklik gösterir [58]. Genel olarak, dinamik bir yükün uygulanması üzerine mikroyapısal özelliklerin histeretik olarak, yani geçen dalga ile bir faz farkı ile gecikmeli olarak yeniden düzenlenmesi de sönümlenmeye neden olur. Bu duruma örnek olarak çelikte arayer karbon atomlarının hareketi ve tüm kristalin katılarda dislokasyon örnek hareketleri verilebilir. Ayrıca çatlaklar veya delaminasyonlar gibi daha büyük yapısal kusurlar, sürtünme yoluyla enerji kaybına neden olarak gösterilebilir.

Sönünleme kapasitesi Q^{-1} , değeri ile ifade edilir (Denklem 2.4):

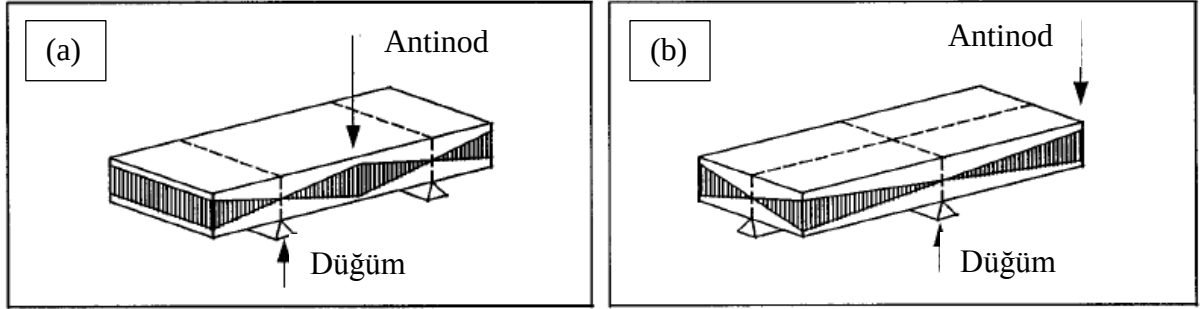
$$Q^{-1} = k/(\pi f_r) \quad (2.4)$$

Burada k , mekanik rezonanstaki frekansın (f_r) exponansiyel düşüş parametresidir. Bu parametrenin ölçüm hassasiyeti, numune boyutuna ve ölçüm esnasında cihazda ne şekilde süspanse edildiğine bağlıdır. Ölçülebilir en küçük değer küçük numuneler (e.g., <1g) için 10^{-3} 'den başlar ve numune boyutu arttıkça 10^{-5} 'e kadar düşebilir (daha hassas hale gelir). Diğer yandan, f_r hassasiyeti ise numunenin boyutu ve tokluğuna (stiffness) bağlıdır ve 10^{-3} ila 10^{-5} (i.e. $\pm 1\text{Hz}$ at 1kHz and $\pm 0.1\text{Hz}$ at 10kHz) arasında değişir [59].

Bir numunenin titreşim modları o numunenin şekline, çarpma yerine ve destek türüne bağlıdır. Bu modlar basit şekiller (çubuklar, diskler, vb.) için iyi tanımlandığından, destekler istenen titreşim moduna uygun bağlantı noktalarına yerleştirilir. Şekil 2.1 (a)-(b) eğilme ve burulma titreşimi için numunenin destek noktalarına nasıl yerleştirileceğini göstermektedir. Uygun yerleştirilen destek noktaları ile sürtünme kayıplarını en aza indirmektedir. Ölçümler genelde eğilme (flexural) modunda gerçekleştirilir.

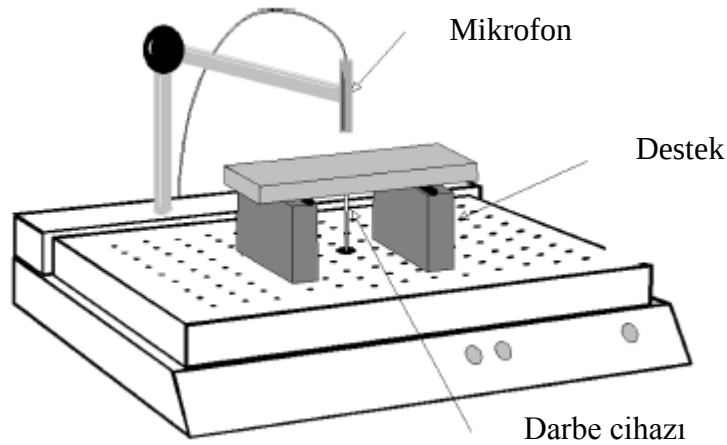
Malzemenin f_r ve/veya Q^{-1} değerlerini ölçen birkaç tip cihaz mevcuttur. Bu sistemlerden biri olan ve çalışma kapsamında kullanılan Rezonans Frekansı Sönümleme Analizi (Resonance Frequency Damping Analysis-RFDA) sisteminin çalışma prensibi Şekil 2.2'deki gibidir. Titreşim başlatmak için malzemeye bir darbe uygulanır ve malzeme içinde gidip gelen elastik dalgaların havada yarattığı basınç dalgalarının hassas bir mikrofon ile algılanması prensibine dayanır. Dalga hareketi sönümlendikçe tespit edilen basınç dalgalarının şiddetinde bir azalma gözlemlenir. Söz konusu azalma malzeme özelliklerinin de hesaba katıldığı eşitliğe göre sönümlenme kapasitesini verir

(Denklem 2.1-2.3). Bahsi geçen yöntem esasen tahribatsızdır ve yüksek sıcaklıklarda ve agresif atmosferlerde de uygulanabilir [60].



Şekil 2. 1. Dikdörtgen çubukların (a) eğilme ve (b) burulma titreşim modu örneği [61]

Etkinin oluşturulduğu çarpma yeri, titreşimin bir antinoduna yakındır. Genelde darbe, esnek bir polimer çubuğun ucuna yapıştırılmış bir çelik bilyeden oluşan basit bir aletle manuel olarak sağlanmaktadır. Numune titreşimi bir piezo kristal veya bir mikrofon ile kaydedilir. Eğer piezo kristal tercih ediliyorsa, numune ile temas gereklidir. Özellikle hafif numuneler söz konusu olduğunda, f_r 'yi etkilememek için temas yerinin titreşim düğümüne mümkün olduğunca yakın olması gerekir. Her durumda, temas halindeki piezo kristali, hafif numunelerde Q^{-1} 'in doğru ölçümüne izin vermez. Bu gibi durumlarda temassız bir dönüştürücü olan mikrofon tercih edilmektedir [61]. Bu tez çalışmasında mikrofon kullanılmıştır.



Şekil 2. 2. Tipik bir RFDA cihaz bileşen gösterimi [61].

RFDA yöntemi hasarsız numune muayene yöntemlerinden bir tanesidir. Kompozit, polimer ve seramik gibi malzemelerden mekanik gerilme-deformasyon testleri ile sağlıklı sonuç alınabilmesi için yüksek gerilme değerleri gerekmektedir. Bu durumun sağlanması genel olarak zor olduğu için dinamik yöntemler bu tarz malzemelerin özelliklerinin doğru belirlenmesinde tercih edilir. Aynı şekilde malzemelerin ölçümü için statik yöntemlerin kıstasları bu denli zorlayıcı olmasa da yapı içerisinde var olan ve homojenliği negatif yönde etkileyen unsurlar dinamik yöntemleri statik yöntemlerden daha avantajlı hale getirmektedir. RFDA yönteminde, malzemenin sönümleme kapasitesinin (damping) yanı sıra, elastisite modülü, kayma modülü ve “Poisson Oranı” gibi kritik özellikler de belirlenebilmektedir. Akustik ölçüm tekniği olarak RFDA bu doktora tezi kapsamında elastisite modülü ve sönümleme değerlerinin belirlenmesinde kullanılan yöntemdir.

Saf Mg'nin sönümleme değeri 0,074 (Q^{-1}) olarak rapor edilmiştir. Mg'nin bu karakteristiği düşük elastisite modülü ile yakından ilgilidir ve ayrıca saf halde düşük olan İHE ile ilişkilendirilebilir. Özellikle düşük dislokasyon yoğunlu olması durumunda, örneğin iyi tavlanmış malzemede, düşük İHE sayesinde dislokasyon hareketleri daha kolay olduğu ve ikizlenme ile hemen hemen eş gerilme seviyelerinde aktif hale geldiği için bu iki mekanizmanın her ikisinin de dalga hareketinden enerji absorplaması ve dolayısıyla da yüksek bir sönümleme kapasitesi gözlemlenmesi şaşırtıcı değildir. Teorik olarak, prizmatik ve piramidal düzlemlerin İHE seviyelerinin düşürülmesinin de bu düzlemler üzerinde dislokasyon aktivitelerini kolaylaştıracağından sönümlenme kapasitesini artıracığı öngörülebilir [59]. Katkısız Mg metali iyi derecede sönümleme kapasitesi sergilemektedir.

S. Ganeshan ve ark. Mg alaşımları üzerine yaptığı bir çalışmada, latis parametresi ve elastisite modülünün, matris içerisinde çözünen atomların yarıçapları ve elastik özellikleriyle yakından ilişkili olduğunu belirlemişlerdir. Çözünen atomlar yapı içerisinde sadece kafes parametrelerini değiştirmezler. Aynı zamanda, atomik kümeler oluştururlar. Bu kümeleri oluşturan elementler arasındaki elektronegativite farkı sebebiyle meydana gelen küme yapısında da değişiklikler gözlemlenmektedir. Kümeler içerisindeki bu yapısal farklılıklar malzemeye ait atomik boyuttan makro boyuta kadar birçok özellik üzerine etki gösterdiği literatürde yapılan çalışmalarda bildirilmiştir [62]. Saf Mg (içerisinde herhangi bir alaşım elementi olmadığı varsayılırsa), alaşımlı haline göre daha yüksek sönümleme performansı gösterdiğini belirtmiştik. Bu durumun çok yüksek

gerinim genliğinde bile geçerli olduğu yapılan çalışmalarda görülmüştür [63]. Alaşım içerisinde çözünen atomlar, dislokasyon hareketini sınırlandırdıkları için katı çözelti içeren metaller saf hallerinden daha büyük kritik gerinim genliklerine sahiptir. Gerinim genliği kritik gerinim genliğinden daha düşük olduğunda, alaşımın sönümleme kapasitesi gerinim genliğine çok zayıf bir şekilde bağlıdır ve bu durum gerinim genliğinden bağımsız sönümleme olarak adlandırılır. Gerinim genliği, kritik gerinim genliğinden daha yüksek olduğunda dislokasyon engel noktasından ayrılır ve alaşımın sönümleme kapasitesi artan gerinim genliği ile ciddi bir şekilde artış gösterir. Bu durum, literatürde gerinim genliğine bağlı sönümleme olarak geçmektedir. Çözünen atom tarafından oluşturulan kristal kafes distorsiyonu sönümleme açısından önemli bir etkindir, ancak alaşımların sönümleme kapasiteleri üzerinde tek faktör olmayıp karışım entalpisi ve elektronegativitenin de önemli birer faktör olduğu iyi bilenen bir gerçektir. Alaşımların gerinim genliğine bağlı sönümleme kapasitesi İHE ile pozitif bir ilişki içerisinde. Daha yüksek İHE, çapraz kaymanın kolay olduğuna işaret eden ve istif hatalarının olmadığı veya oluşabiliyor ise kısmi dislokasyonlar arası bölgenin, yani istif hatasının küçük olduğu durumdur. Bu durumda çapraz kayma sayesinde dalga enerjisinin absorplanması söz konusu olabilir. Ancak bu mekanizma yüksek gerilme seviyelerinde çalışabileceği için, göreceli olarak yüksek İHE değerine sahip bir alaşım daha yüksek gerinim genliğine bağlı sönümleme kapasitesi sergiler. Görülmektedir ki, İHE gerinim genliğine bağlı sönümleme özelliklerini etkileyen baskın bir faktördür. Bu açıdan bakıldığında, magnezyumun İHE'sini arttıran alaşım elementlerinin eklenmesi, sönümleme kapasitesinin daha geniş bir frekans aralığına yayılabilmesi için faydalı olabilir [7].

3. İŞ FONKSİYONU VE KELVİN PROB KUVVET MİKROSKOBU (KPFM)

Malzeme özelliklerini belirleyecek olan atomik yapının çözünen elementlerin dağılımı ve yarattıkları değişiklikler açısından, özellikle çoklu alaşım sistemlerinde, anlaşılması halen son derece zorlu bir problemdir [64]. Her ne kadar, 'High-Angle Annular Dark-Field Scanning Transmission Electron Microscopy' (HAADF-STEM) veya Atomik Tomografi (TOFF-SIMS) atomik çözünürlükte teknikler mevcut ise de söz konusu karakterizasyon teknikleri kendine has güçlükler içerir. Alaşımların kompozisyonel dizaynlarının doğru yapılabilmesi için, geline aşamada İHE kavramına başvurulduğu ve iş fonksiyonu ölçümlerinin İHE ile çok yakın ilişki olarak kullanıldığı yapılan çalışmalarda görülmektedir [2,62,65–69]. Alaşım elementlerinin birbirleri ile etkileşimleri neticesinde atomlar arasındaki elektronik konfigürasyondaki değişimler doğrudan iş fonksiyonu değerinde farklılaşmalara sebep olmaktadır. Bu değişimlerde oluşan polarizasyonlar atomlar arası bağdaki değişiklikleri de beraberinde getirir. Söz konusu değişiklikler, kristal düzlemlerine spesifik olarak gerçekleşir ve her bir düzlem için İHE değerleri farklı şekilde değişimler gösterebilir. Malzeme özellikleri ve bunlar arasında özellikle deformasyon davranışı açısından İHE köktenci (Fundamentals) bir kavram olduğuna göre iş fonksiyonu ölçümleri esasen İHE değişimlerini en azından kalitatif anlamda bizlere sunar. İş fonksiyonu değerinin belirlenmesi için çeşitli çalışmalarda farklı yöntemler tercih edilebilmektedir.

3.1. Miedema Modeli

İş fonksiyonu (Φ), kristal katıların elektronik bir yüzey özelliğidir. İş fonksiyonu değerinin, alaşım tasarımı için önemli bir parametre olduğu görülmüştür. Alaşımların deneysel ve hesaplamalı karşılaştırmaları neticesinde, iş fonksiyonu ile tokluk, sertlik, süneklik ve bulk modülü gibi çeşitli mekanik özellikler arasında bir ilişkinin varlığı tespit edilmiş ve bu değer yükseldikçe atomlar arası bağların daha kuvvetli olması gerektiği belirtilmiştir [68,70]. Atomlar arası bağ kuvveti ile ilişkili olarak iş fonksiyonunun alaşım dizaynı yaparken ne anlama geldiğini kavramak için Miedema modeline başvurmak gerekir. Çünkü iş fonksiyonu değerlerinin örneğin bir kati çözeltide neden çözeltilin tipi ile değişebileceği, diğer bir deyişle rastgele (random) bir kati çözelti ile kısa mesafeli düzen (short range order-SRO) oluşturabilen bir sistem kıyaslandığında ikinci durumun neden daha yüksek iş fonksiyonu değerleri vermesi gerektiği anlaşılmalıdır.

1973 yılında A.R. Miedema'nın yayınladığı çalışmada, alaşım sistemlerinin katı çözültü veya intermetalik bileşik oluşturmaya yönelmesi konusu, ikili Mg alaşım sistemleri bazında irdelenmiş ve modellenmiştir. Buna göre iş fonksiyonunun alaşım sistemindeki elementlerin elektronegativite farkları ve karışım entalpisi değerleri arasında aşağıda verilen (Denklem 3.1) matematik ilişkisi kurulmuştur. Bu durum, yeni alaşım dizaynları için önemli bir bulgu olarak karşımıza çıkmaktadır [66].

$$\Delta H = -P((\Delta\phi)^*{}^2 \left(Q(\Delta n)^{\frac{1}{3}}\right)^2 - R \quad (3.1)$$

Burada; P ve Q sabit olarak kabul edilirler; e elektriksel yük, $\Delta\phi^*$ elementlerin elektronlar için kimyasal potansiyel farkları (ya da eşdeğer olarak elektronegativite farkları veya iş fonksiyonu farkları), ve Δn ise iki atomik hücre sınırında elektron yoğunluğu farklarıdır. Burada atomlar küresel olarak tarif edilmezler ve Wigner-Seitz hücreleri olarak ele alınırlar. Esasen Brillouin Zonları da bu tarife göre ortaya çıkan atom şekillerine dayalıdır. Birinci Brillouin Zonu her bir kristal sistemi için ayrı bir geometriye sahip olan Wigner-Seitz atom şeklinin “reciprocal space” deki (ters uzay veya difraksiyon uzayında kristal latisinin karşılığı) tarifinden başka bir şey değildir. Buna göre basit kübik sistemde atom şekli yine bir küptür. YMK kristal sisteminde “truncated octahedron”, HMK sisteminde “rhombic dodecahedron”, ve nihayet primitif hekzagonal sistemde ise atom şekli yine hegzagondur (HSP’de değişir).

Bu modeldeki atomlar, çekirdeği saran bir elektron gazı modeli ile tarif edildiği için şekil değiştirebilen unsurlardır. Örneğin deformasyon esnasında “yumuşak top” modeli ile tarif edilen atom, komşuları tarafından zorlanarak (ve o da komşularını zorlayarak) şekil değiştirecek ve yer değişimi sonucunda oturduğu kararlı pozisyonda başlangıçtaki şekline tekrar kavuşacaktır. Elbette ki şekil değiştiren unsur atom çekirdeği değil, elektron gazıdır ve atom küresel bir sert top şeklinde düşünülmemelidir. Klasik tarifi aksine, bu modelde kafes yapısında hiçbir boşluk yoktur ve atom çekirdekleri haricindeki tüm yerler elektronlar tarafından işgal edilmiştir. Bu husus, İHE ile çok yakından ilgilidir. Deformasyon esnasında şekil değiştirebilen ve her bir atomu çevreleyerek tüm kristal kafesini dolduran elektron gazı, benzer şekilde alaşımlama sonucunda katı çözültide oturan alaşım elementi atomları nedeniyle de hem ev sahibi atom hem de çözünen atom için, atom boyutları farkı nedeniyle şekil değiştirecektir. Esasen katı çözültü oluşması durumunda İHE’yi değiştiren, işte serbest elektron yoğunluğu dağılımı gerçekleşecek

olan bu deęiřimdir. Bylelikle polaritelerin doęduęu dzlemler ve ynlerde İHE artarken, bunun tersi de mmkn olmaktadır.

Miedema modeli, ikili sistemlerde katı znrlk veya intermetalik bileřik oluřturma arasındaki farkı ve sistemin hangisine yneleceęini ok byk bir doęrulukla ortaya koyar. Aslında bu anlamda Hume-Rotary kurallarından ok daha bařarılı bir model olmasına raęmen literatrde ve zellikle standart kitap metinlerinde neden halen Hume-Rotary kurallarının aęırlıklı olarak yer aldıęını anlamak da gtr.

Miedema'nın nerdięi geometrik modelin řekil 3.1 ngrlerinde geiř-metalleri (transition metals) ve geiř-metali olmayan metallar arasındaki durumlarda karřılařılan az sayıdaki uyumsuzluklar ise yukarıda verilen eřitlikteki negatif R terimi ile dzeltilmeye alıřılmıřtır. Bu terim, d ve p orbitali elektronları arasındaki hibritleřmeye (ortak kullanım, yani elektronun d orbitaline mi, p orbitaline mi ait olduęu konusunda kesinlik yoktur) dayandırılmaktadır. Dięer yandan, iki deęerlikli ve bir geiř-metali olmayan bir element, kuvvetli elektronegativiteye sahip bir dięer element ile bir araya getirilmedięi surece R deęeri ihmal edilebilir ve $R=0$ kabul edilir. Bu zel durumun rneęi olarak Mg bir geiř metali ile alařımlanması durumu verilebilir [66].

İkili metalik sistemin yapısını, yani katı znrlk m yoksa intermetalik bileřik mi oluřacaęını, oluřum entalpisi belirler (ΔH). Bylelikle, faz diyagramının řekli de buna gre oluřur ve dzensiz katı znrlk (random solid solution) ($\Delta H=0$), veya intermetalik oluřurmaya sınırlı katı znrlęe sahip bir sistem ($+\Delta H$), veya intermetalik oluřuran bir sistem (sınırlı katı znrlk halen mmkn olabilir) ($-\Delta H$) gzlenecektir. Burada, kuvvetli elektronegatif olan metallar negatif iyon oluřurmaya eęilimli olanlar ve zayıf elektronegativitesi olanların ise pozitif iyon oluřurmaya daha eęilimli olanlar olduęu unutulmamalıdır.

Anlařılacaęı zere, ikili bir sistemi oluřturan elementlerin elektronegativiteleri bydke ısı aıęa ıkararak intermetalik bileřik oluřturma eęilimleri artacaktır. Yani, dięer bir deyiřle, oluřum entalpisi negatif olacaktır. Byle bir ikili sistemde gerek bir katı znrlk oluřumu baskılanacaktır ve denge diyagramında birden fazla tektik gzlenmesi olasılıęı artacaktır.

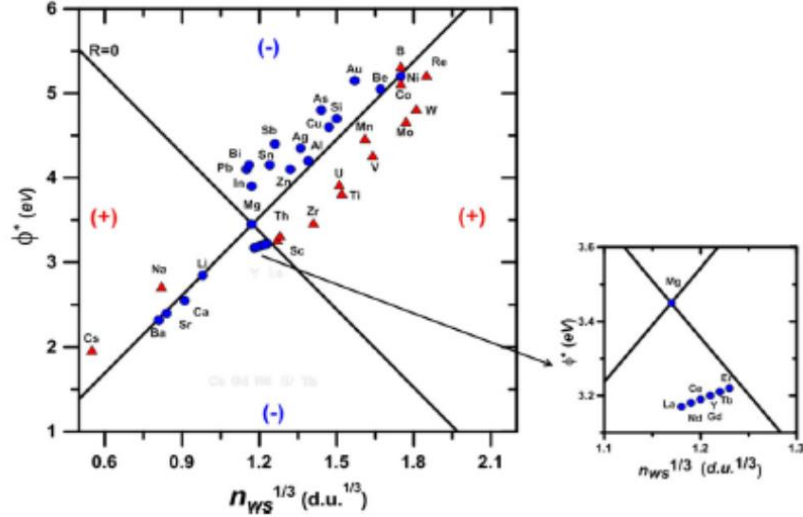
Miedema eřitlięinde grldę zere, isel (intrinsic) iki terim olan sistemi oluřturan elementlerin elektronegativiteleri (ki bu, orjinal Miedema modelinde iř

fonksiyonu ile lineer ilişkilidir) ve karışımın serbest elektron yoğunluğuna elementlerin yapacakları katkı, sistemin oluşum entalpisini belirlemektedir. İki element arasında gerçekleşen yük transferi ile yaratılan $\Delta\phi^*$ terimi, karışımın oluşum entalpisine negatif bir katkı yapmaktadır ve bu yüzden esasen sistemin toplam serbest enerjisini düşüren bir etkiye sahiptir. Δn_{ws} terimi ise atomik hücre sınırlarında (yani W-S atom şekilleri sınırlarında) elektron yoğunluğu dağılımının polariteleri olabildiğince azaltıcı şekilde yeniden düzenlenmesini içerir. Bu fenomen ise her iki elementin de W-S atomik hücre boyutlarında komplementer, yani her iki farklı atomun da birlikte ve karşılıklı gerçekleştirecekleri bir değişimi gerektirir. Böyle bir değişimin gerçekleşmesi ise, her iki elementin atomlarının kendi saf hallerine kıyasla daha enerjili hale gelmeleri anlamını taşır. Burada dikkat edilmelidir ki söz konusu atomların boyut (atomik çap) farkları da atom sınırlarında polariteyi düşürmeye yönelik olarak serbest elektron yoğunluğunu yeniden ayarlama eğiliminde bir rol oynayacaktır ve öngörülerini karmaşık hale getirecektir. Bu kompleksite özellikle geçiş metalleri ve onların sıkıştırılabilirlikleri (compressibility) göz önüne alınırsa daha da fazladır. Ayrıca buradaki önemli iki terim olan, $\Delta\phi^*$ ve Δn_{ws} terimlerinin birbirlerine bağımlı olma ihtimali zayıftır ve bu nedenle de orijinal modelde ihmal edilmiştir [66,71].

Yukarıda açıklanan Miedema modeli sonuç olarak, $\Delta\phi^*$ - Δn_{ws} eksenleri ile çizilen bir grafik şeklinde geometrik bir model olarak karşımıza çıkar (Şekil 3.1). Bu model, Mg merkezli olarak Mg ile diğer elementlerin yapacağı ikili alaşım sistemlerini P/Q eğimi ile çizilen bir doğru ile iki gruba ayırır. Doğrunun üst kısmında yer alan elementler, Mg ile intermetalik oluşturan elementleri işaret etmektedir. Bunlar, Mg ile negatif oluşum entalpi verecek olan geçiş metalleridir. Doğrunun altında oturan elementler ise Mg ile düşük çözünürlüğü olan ve intermetalik oluşturmayacak ve pozitif oluşum entalpi verecek olan elementlerdir.

Bu geometrik yaklaşım, Miedema eşitliğinde $|\Delta\phi^*|$ ve $|\Delta n_{ws}|$ yer alması nedeniyle, mutlak değer ifadelerine dayanarak, pozitif ve negatif eğimli olarak P/Q eğimli iki doğrunun çizilmesiyle daha da geliştirilmiştir. Bu durumda Miedema grafik yaklaşımı ϕ^*-n_{ws} diyagramında 4 bölge ihtiva eder. Bu durumda Miedema grafiği, üst ve alt çeyreklerde magnezyum ile negatif entalpi verecek olan Mg-X ikili sistemlerini, sol ve sağ çeyrekler ise pozitif entalpi verecek ikili alaşım sistemlerini göstermektedir. Aynı

yaklaşım P/Q eğimi doğru belirlendiği takdirde başka bir element bazındaki ikili sistemler için de geçerli olacaktır.



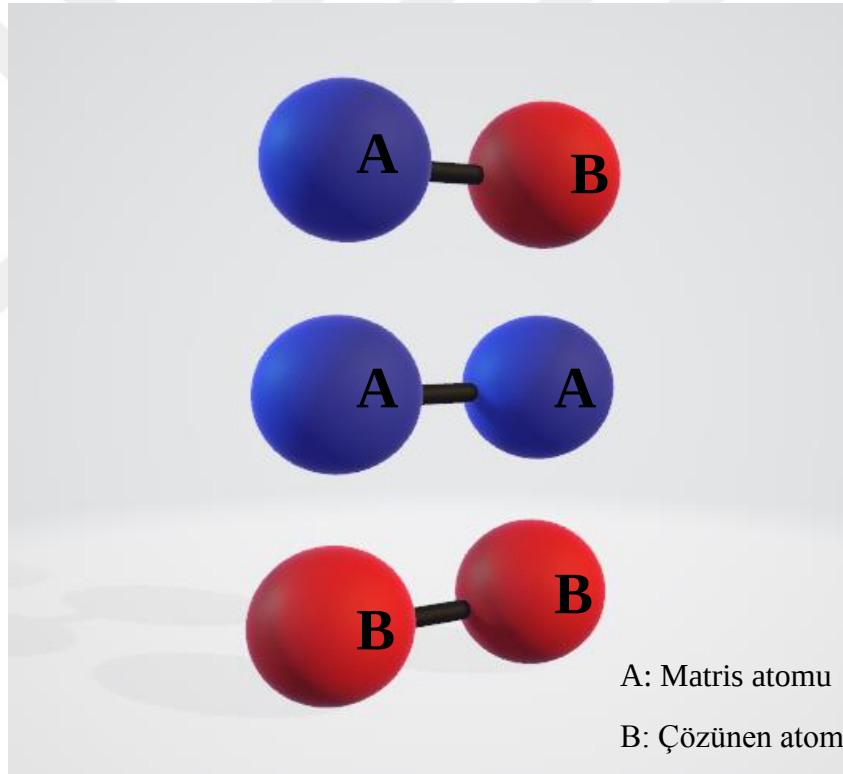
Şekil 3. 1. Mg alaşımları için Miedema şeması, Denklem 3.1’de $R=0$ varsayılarak oluşturulmuştur [66,72]

Miedema yaklaşımında çıkarılması gereken ve grafik modelden direkt olarak anlaşılamayacak bir sonuç daha vardır. Esasen grafikte üst ve alt çeyreklerde yer alan ikili alaşım sistemleri intermetalik oluşturan sistemler olmakla birlikte, bu sistemlerde eğer kısmi çözünürlükler gözleniyor ise bu bölgelere karşılık gelen katı çözünürlük alaşımları kısa mesafeli düzen (Short Range Order - SRO) gösteren sistemler olmak durumundadır. Literatürde [2] bu iki çeyrek arasında bir fark olduğu, ve üst ve alt çeyreklerin farklı tipte SRO oluşturdıkları belirtilmiştir. Buna göre, üst çeyrekte yer alan ikili sistemlerde atomik boyuttaki değişimlere dayalı bir mukavemet artışı yaratan ve hibritleşme göstermeyen tipte bir SRO varken, alt çeyrekte bulunan elementlerin Mg ile oluşturduğu kısmi katı çözünürlüklerde ise SRO’un hibritleşmeye dayalı bir elektron alışverişi ile kovalent komponenti kuvvetli, diğer bir deyişle atomlar arası bağlarda yönlülük gösteren tipte olduğu söylenmiştir. SRO, ikili sistemde alaşım elementinin kendi türü ile komşu olmaması ve tüm komşuluklarını ev sahibi atomlar ile kurması anlamını taşır. SRO tipindeki farklılıklara bakılırsa, alt çeyrekteki elementlerin İHE seviyelerinde farklı düzlemler için birbirinden daha farklı sonuçlar oluşturacağı beklenebilir. Buna paralel olarak yönlülük yaratan SRO tipi nedeniyle, alt çeyrekte oturan alaşım elementlerinin oluşturduğu ikili sistemlerde ölçülecek iş fonksiyonu değerleri, kristalin yönüne bağlı

olarak daha geniş bir deęişim aralıęı gösterecektir denilebilir. Ancak bu tür bir irdeleme için empürite seviyeleri fazlasıyla düşük ve alaşım bileşimi olarak seyreltik numuneler üzerinde ölçümler yapılması gerektięi aşıkârdır [2].

3.2. Kısa Mesafe Düzen (Short Range Order-SRO)

Kısa mesafeli düzen (SRO), çözünen atomların kendi türü ile komşuluk oluşturmadıęı, dięer bir deyişle B-B komşuluklarının gerçekleşmedięi çözeltilerin atomik düzenidir (Şekil 3.2). Bunun oluşabilmesi çözen ve çözünen atomlar arasında elektronegativite farkının yüksek olmasına ve çözeltilerin seyreltik olmasına baęlıdır.



Şekil 3. 2. A-B alaşım yapısı içerisinde atomların olası konumları

Alaşımlarda çözen ve çözünen elementler arasındaki elektronegativite farkının serbest elektron yoğunluęu dağılımını deęiştireceęi ve böylelikle atomik seviyede baęların karakteristięine etki edeceęi aşıkardır. Bu nedenle denge diyagramlarında intermetalik oluşturan, yani elektronegativite farkı yüksek elementlerin bir arada olduęu

alaşımlarda, kısmi çözünürlük gösteren kompozisyonların rastgele katı çözelti (random solid solution) olmaları beklenmemelidir. Bu tür kısmi çözünürlükler B-B bağları yerine A-B bağları oluşturma eğiliminde olacak, yani kısa mesafeli düzen (Short Range Order - SRO) gösterecektir. Nitekim Miedema modeli de bunu işaret etmektedir. Bu fenomene çok sayıda göreceli eski tarihli yayında işaret edilmiştir [73–75]. İkili Mg alaşımlarında SRO olduğunu işaret eden başka çalışmalar da mevcuttur: Mg-Sn [76], ve Mg-(6.4 %)Er alaşımında, Mg-(2.9 %)Gd alaşımında [2], ve Mg-Zn sisteminde [77]. Daha yakın tarihli literatürde de seyreltik sayılabilecek ikili Mg alaşımlarında aynı oluşuma dikkat çekilmiştir [72,78–80]. Bu çalışmalar arasında “Suzuki segregasyonu” elektronegativite farkının yeterince kuvvetli olduğu bir duruma karşılık gelir ve alaşım elementlerinin dislokasyonlar ve/veya istif hatalarına segregasyonunun gerçekleşmesini tarif eder. Yine bu segregasyonun bir uç örneği olarak da bazı Mg alaşımlarında uzun mesafe istif düzeni (Long Period Stacking Order-LPSO) fazlarının oluştuğunu rapor eden çok sayıda literatür mevcuttur [8–10,81].

SRO fenomeninin ne denli gerçek ve kuvvetli olduğu esasen bazı ikili Mg-X alaşımlarında görülen ‘sıcaklıktan nispeten bağımsız’ akma değerlerinin, ya da diğer bir deyişle katı çözünürlük sertleşmesinin ‘atermal’ (sıcaklığa bağlı olmayan) komponentinden anlaşılmaktadır [72,82]. Esasen bu bileşen, basit bir şekilde katı çözünürlük sertleşmesi ile açıklanamayan ekstra mukavemet artışına işaret etmektedir [76]. Yüksek elektronegativite farkına dayalı oluşan kuvvetli A-B bağları dislokasyon hareketlerine karşı rastgele bir katı çözünürlükteki kıyasla daha kuvvetli engeller oluşturur ve bu tür engeller yüksek sıcaklıklarda da daha etkilidir. Sonuç olarak, SRO Mg’nin düşük mukavemeti, sürünme direnci ve Elastisite modülünü geliştirmede son derece önemli bir katkı olarak görülmelidir. SRO etkisinin sıcaklıkla değişmeye ne kadar dirençli olduğu deneysel çalışmalarla da gösterilmiştir [82,83], özellikle sürünme testine yönelik çalışmalarda [72].

SRO olgusunun, alaşım sistemlerini uygun ve ekonomik bir şekilde tasarlamak için iyi bir yaklaşım olduğu varsayılmaktadır. Örneğin, yalnızca %1 Y (nadir toprak elementi) veya Ca içeren α -Mg alaşımlarının, akma davranışında QE22 ve ZE41 gibi geleneksel alaşımlarla rekabet halinde olduğunu ve AE42 ve AS21’den daha iyi performans sergilediği görülmüştür. Abaspour ve Cáceres, Zhang ve ark., özellikle doğal

çekirdeklenme gösteren döküm yapılar için SRO'nun önemine ve buna bağlı olarak alaşım elementinin seçimine dikkat çekmiştir [2,80,82].

SRO kavramı, esasen doğru seçilecek alaşım elementleri ile seyreltik çözeltiler kullanarak yüksek mukavemetli alaşımlar tasarlanabileceğini işaret etmektedir. SRO oluşup oluşmadığı veya ne kuvvette olduğunun anlaşılabilmesi ve alaşım sistemlerinin kıyaslanması ise “İş Fonksiyonu” (İF) ölçümleri ile yapılabilir görünmektedir. SRO, İHE değerini de değiştirecek bir etki olduğuna göre deneysel bir pratik yöntemle değerlendirilmesi gereken bir kavramdır.

3.3. İş Fonksiyonu Kavramı ve Ölçümü

Ölçülebilen bir özellik olarak iş fonksiyonu yüzeyden bir elektron koparmak için gerekli olan enerji (iş) olarak tanımlanır (Denklem 3.2).

$$(\Phi)_{(d)} = E_{dış(d)} - E_{Fermi} \quad (3.2)$$

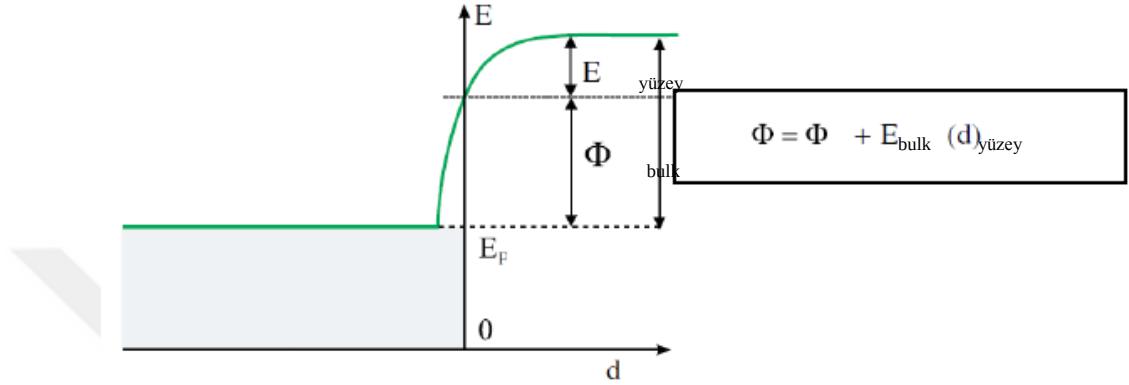
Başka bir deyişle, bir elektronu yüzeyden “d” mesafesine getirmek için gerekli olan minimum enerjidir. Burada bahsi geçen “d” mesafesi ölçüm türüne göre farklılık göstermektedir.

İş fonksiyonu (Φ) belirleme yöntemi olarak;

- Termiyonik ve fotoelektrik emisyon
- Alan emisyon
- Temas gerilimi
- Yüzey iyonizasyonu kullanılmaktadır.

İş fonksiyonu değerini etkileyen iki ana etken vardır. Bunlardan birincisi; elektronların katı malzeme içerisinde sahip olduğu etkileşimdir. Bu durum, bir elektronun malzeme içerisinde, serbest elektron modelinden kovalent veya iyonik bağlanma modeline kadar düşünülebilir. İkinci ana etken ise elektronun yüzey katmanı ile olan ilişkisidir. Elektron koparıldığında yapılan “iş” bir elektronu yüzeyden uzaklaştırmak olarak tanımlanır. Yüzeyi ise malzemenin sonlandığı nokta olarak düşünürsek, bu bölge, iç bölgede olduğu gibi aynı tip ve sayıda bağlara sahip değildir. Yani yüzeye yakın yerlerde elektron yük dağılımı malzemenin iç bölgesinden farklıdır. Bu farklılık yüzey

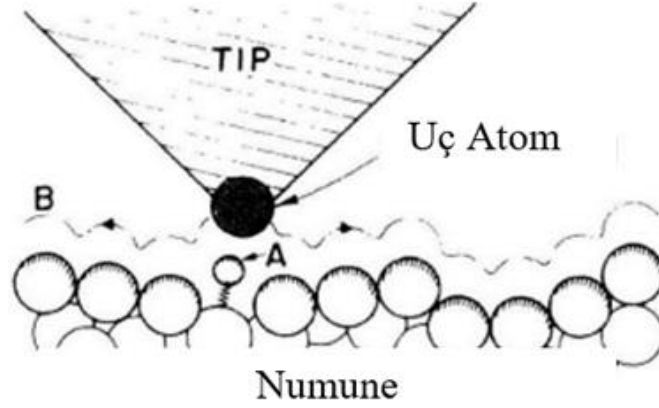
dipolüne (kutuplanma) sebep olmaktadır ve bu yük dağılımını ayrıca yüzeydeki kristal oryantasyonu da etkilemektedir. Bu durum bir elektronu yüzeyden uzaklaştırırken elektronun dipol katman boyunca etkileşimini $E_{\text{yüzey}}$ olarak göz önünde bulundurmamız gerektiğini göstermektedir (Şekil 3.3) [84].



Şekil 3. 3. İş fonksiyonu değerine yüzey enerjisinin etkisinin grafiksel gösterimi [84]

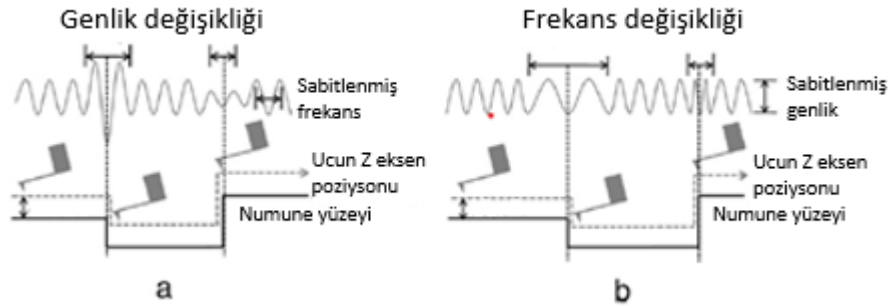
Kelvin prob kuvvet mikroskobu (Kelvin Probe Force Microscope-KPFM), geniş bir malzeme yelpazesinde yüzey potansiyelinin nanometre ölçeğinde görüntülenmesini sağlayan bir sistemdir. Bu cihaz atom kuvvet mikroskobunun (AFM) bir versiyonudur. KPFM yöntemi, AFM’de iletken bir kantilever ucu ile numune (Şekil 3.4) arasındaki yerel temas potansiyeli farkını ölçerek çalışma fonksiyonunu ve/veya yüzey potansiyelini yüksek bölgesel çözünürlükle belirleyebilmektedir. KPFM, AFM tabanlı bir cihaz olduğundan, AFM ve KPFM'nin temel çalışma ilkelerini ve enstrümantasyonunu birlikte değerlendirmek gereklidir. Malzemelerin yüzey özellikleri elbette farklı yöntemlerle de belirlenebilmektedir fakat son çalışmalara bakıldığında, KPFM'nin nanometre altı çözünürlükte yüzeydeki potansiyel dağılımları görüntülemek için sıklıkla kullanıldığını göstermektedir. Dolayısıyla, KPFM'nin nanoyapıların elektriksel özelliklerini karakterize etmede en iyi tekniklerden biri olduğunu söyleyebiliriz [84].

KPFM, temelde numune yüzeyi ile uç arasındaki temas potansiyel farkını ölçer. Yüksek çözünürlüklü KPFM'de temas potansiyel farkı, uç ve numune arasındaki kısa menzilli kuvvetten büyük ölçüde etkilenmektedir. Burada bahsi geçen kısa menzil uç ile numune arasındaki uzaklığın olabildiğince minimum seviyede olmasıdır.



Şekil 3. 4. AFM uç-numune etkileşiminin görsel ifadesi [85]

AFM cihazı temaslı, dokunuşlu (tapping) ve temassız modlarda çalışır. Bu nedenle, dokunuşlu mod ve temassız mod, sırasıyla genlik modülasyonu (GM) ve frekans modülasyonu (FM) işlemi olarak adlandırılır.



Şekil 3. 5. Temassız AFM çalışma modunun şematik gösterimi: (a) Genlik modülasyon modu ve (b) Frekans modülasyon modu [86]

AFM’de temaslı ve temassız modların uç-numune etkileşimi, çekici ve itici kuvvetler tarafından bozular ve Şekil 3.4’te şematik olarak gösterildiği gibi AFM ucunun salınımında genlik veya frekans değişikliklerine neden olur. GM modunda AFM’de, salınım genliğindeki değişiklikler, görüntüleme için geri bildirim sinyali sağlar. Şekil 3.5 (a) 'da görüldüğü gibi, uç-numune etkileşiminin azalmasına bağlı olarak uç-numune mesafesi arttıkça salınım genliği artar. Genlik değişikliği, uç-numune mesafesini önceden

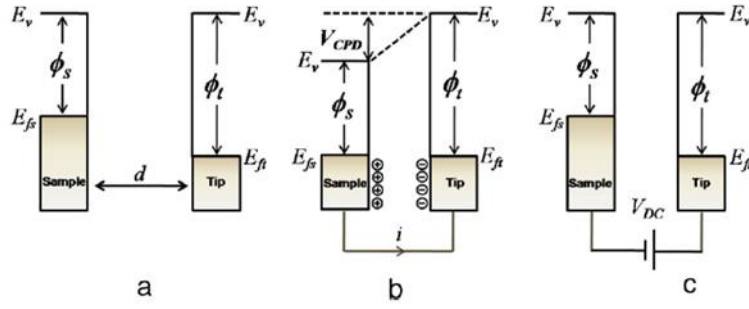
belirlenmiş bir ayar noktasında sabit tutmak için bir geri besleme sistemi tarafından takip edilir ve duruma göre düzenlenir. Genlik değişiminin uç-numune etkileşimine bağımlılığı, harmonik-osilatör modeline dayalı olarak analitik olarak tanımlanabilir ve genlik değişiminin genellikle uç ve numune arasındaki kuvvete bağlı olduğu kabul edilir. Bu nedenle, AFM-GM modu ölçümleri, uç ve numune arasındaki doğrudan kuvveti temsil eder [85–87]. AFM-FM modunda, salınım frekansındaki değişiklikler, uç-numune etkileşimleri hakkında bilgi sağlar. Kantilever salınım frekansı, Şekil 3.5 (b) 'de gösterildiği gibi uç-numune mesafesi varyasyonuna bağlı olarak değişir. Bir geri bildirim sistemi, ayar noktası frekansını sabit tutmak için frekans değişikliğini düzenleyerek numune yüzeyinin topografyasının elde edilmesini sağlar. Salınım frekansında oluşan değişiklikler; uç salınım enerjisi ile ilişkili kantilever geri yükleme kuvveti, uç ve numune yüzeyi arasındaki etkileşim kuvveti arasındaki farklılığa bağlı olarak meydana gelir [85,88]. Bu nedenle, FM modu, kuvvetin kendisinden ziyade kuvvet gradyanını algılar. Bu durum AFM-FM modunun AFM-GM modundan daha yüksek uzaysal çözünürlüğe (spatial resolution) sahip olmasını sağlamaktadır [86].

KPFM, Kelvin metodunun farklı bir varyasyonudur [86]. Makroskobik Kelvin yönteminde, iki metal arasındaki mesafe ayarlanır ve elde edilen kapasitif akım ölçülür. KPFM'de ise cihazın uç ve numune arasına uygulanacak voltaj ayarlanır; bu değere karşılık gelen elektriksel kuvvet ölçülür (Bu işlem sırasında yüzey üzerinde farklı iş fonksiyonu değerlerine sahip bölgelerinde olduğu unutulmamalıdır.).

KPFM yöntemi ile iş fonksiyonunun hesaplanmasının altında yatan temel yaklaşım ve anizotropiye bağlı iş fonksiyonu değişkenliği aşağıda adım adım formüller ile ifade edilmiştir (Denklem 3.3-Denklem 3.6) [65,89]. İlk olarak uç ile numune arasındaki yerel temas potansiyel fark Denklem 3.3'deki gibi tanımlanır,

$$V_{CPD} = \frac{\varphi_{uç} - \varphi_{numune}}{-e} \quad (3.3)$$

Burada; φ_{numune} ve $\varphi_{uç}$ numune ve ucu iş fonksiyonu değerleri iken, e ise elektron yüküdür. Bir AFM ucu, numune yüzeyine yaklaştırıldığında, Fermi enerji seviyelerindeki farklılıklar nedeniyle uç ve numune yüzeyi arasında bir elektrik kuvveti üretilir. Şekil 3.6 incelendiğinde, φ_{numune} ve $\varphi_{uç}$ farklı olduğunda, uç ve numune yüzeyinin enerji seviyesi durumlarını göstermektedir.



Şekil 3. 6. Üç durum için numunenin ve AFM ucunun elektronik enerji seviyeleri: (a) uç ve numune elektriksel temas olmadan d mesafesi ile ayrılır, (b) uç ve numune elektriksel temas halindedir ve (c) harici öngerilme (V_{dc}) CPD'yi ve dolayısıyla uç-örnek elektrik kuvvetini geçersiz kılmak için uç ve numune arasına uygulanır. E , vakum enerji seviyesidir. E_{fs} ve E_{ft} , sırasıyla numunenin ve ucun Fermi enerji seviyeleridir [86]

Şekil 3.6 (a), bir d mesafesi ile ayrıldığında ve elektriksel olarak bağlanmadığında ucun ve numune yüzeyinin enerji seviyelerini göstermektedir. Denge ise uç ve numune yüzeyi elektron tüneli için yeterince yakınsa, Fermi seviyelerinin kararlı durumda hizalanması durumudur. Elektriksel anlamda devrenin tamamlanması üzerine, Şekil 3.6 (b)'de görüldüğü gibi Fermi seviyeleri elektron akım akışı ile hizalanacak ve sistem bir denge durumuna ulaşacaktır. Uç ve numune yüzeyi şarjlanacak ve görünür bir yerel temas potansiyeli farkı oluşacaktır. Oluşan yerel temas potansiyel farkı nedeniyle temas alanına bir elektrik kuvveti uygulanır. Bu kuvvet, Şekil 3.6 (c) 'de gösterildiği gibi etkisiz bırakılabilir. Uygulanan harici bir öngerilim (V_{DC}), ters yöndeki V_{temas} potansiyeli farkı ile aynı büyüklüğe sahipse, uygulanan voltaj temas alanındaki yüzey yükünü ortadan kaldırır. V_{temas} potansiyel farkı nedeniyle elektriksel kuvveti geçersiz kılan uygulanan harici öngerilim (V_{DC}) miktarı, uç ve numune arasındaki iş fonksiyonu farkına eşittir; bu nedenle, uç çalışma fonksiyonu bilindiğinde KPFM ile numunenin iş fonksiyonu hesaplanabilir.

Daha detaylı açıklamak gerekirse, diğer kuvvetlerin yanı sıra, uç ile malzeme arasında elektriksel bir kuvvet vardır. Buradaki uç-malzeme etkileşim sistemini bir kondansatör olarak kabul edersek, uç ile malzeme arasındaki elektriksel kuvvet kondansatörün potansiyel enerjisinin gradyanıdır (Denklem 3.4).

$$F_{el} = -\frac{\partial E}{\partial z} = -\frac{1}{2} \frac{\partial C}{\partial z} V^2(t) \quad (3.4)$$

Sabit uç mesafesinde tarama yaptığımızdan $\partial C/\partial z$ bir sabittir. Uç ve malzeme arasındaki voltajın, farklı potansiyel fark katkılarından oluştuğu bilinmektedir. $V_{temas} - V_{kompanse}$ sabit katkısına ek olarak modülasyon frekansında ayarlanan bir voltaj bileşeni, uç ve malzeme arasında toplam bir değerle sonuçlanır (Denklem 3.5).

$$V(t) = V_{temas} - V_{kompanse} + V_{mod} \cos(\omega_{mod} t) \quad (3.5)$$

İki denklem bir araya getirildiğinde; uç-malzeme etkileşim kuvveti $V_{(t)}$ 'nin karesiyle orantılı hale gelmektedir (Denklem 3.6).

$$\begin{aligned} F_{el}(V) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial C}{\partial z} [V_{temas} - V_{kompanse} + V_{mod} \cos(\omega_{mod} t)]^2 \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial C}{\partial z} [(V_{temas} - V_{kompanse})^2 + 2(V_{temas} - V_{kompanse})V_{mod} \cos(\omega_{mod} t) \\ &\quad + V_{mod}^2 \cos^2(\omega_{mod} t)] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Burada köşeli parantez içerisindeki ilk terim zamandan bağımsızdır, yani sabittir. İkinci terim ise ω frekansına sahip bir modülasyondur. Üçüncü terim ise $\cos 2x$ 'in (matematiksel açılımından sonra) sabit terim artı iki kez ω frekansındaki bileşenlerden oluşur. ω_{mod} frekansı “lock-in” tekniği ile bu yöntemde seçilimli olarak ölçülür (Buradaki “lock-in” tekniği bir AC modülasyonudur ve küçük AC sinyallerini gürültü pikleri arasından belirlemekte kullanılır.). Bu bileşen $V_{temas} - V_{kompanse} = 0$ olduğunda yok olur. Pratik uygulamada, $V_{kompanse}$ 'nin geri besleme kontrolü kuvvetin ω_{mod} bileşenini sıfır tutar. Böylece $\propto 1/e \Delta\Phi - V_{kompanse}$ kuvvet sinyalinin ω_{mod} bileşenini sıfırlayan $V_{kompanse}$ voltajı ($V_{kompanse} = V_{temas} = 1/e \Delta\Phi$) kaydedilir; böylelikle iş fonksiyonu farkı ($\Delta\Phi$), yüzey üzerinde tarama yapılırken nano ölçekte yerel olarak ölçülür [84].

Yüzey enerjisi ve dolayısı ile iş fonksiyonu değerlerini etkileyen temel faktörlerden bir tanesi malzemenin anizotropik davranışdır. Mühendislik ve teknoloji açısından karşılaşılan bazı önemli problemlerin giderilmesinde bu durum mutlaka göz önünde bulundurulmalıdır. Kristaldeki yönlenmeler yani tanelerin oturmuş olduğu farklı düzlemler farklı iş fonksiyonu değerlerine sahip olduğunu göstermek için aşağıdaki denklemler dizisini (3.7 -3.10) incelemek gerekmektedir.

$$\varphi(hkl) = -\left(\frac{\partial E_0}{\partial z}\right)_R - \frac{1}{n_v \tau} \left(\frac{\partial f_{\omega}(hkl)}{\partial z}\right)_R \quad (3.7)$$

Burada $\phi(hkl)$ yüzey enerjisini, ilk terim yönden bağımsız sabit bir değer ve $f_\omega(hkl)$ 'yi içeren ikinci terim ise yöne bağlı iş fonksiyonunu tanımlamaktadır. $(\partial f_\omega(hkl)/\partial z)$ teriminin türevi, daha önce Thomas-Fermi denklemlerinden düzeltmelerle bulunabilen, metal-vakum ara yüzeyinde elektron yoğunluğunun uygulanmasıyla metal elektron yüzeylerinin yüzey enerjisi için elektron istatistiksel yöntemine dayanan Denklem 3.8'deki formül kullanılarak belirlenebilir.

$$f_\omega(hkl) \cong \frac{1}{5} n(hkl) [W(r_0)] Q \quad (3.8)$$

Burada;

Z: serbest elektron sayısı

Q: z'nin zayıf fonksiyonu

$|w(r_0)|$: latise bağlanma enerjisi

$n(hkl)$: o yüzeydeki parçacık konsantrasyonu

Ayrıca $\bar{R}$ = s-küresinin çapı olarak düşünüldüğünde ve bir monoatomik yüzey katmanının etkin kalınlığının τ olduğu varsayılırsa, $\tau = R$ olur ve Denklem 3.7 ile ilgili olarak aşağıdaki Denklem 3.9'u kabul edebiliriz.

$$\partial(hkl) + \frac{B}{z} a^2 f_\omega(hkl) = \text{sabit} \quad (3.9)$$

Buradaki sabit "B" metalin latis yapısına bağlı bir değerdir. B sabitinin değeri, kristal yüzlerin yüzey enerjisi için ifadenin z'ye göre türevinin alınması ve B'nin oryantasyon bağımlılığından sorumlu olan türevdeki ikinci terim göz önünde bulundurarak hesaplanabilir. Denklem 3.10, $\phi(hkl)$ metal anizotropisini iyi tarif eder. Bu anizotropiyi tahmin etmek için Denklem 3.9'un aşağıda verilen forma indirgenmesi gerekmektedir (Denklem 3.10).

$$\phi(hkl) = \phi_0 \left(1 - \frac{f_\omega^T(hkl)}{f_0} \right) \quad (3.10)$$

Burada;

$$\phi_0 = \text{sbt.} = \phi + \frac{B}{z} a^2 f_\omega$$

$$f_0 = \phi_0 z / B a^2$$

ϕ = polikristal malzemeler için Richardson elektron iş fonksiyonu

f_{ω} = erime noktasında sıvı metalin yüzey gerilimi

$f_{\omega}^T(hkl)$ = verilen sıcaklıktaki ilgili kristalin yüzey enerjisi

Kristallerin iş fonksiyonlarını yüzey enerjileri ile ilişkilendiren Denklem (3.8)-(3.10)'da verilmiştir. HSP yapıya sahip makrokristallerin iş fonksiyonunun yöne bağımlılığını doğru şekilde tanımlamamız bu eşitliklere bağlı olarak gerçekleşmektedir [65].

KPFM, diğer ölçüm tekniklerine kıyasla nispeten yüksek enerji duyarlılığı ile üstün uzaysal çözünürlüğe sahip olmasına rağmen, KPFM bir numunenin mutlak yüzey potansiyelini veya iş fonksiyonunu ölçmede bazı zorluklara/dezavantajlara sahiptir. Bu dezavantajlarını ulaşılabilir olması ve kolay kullanımı sayesinde avantaja çevirdiği de bir gerçektir. Pek çok araştırma merkezi ve üniversite bünyelerinde AFM analizi gerçekleştirilmektedir. KPFM, AFM cihazının bir eklentisi olması sebebiyle yaygın kullanımı her geçen gün daha da artmaktadır.

Analizin kalitesini etkileyecek önemli parametrelerin başında inceleme yapılacak numunenin yüzey özellikleri gelmektedir. Temiz, iyi parlatılmış ve oksitlerden mümkün olduğunca arındırılmış yüzeylerle çalışmak gerekir. Bunun yanında, cihaz parametrelerinin çok iyi ayarlanması; numuneye uygun ön gerilme uygulanmalıdır. Ayrıca bu noktada kantilever ucu ile numune arasındaki mesafede uygun şekilde ayarlanmalıdır.

Bir numunenin yüzey potansiyeli ve/veya iş fonksiyonu, Kelvin probu (KP), fotoelektron spektroskopisi (PES) ve elektron ışını indüklemeli akım (EIIA) analizi ile taramalı elektron mikroskobu (SEM) gibi çeşitli tekniklerle de ölçülebilir. KPFM ve KP'nin çalışma prensibi benzerdir. KPFM'ye benzer şekilde KP tekniğinde prob, numune-yüzey arasındaki temas potansiyeli farkını da ölçer. Ancak KP, numune yüzeyinde temas potansiyeli farkının bir haritasını sağlamayan, tüm numune alanının temas potansiyeli farkının değerlerini içeren ortalama alma tekniğine dayalı bir yöntemidir. PES, bir numune yüzeyinden yayılan ışıkla uyarılan elektronların enerjisini ölçer. Açık çözümlemeli yüksek çözünürlüklü PES, numunenin elektronik bant yapısını belirlemek için kullanılabilir. SEM, EIIA'yı ölçerek yarı iletken numune yüzeyinin yerel elektronik

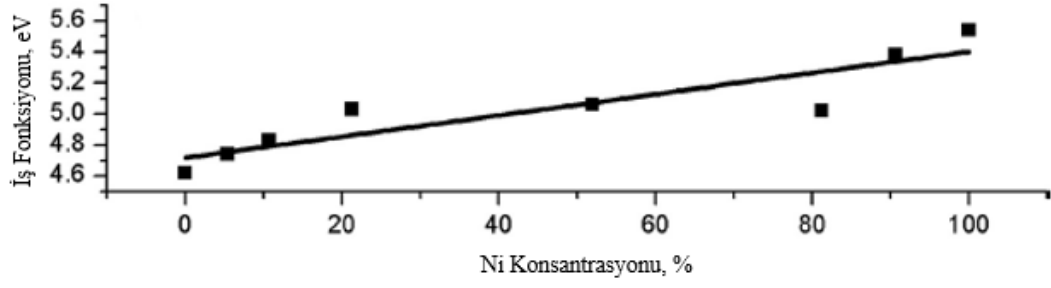
yapısını belirler [90]. Bu yöntemlere ait çözünürlük bilgileri Tablo 3.1’de verilmiştir. İstenilen bilgi türüne bağlı olarak yöntemler tercih edilebilir.

Tablo 3. 1. *İş fonksiyonu ölçümü yapabilen yöntemlerin karşılaştırılmasına ait veriler* [86]

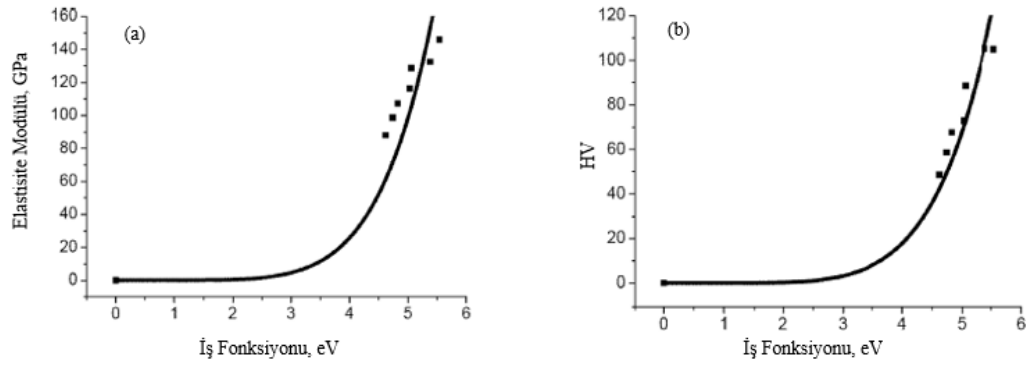
Yöntem	Tanım	Uzaysal Çözünürlük
KPFM	Numune yüzeyinin yerel temas potansiyel farkını (TPF) ölçmek	10 nm'den daha iyi
KP	Tüm numune yüzeyinin TPF ölçümü	Tüm numune yüzeyinin ortalamasını alma
PES	Tüm numune yüzeyinin enerji spektroskopisini ölçme	100 nm'den daha iyi
SEM	Yüzey potansiyelini haritalamak için elektron ışını kaynaklı akımın ölçülmesi	70 nm'den daha iyi

Bu tez konusu ile ilgili olarak, KPFM ile iş fonksiyonu belirleme ile ilgili çalışmalar incelendiğinde, Y. Luo ve ark. [67] tarafından yapılan çalışmada ilk defa “elektronik metalürji” kavramı literatüre girmiştir. Çalışmada %40 krom (Cr) içeren farklı karbon (C) oranlarındaki (1-6 %C) dökme demire ait iş fonksiyonu değerleri KPFM tekniği ile belirlenmiştir. Mikroyapının doğrudan etkilediği malzeme özelliklerinin iş fonksiyonu kavramı ile birlikte değerlendirdiği bu çalışmanın temel amacı, çoklu faz içeren sistemlerdeki durumun incelenmesidir. Zira bireysel fazların etkileri kolaylıkla belirlenebilirken çok faz sistemlerinde ortaya çıkan durum daha karmaşıktır. Ancak çalışma sonucunda ortaya konulan bölgesel iş fonksiyonu değerleri ile malzemenin toplam iş fonksiyonu değerleri bir arada değerlendirilince, malzemenin sahip olduğu toplam iş fonksiyonu değerlerinin çok fazlı sistemlerde yol gösterici olarak kullanılabileceği yazarlar tarafından ilgili malzeme üzerinden ortaya koyulmuştur.

Bir başka benzer çalışmada ise H. Lu ve ark. yaptıkları çalışmada [68] farklı Nikel (Ni) kompozisyonlarda Cu-Ni alaşımları üzerinden elektronik özelliklerin malzeme dizaynına olan etkilerini araştırmışlardır. Alaşımların iş fonksiyonu değerleri vakum altında ultraviyole fotoelektron spektrometresi cihazı ile belirlenmiştir. Artan Ni oranı ile birlikte alaşıma ait iş fonksiyonu Şekil 3.7’de gösterildiği gibi artmaktadır. İş fonksiyonu ile Elastisite modülü ve sertlik arasında ilişki Şekil 3.8’de gösterilmiştir. Artan iş fonksiyonu değeri ile alaşımın sahip olduğu mekanik özelliklerin eksponansiyel bir şekilde arttığı sonucuna varılmıştır.



Şekil 3. 7. Nikel konsantrasyonu ile iş fonksiyonu arasındaki ilişki [68]

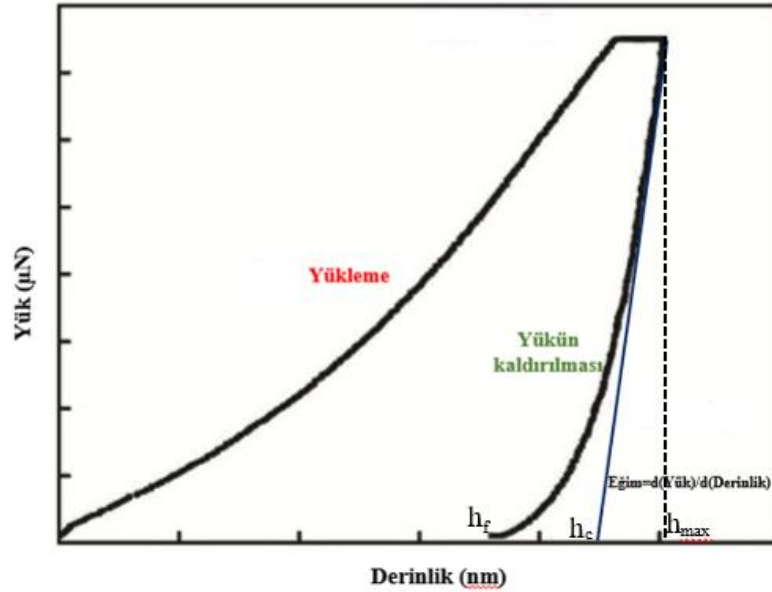


Şekil 3. 8. İş fonksiyonun elastisite modülü ve sertlik (HV) ile olan ilişkisi [68]

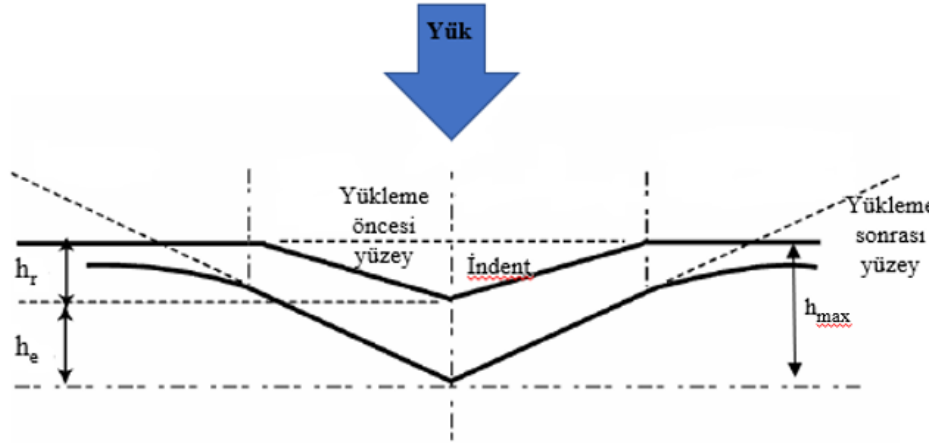
4. NANOİNDENTASYON

Bu tez kapsamında incelen alaşımların bölgesel mekanik özellikleri incelenmesi ve iş fonksiyonu ölçümleri ile birlikte irdelenmesi amacıyla nanoindentasyon testleri gerçekleştirilmiştir.

Bilindiği üzere sertlik, en basit tanımıyla bir malzemenin bölgesel olarak plastik deformasyona karşı göstermiş olduğu dirençtir. Mikrosertlik ölçümünde, uygulanacak yükü önceden belirlenmiş bir uç (indenter) ile numune yüzeyine bir yük uygulanır ve daha sonra bu yük ortadan kaldırılarak numune yüzeyinde oluşan izin alanı ölçülerek sertlik değeri belirlenir. Nanoindentasyon yönteminde bu işleyiş biraz daha farklıdır. Numune ile temas halinde olan indenter önceden belirlenmiş bir yük uygulanır. Ancak burada farklı olarak yük uygulandıkça ucun sebep olduğu penetrasyon derinliği ölçülür. Maksimum yüke ulaşıldığında temas alanı, baskının derinliği ve ucun bilinen açısı veya uç küresel ise yarıçapı ile sertlik değeri belirlenir. Ayrıca, ölçüm esnasında yazılım tarafından oluşan sonuç grafiğinde, yükün kaldırılmasını temsil eden verinin eğrisi kullanılarak mekanik açıdan son derece önemli olan Elastisite modül değeri de bu analiz yöntemi ile belirlenebilmektedir. Nanoindentasyon ile elde edilen tipik bir sonuç grafiği ve indenter-numune etkileşimine ait görseller Şekil 4.1 ve Şekil 4.2’de verilmiştir [91].



Şekil 4. 1. Nanoindentasyon deney sonucunda elde edilen veriler ile oluşturulmuş tipik bir sonuç grafiği



Şekil 4. 2. *İndent yüzey etkileşiminin gösterimi (h_{max} : toplam penetrasyon derinliği, h_r : plastik deformasyon bölgesi, h_e : temas bölgesinde yüzey yerdeğişimi)*

Nanoindentasyon, nanometre ölçeğinde malzemelerin mekanik özellikleri ve davranışlarını karakterize etmek için kullanılan önemli bir teknik olarak ortaya çıkmıştır. Bu yöntem ile bulk ve ince kaplamaların özellikleri detaylı olarak belirlenebilmektedir. Ayrıca nanoindentasyon, geleneksel yöntemler ile gerçekleştirilmesi zor olan matris-ikincil faz arayüzey özellikleri ve küçük tanelerin bireysel mekanik davranışları hakkında bilgi sahibi olmak için de uygun bir yöntemdir. Prensip olarak diğer indentasyon yöntemleri ile aynı fakat uygulanan yükler ve dolayısı ile ulaşılan derinlikler daha küçüktür. Nanoindentasyonda, malzemenin karakteristik özelliği olan yük – batma eğrileri elde edilmekte; sertlik ve elastisite modülü hesabı bu eğriler vasıtası ile yapılmaktadır.

Nanoindentasyon yöntemi kullanım kolaylığı ve sağladığı değerli bilgiler sayesinde son zamanlarda sıkça tercih edilen bir yöntem olmuştur. Bu tekniğin en önemli avantajı, bölgesel olarak veri sağlamasıdır. Bu yöntemin uygulanışında yer değiştirme (h) ve yük (L) yüksek hassasiyetle sürekli olarak kaydedilir. Elde edilen veriler daha sonra yazılım tarafından grafik haline getirilir. Nanoindentasyon işlemi sırasında, indenter, önceden belirlenmiş bir maksimum L_{max} yüküne ulaşılan kadar numuneye nüfuz edecektir. Burada buna karşılık gelen penetrasyon derinliği h_{max} 'tır. İndent numuneden çıkarılırken, boşaltma yer değiştirmesi sıfır yüke ulaşılan kadar sürekli izlenir ve nihai penetrasyon derinliği h_f ölçülür. Boşaltma eğrisinin üst kısmının $S(\text{eğim}) = d(\text{yük}) / d(\text{derinlik})$ olarak belirtilen eğimine esnek temas rijitliği denir. Bu eşitlik kullanılarak indirgenmiş elastisite

modülü hesaplanmaktadır. Oliver & Pharr metoduna göre Denklem 4.1'deki denklem kullanılarak indirgenmiş modül ile malzemenin Young modülü ile Poisson oranları arasında bir bağıntı kurulabilmektedir. Bu yaklaşım sayesinde malzemenin Poisson oranı biliniyorsa Young modülü, deney sonuçlarından yola çıkılarak elde edilebilmektedir.

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1-\nu^2}{E} - \frac{1-\nu_i^2}{E_i} \quad (4.1)$$

Burada;

E_r : İndirgenmiş elastisite modülü

ν : Numunenin Poisson oranı

E : Numunenin elastisite modülü

ν_i : İndenterin Poisson oranı

E_i : İndenterin elastisite modülüdür.

E_r değerinin bulunabilmesi için Denklem 4.2 kullanılmaktadır. Çoğunlukla tercih edilen Berkovich indenter için β değeri 1.034 olarak kullanılır.

$$E_r = \frac{1}{\beta} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{S}{\sqrt{A(h_c)}} \quad (4.2)$$

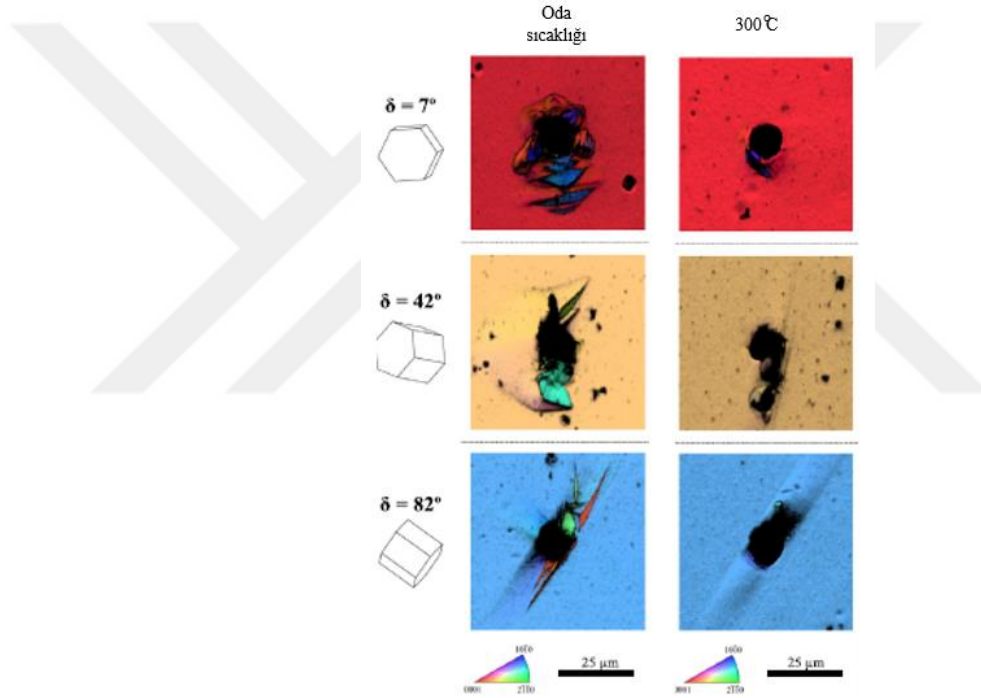
Formülde kullanılan h_c 'nin değeri ise Denklem 4.3 ile hesaplanmaktadır.

$$h_c = h_{\max} - h_f \quad (4.3)$$

R. Mougnot vd. nikel bazlı alaşımlar üzerine yaptıkları çalışmada nanoindentasyon yöntemi ile kısa mesafe düzen üzerine bilgiler sağlandığını göstermesi bu açıdan önemlidir. Çalışmada çeşitli ısıt işlemlerin nikel alaşımlarının üzerine olan etkilerini SRO ile ilişkilendirerek incelenmiştir. SRO'nun etkisini düşük yüklerde (yaklaşık 1.5 mN) nanoindentasyon testi ile açıkça ortaya koymuşlardır. Ayrıca yaptıkları KMD çalışmada, nanoindentasyon yöntemi ile taneler arası karbürlerin yanında tane sınırlarının etkilerinin de hesaba katılabildiğini ve kafes büzülmesi kaynaklı düşük genlikli sertlik varyasyonlarının tanımlanmasının mümkün olduğunu göstermişlerdir [92].

Tek kristal indentasyonu Mg ve alaşımları için oda sıcaklığında deformasyon davranışlarını belirleyebilmek adına önemli bir teknik olarak karşımıza çıkmaktadır [93–

95]. Sertlik değeriindeki taneden taneye değışiklik, kristalografik oryantasyonun bir fonksiyonu olarak farklı kayma sistemlerinin aktivasyonuna dayalı olarak nanoindentasyon ile incelenebilmektedir. R. Sanchez-Martin ve ark. yaptığı çalışmada, polikristal bir Mg'yi oda sıcaklığı ile 300 °C arasında nanoindentasyon ve EBSD tekniğini kullanarak farklı taneler üzerinden incelemiřlerdir. Oda sıcaklığında ve 300 °C'deki analizlerin gösterildiğı Şekil 4.3 incelendiğinde, indent izi etrafındaki ikiz aktivitesinin ve deformasyon profillerinin, üç farklı kristalografik yönelimde sıcaklığa büyük ölçüde bağılı olduğunu göstermiřlerdir.



Şekil 4. 3. Farklı kristalografik oryantasyona sahip üç tanenin oda sıcaklığında ve 300 °C'de nanoindentasyon analizi sonucu EBSD analizi.

Böylece Mg tek kristalinin farklı tanelerinin farklı sıcaklıklarda analizinin nanoindentasyon ile gerçekleştirilebileceğini ve indent izinin etrafında meydana gelen deformasyonun etkilerini EBSD ile ortaya koyulabileceğini göstermiřlerdir [96].

5. MALZEME VE METOTLAR

5.1. Malzemeler

Yapılan bu doktora çalışmasında Mg'nin hem saf hali hem de 3 farklı element ile alaşımlı halleri kullanılmıştır. Saf haldeki Mg, Seoul National University Güney Kore, Magnezyum Araştırma Merkezinden temin edilmiştir. Bu numune, tek kristal üretme yöntemi ile üretilmeye çalışılmış ancak tek kristal yapıda olmayıp üzerinde gözle görülebilen az sayıda farklı kristalografik yönlerde büyümüş tanelerden oluşmaktadır. Saf Mg numunenin görseli Şekil 5.1'de ölçekli olarak verilmiştir.



Şekil 5. 1. Saf Mg numunesine ait görsel

Alaşımlı halindeki numuneler Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr olmak üzere üç (3) adettir. Bu numuneler Chonqing Üniversitesi, Çin tarafından temin edilmiştir. Numuneler, kütlece yüzde Mg-10Ba(%) 10, Mg-15Ca(%) ve Mg-25Sr(%) alaşımlı bileşimindedir. Alaşımlı halindeki bu numuneler herhangi bir ısıtma işlemi görmeyip, çalışma kapsamında döküm halleri ile kullanılmışlardır.

5.2. Numune Hazırlama

5.2.1. Alaşımlı numunelerin RFDA analiz hazırlığı

RFDA analizlerinin gerçekleştirilebilmesi için numuneler ASTM E1876-15 standardında uygun hazırlanmışlardır. Mg-Ba ve Mg-Ca için freze yöntemi kullanılırken,

kırılgan bir yapıya sahip olan Mg-Sr alaşımı, tel erozyon yöntemiyle boyutlandırılmıştır. Analiz için önerilen numune boyutlarına ilişkin görsel Şekil 5.2’de verilmiştir.

	Young's modulus	$l \geq 50 \text{ mm}$	$l \geq 20 \text{ mm}$	$\frac{l}{t} \geq 20$ $\frac{w}{t} \geq 1.1$ $\frac{l}{w} \geq 6$	$\frac{l}{t} \geq 5$
	Young's modulus Shear modulus Poisson's ratio	$l \geq 50 \text{ mm}$	$l \geq 30 \text{ mm}$	$\frac{l}{t} \geq 10$ $\frac{w}{t} \geq 5$ $3 \leq \frac{l}{w} \leq 4$	$\frac{l}{t} \geq 5$ $\frac{w}{t} \geq 5$

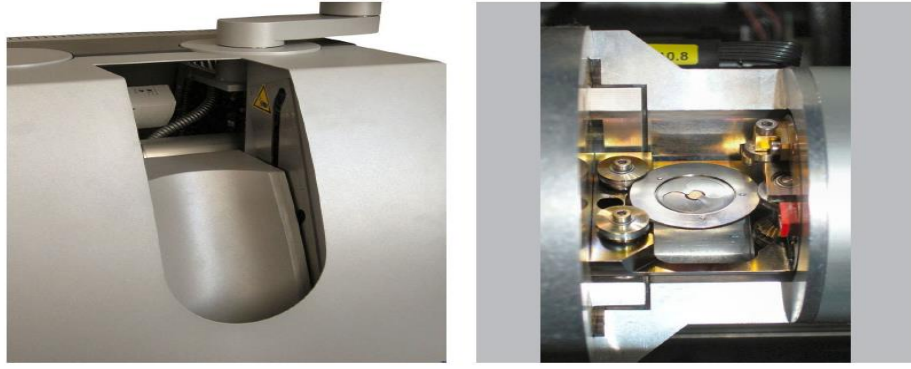
Şekil 5. 2. RFDA analizi için kullanılacak olan dikdörtgen şeklinde numune için olması gerek boyut koşulları

5.2.2. Numunelerin TEM analiz hazırlığı

Geçirimli elektron mikroskobu (TEM) için saf haldeki Mg numuneler ilk olarak zımparalama işlemi ile 200 µm kalınlığına indirilmiştir. Daha sonra numuneler lapping filmleri ile daha da inceltilerek iyon inceltme cihazı ile perfore olacak kalınlığa getirilmiştir. Yeterli kalınlığa gelen numuneler Şekil 5.3’te gösterilen iyon inceltme (GATAN) cihazında perfore edilerek TEM analizi için uygun hale getirilmişlerdir.

5.2.3. Saf magnezyum numunelerin KPFM analizine hazırlığı

Saf Mg numunelerin ayrı kristalografik yönetime sahip bölgelerinden numunelere zararı minimumda tutabilmek için hassas kesim işlemi ile 4 adet örnek alınmıştır. Saf Mg numunelerin yüzeyleri üretimden sonra süreye bağlı olarak oksitlendiğinden yüzeylerinin yöne bağlı iş fonksiyonu değerlerinin sağlıklı belirlenebilmesi için KPFM analizine uygun hale getirilmesi gerekmektedir. Bu işlem için saf Mg numunelerde Şekil 5.3’te gösterilen iyon inceltme cihazı (GATAN) kullanılmıştır. Uygulama parametreleri Tablo 5.1’de verilmiştir. Parlatma işlemi uygulanan saf Mg numuneler KPFM analizine kadar Şekil 5.4’te gösterildiği gibi desikatör içerisinde muhafaza edilmiştir.



Şekil 5. 3. İyon inceltme cihazına ait görsel

Tablo 5. 1. Saf Mg için iyon inceltme cihazında sırasıyla kullanılan parametreler

İşlem Adı	Hızlandırma Voltajı (kV)	Uygulama Açısı (°)	Süre
Temizleme	3	10	15 dk
Temizleme	4	10	35 dk
Temizleme	5	7	15 dk
Parlatma	6	5	5 sa



Şekil 5. 4. İyon inceltme cihazı ile hazırlanan saf Mg numunelerin desikatör içerisinde muhafazasına ilişkin görüntü

5.2.4. Mg alaşımların optik mikroskop ve SEM numune hazırlığı

Çalışma kapsamında kullanılan Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımlarının numune hazırlıkları yapılacakları analize göre farklılık göstermektedir. Ancak her bir analizi gerçekleştirebilmek için uygun boyutlarda alaşımların her birinden metal testeresi yardımıyla numuneler alınmıştır. Numunelerin optik mikroskop ve taramalı elektron mikroskopu (SEM) analizleri için numuneler öncelikle soğuk kalıba alınmışlardır. Soğuk kalıba alınan numuneler ilk olarak sırasıyla 800, 1000, 1200 ve 2000 numaralı SiC zımparalar ile zımparalanmışlardır. Bu işlemi takiben yüzeyi en uygun hale getirebilme için parlatma işlemi uygulanmıştır. Burada sırasıyla 3 μm ve 1 μm 'lik elmas süspansiyonlar ile uygun çuhalar kullanılmıştır. Parlatma işleminde kullanılan Struers Tegra Pol-25 cihazına ait görsel Şekil 5.5'te verilmiştir.



Şekil 5. 5. Numunelerin parlatma aşamasında kullanılan cihaza ait görsel

Parlatma işleminin akabinde optik mikroskop altında numunelere ait tane sınırları ve ikincil fazları görüntüleyebilmek için numuneler dağlama işlemine tabi tutulmuştur. Dağlama işlemi daldırma suretiyle yapılarak her bir numune için 5 s olarak yapılmıştır. İşlem sonrasında numune yüzeyi saf su ve etil alkol ile temizlenmiştir. Kullanılan dağlayıcının içeriği Tablo 5.2'de verilmiştir.

Tablo 5.2. *Alaşımların dađlanmasında kullanılan dađlayıcı solüsyonun içeriđi*

Kullanılan Bileşim	Miktar
Pikrik asit	6 g
Asetik asit	5 ml
Etanol	150 ml
Saf su	11 ml

5.2.5. Alaşımlı numunelerin KPFM analizine hazırlanması

Kesim işlemi yapılan alaşım numunelerinin KPFM işlemine hazırlama aşaması, saf Mg’de olduđu gibi Şekil 5.3’te görseli verilen iyon inceltme cihazı ile yapılmıştır. Alaşım numunelerin boyutları daha büyük olmasından dolayı uygulama parametreleri saf Mg’ye göre farklı olarak ayarlanmıştır. Tablo 5.3’te alaşımlara uygulanan parametreler verilmiştir.

Tablo 5. 3. *Alaşımlı Mg numuneler için iyon inceltme cihazında sırasıyla kullanılan parametreler*

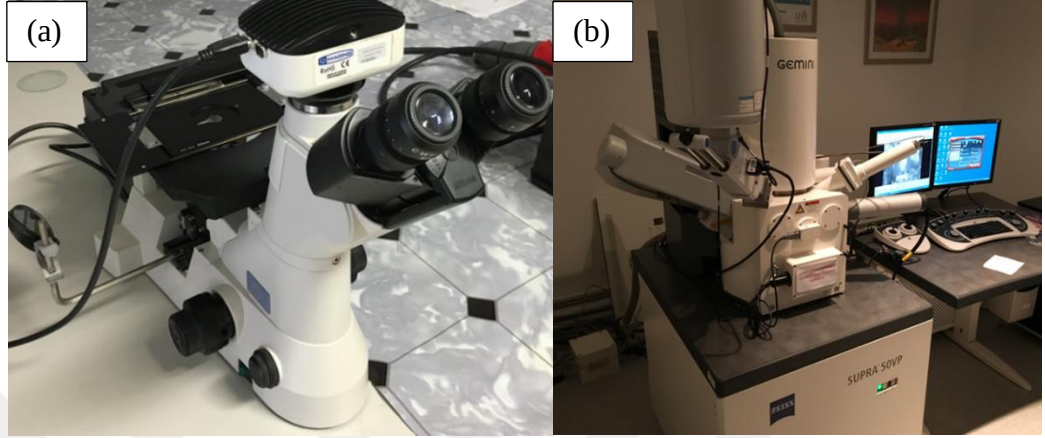
İşlem Adı	Hızlandırma Voltajı (kV)	Uygulama Açısı (°)	Süre
Temizleme	3	10	15 dk
Temizleme	4	10	35 dk
Temizleme	5	7	15 dk
Parlatma	6	5	10 sa

5.3. Analizler

5.3.1 Alaşımların optik mikroskop ve SEM analizleri

Alaşımların optik mikroskop görüntüleri NİKON Eclipse MA100 marka mikroskop ile alınmış, SEM (BSE-EDS) analizleri ise ZEISS Supra 50VP ile yapılmıştır. SEM-BSE analizlerinde 25 kV hızlandırma voltajı uygulanarak analizler gerçekleştirilmiştir. Kullanılan mikroskopların görüntüleri Şekil 5.6’da verilmiştir. EDS analizlerinde 8 mm çalışma uzaklığında 20 kV hızlandırma voltajında BSE görüntüleri kullanılmıştır. Her

iki cihazda Eskişehir Teknik Üniversitesi Malzeme Bilimi ve Müh. bünyesinde bulunmaktadır.



Şekil 5. 6. Tez kapsamında kullanılan a) optik mikroskop ve b) SEM'e ait görseller

5.3.2. RFDA analizleri

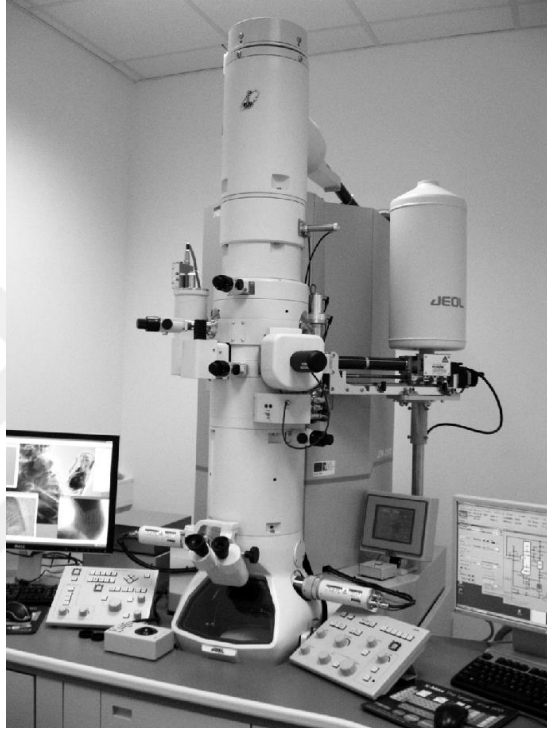
Uygun boyutlara getirilen alaşım numunelerin elastisite modülleri ve sönümleme kapasiteleri (damping) IMCE marka RFDA cihazıyla gerçekleştirilmiştir. Cihaz Muğla Sıtkı Koçman Üniversitesi Metalurji ve Malzeme Müh. Bölümü bünyesinde bulunmaktadır. Cihaza ait görsel Şekil 5.7'de verilmiştir.



Şekil 5. 7. RFDA cihazına ait görsel

5.3.3. TEM analizleri

Saf Mg numunelerin kristalografik oryantasyonlarının belirlenmesi için seçilmiş alan difraksiyon desenleri Eskişehir Teknik Üniversitesi Malzeme Bilimi ve Müh. Bünyesinde bulunan JEOL-JEM2100F TEM ile gerçekleştirilmiştir. Cihaza ait görsel Şekil 5.8’de verilmiştir.

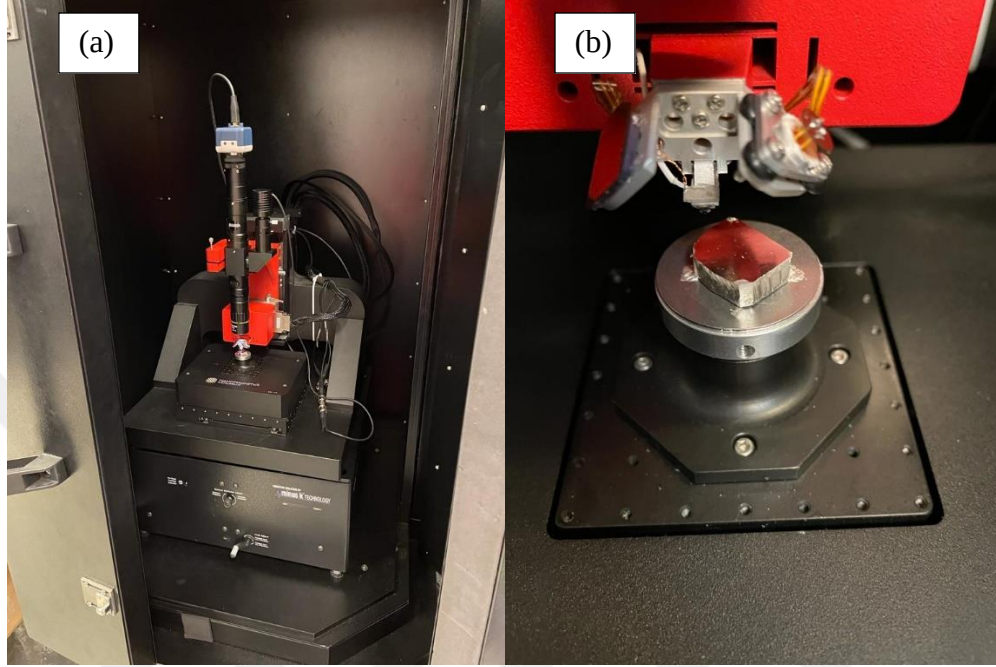


Şekil 5. 8. ESTÜ Mal. Bil. Ve Müh. Bölümünde kullanılan TEM

5.3.4. KPFM analizleri

Bu doktora tezi kapsamında saf Mg’lerin ve alaşımların iş fonksiyonu değerleri ODTÜ Mikro Elektronik Mekanik Araştırma ve Uygulama Merkezinde bulunan NanoManyetik adlı firmada gerçekleştirilmiştir. Kendi üretimleri olan NanoManyetik-hpAFM cihazının KPFM modülü ile ölçümler yapılmıştır. Ölçüm parametresi olarak AC Amplitude (Vpp):-0.3 V olarak kullanılmıştır. Saf Mg numuneler için tarama alanı: 2x2 μm ve tarama hızı: 2 $\mu\text{m}/\text{sn}$ olarak yapılırken alaşım halindeki Mg numuneler için tarama alanı: 10x10 μm ve tarama hızı: 5 $\mu\text{m}/\text{sn}$ olarak yapılmıştır. Buradaki farkın sebebi saf Mg numunelerde kompozisyonel açıdan homojen olması sebebiyle daha ufak bir alan

yeterli olacağı düşünülmüştür. Çalışma kapsamında KPFM ölçümlerinin yapıldığı cihaza ait görsel Şekil 5.9'da verilmiştir.



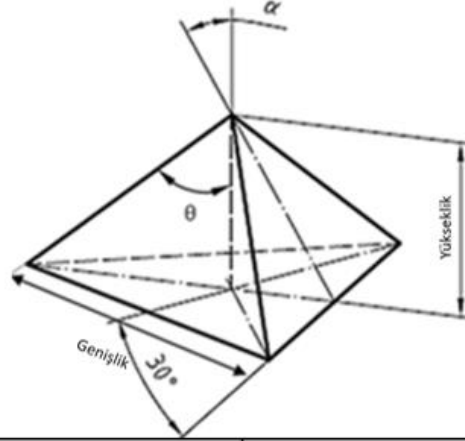
Şekil 5. 9. KPFM analizlerinin yapıldığı cihaza ait görseller. a) hpAFM cihazına ait genel görünüm, b) Mg-Ba numunesinin yerleştirilmiş haldeki görünümü.

5.3.5. Nanoindentasyon analizleri

Tez kapsamında araştırılan Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımlarının mekanik özelliklerinin belirlenmesi ile kısa mesafe düzenin varlığının değerlendirilmesi amacıyla nanoindentasyon testleri TÜBİTAK MAM Malzeme Enstitüsü bünyesinde bulunan Bruker-Hysitron TI 950 Triboindenter (Şekil 5.10) cihazı ile gerçekleştirilmiştir. Test öncesi numunelere metalografik işlemler uygulanmıştır. İlk olarak 800, 1000, 1200 ve 2000 grid SiC zımparalar ile işleme tabi tutulmuş; akabinde 3 ve 1 μm 'lik elmas solüsyonlar ile parlatma işlemi yapılmıştır. Ayrıca numunelere dağlama işlemi uygulanmamıştır. Nanoindentasyon işleminde Berkovich elmas piramit indent (Şekil 5.11) kullanılmıştır. Yöntem olarak yük kontrollü mod tercih edilmiştir.



Şekil 5. 10. Nanoindentasyon testlerinde kullanılan Bruker-Hysitron TI 950 Triboindenter cihazına ait görsel.



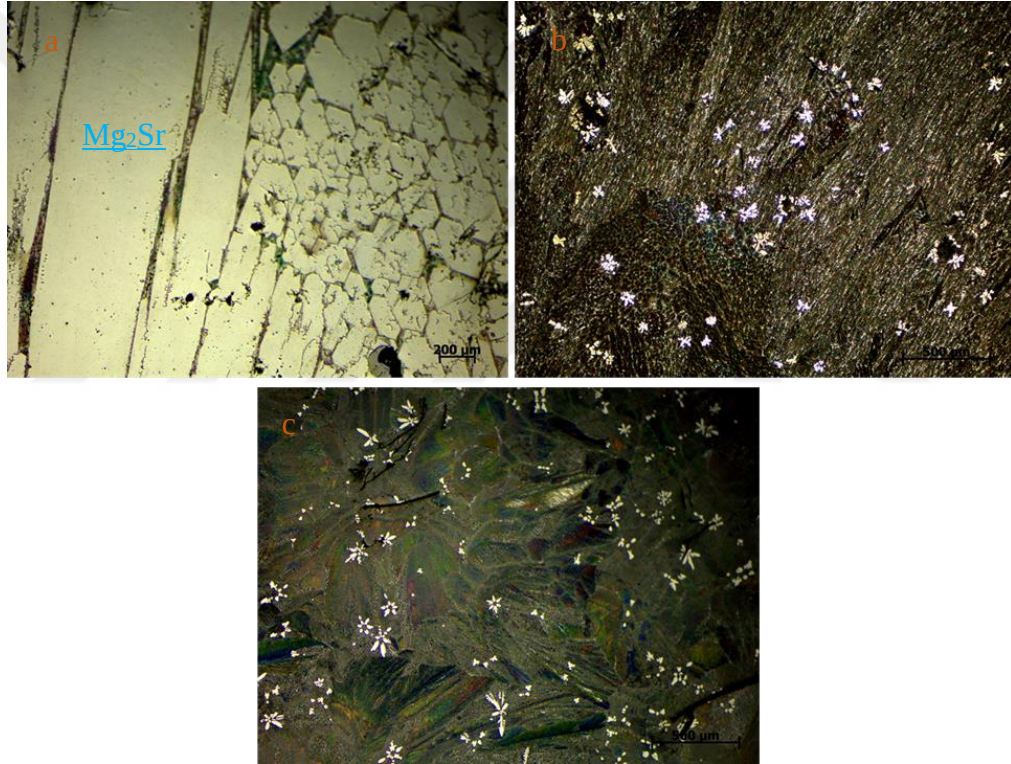
α	$63,5^{\circ}$
θ	$76,9^{\circ}$
Uç çapı	200 nm
Yükseklik	1 μm
Taban genişliği	7,52 μm

Şekil 5. 11. Nanoindentasyon testlerinde kullanılan Berkovich uca ait görsel ve teknik özelliklerine ait görsel.

6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

6.1. Numunelerin Optik Mikroskop ve SEM Analizleri

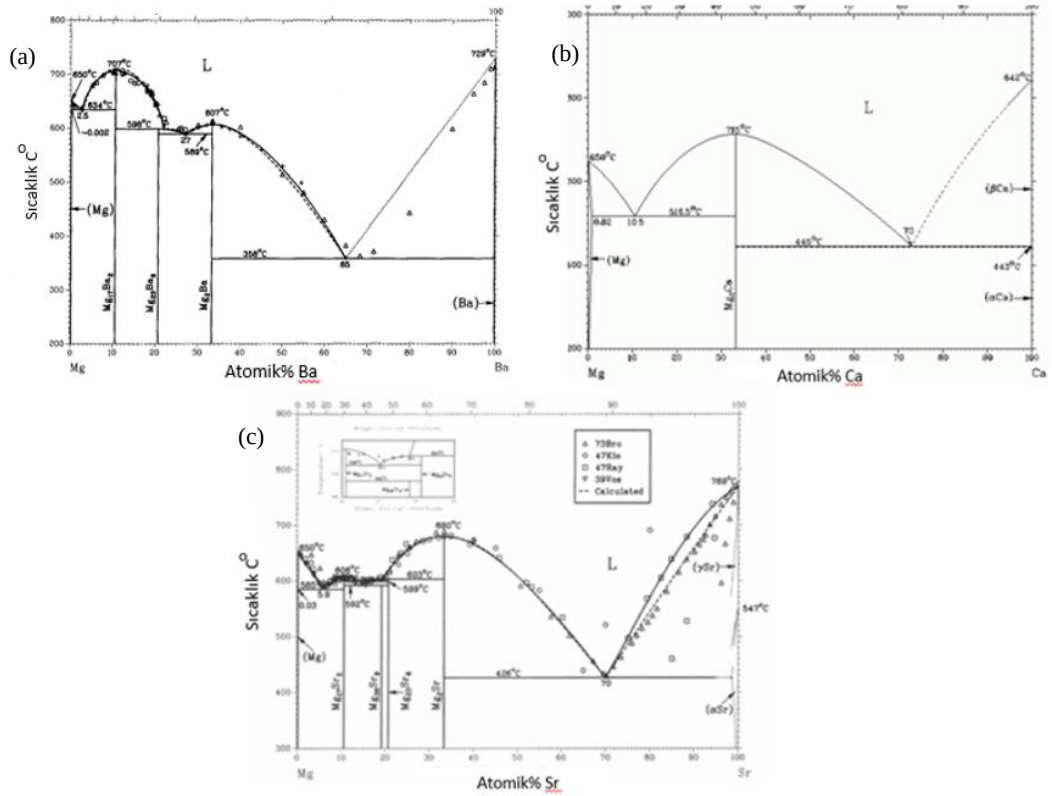
Bu tez çalışmasında kullanılan Mg-Ba(%10), Mg-Ca(%15) ve Mg-Sr(25%) alaşımları üzerinden İF ile İHE'nin deneysel olarak izlenip izlenemeyeceği ve bu ölçümlerin nanoindentasyon mekanik ölçümleri korelasyonu amaçlanmıştır. İlk adım olarak numuneler üzerinde optik mikroskop ve SEM analizleri gerçekleştirilmiştir. Yapılan optik mikroskop çalışması neticesinde alınan görseller Şekil 6.1 (a-c)'de verilmiştir.



Şekil 6. 1. Çalışmada kullanılan alaşımlara ait optik mikroskop görüntüleri a) Mg-Sr, b) Mg-Ba ve c) Mg-Ca

Burada her bir alaşımın döküm koşullarında olduğu bilinmelidir. Şekil 6.1 (a)'da verilen Mg-Sr alaşımına ait mikroyapı diğer iki alaşıma göre farklılık göstermektedir. Mg-Sr alaşımı iri taneli intermetalik ve bunların arasında kalan ötektik bölgelerden ibarettir. Ötektik yapının bileşeni olan α -Mg'nin denge diyagramına bakıldığında, yüksek sıcaklıktaki son derece sınırlı çözünürlük nedeniyle, ekstrem ölçekte seyreltik bir katı

çözelti olması olasıdır. Diğer iki alaşımın mikroyapısında ise ötektik yapı içerisinde dentritik oluşumlar göze çarpmaktadır. İlgili denge diyagramları (Şekil 6.2) incelendiğinde bu dendritlerin α -Mg fazı olduğunu söylemek mümkündür. Mg-Ba denge diyagramına bakıldığında çözünürlüğün olmaması nedeniyle, bu alaşımda görülen saf α -Mg dendritlerin oluşumu beklenmemektedir. Ötektik morfoloji içerisindeki α -Mg ise yine denge diyagramı esas alındığında saf Mg olmak zorundadır. Ancak, dendritik adacıkların mevcudiyeti hesaplama ile oluşturulmuş denge diyagramlarındakinin aksine, en azından yüksek sıcaklıkta sınırlı bir katı çözünürlüğü işaret etmektedir. Bu nedenle ötektik komponent olan α -Mg'nin de bu durumda ne derece saf olduğu sorgulanır hale gelmektedir.

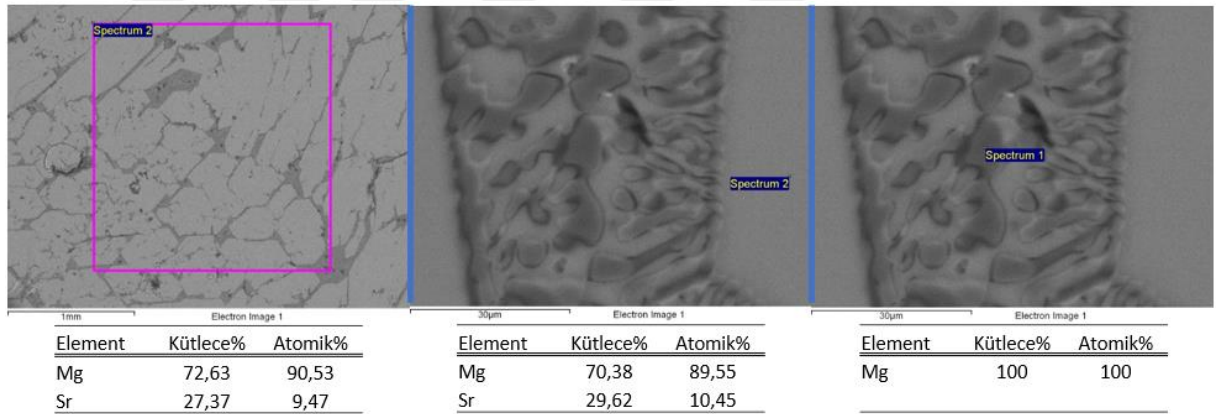


Şekil 6. 2. (a)Mg-Ba, (b)Mg-Ca ve (c)Mg-Sr'a ait faz diyagramları [97,98]

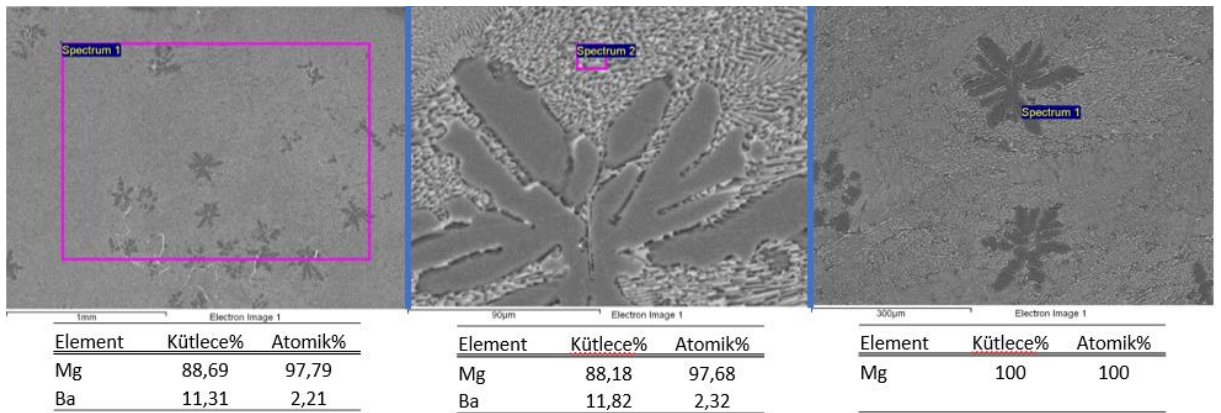
Mg-Ca sistemine bakıldığında sınırlı ancak varlığı kesin bir çözünürlük söz konusudur. Dolayısıyla, bu alaşımda görülen dendritik adacıklar Ca içeren seyreltik α -Mg olmak durumundadır. Sınırlı çözünürlük nedeniyle ötektik komponent olan α -Mg fazının da seyreltik bir katı çözelti olması gerektiği anlaşılmaktadır. Mikroyapının geri

kalanı ise, Mg-Ba ve Mg-Ca alaşımlarında intermetalik bileşikler ve bu intermetalikler ile α -Mg nin oluşturduğu ötektik yapılardan oluşmuştur. Denge diyagramlarından görüleceği üzere Mg içerisinde en yüksek kati çözünürlüğe sahip olan element Ca'dır. Sr eser miktarlar (trace amount) olarak kabul edilecek çözünürlük göstermekte ve Ba elementinin ise hiç çözünürlüğe sahip olmadığı anlaşılmaktadır.

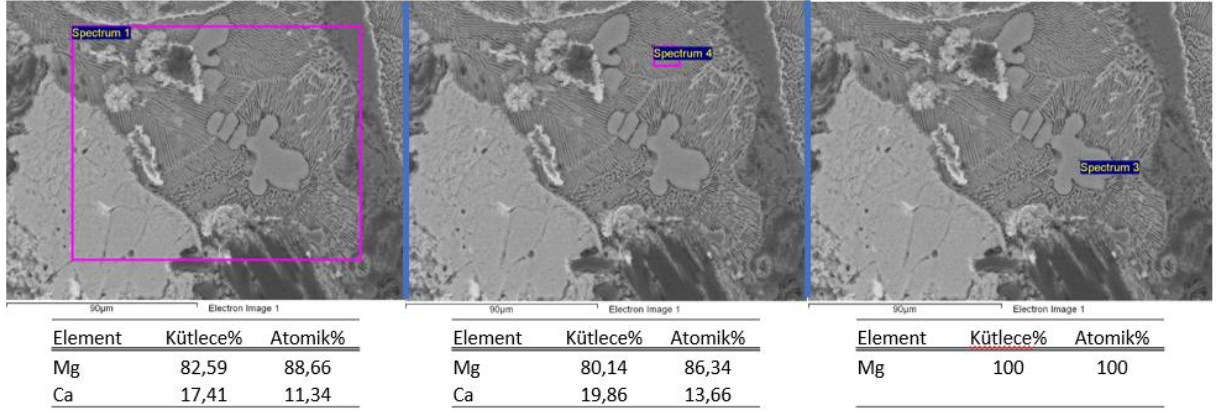
Alaşımların SEM incelemeleri, BSE ve EDS dedektörleri kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Elde edilen sonuçlar Şekil 6.3-Şekil 6.5'te verilmiştir. Alaşımların EDS'den elde edilen kompozisyonel veriler ilgili şeklin altında paylaşılmıştır. Burada her alaşım için genel kompozisyon ve bölgesel analizlerin yapılması amaçlanmıştır.



Şekil 6. 3. Mg-Sr alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları

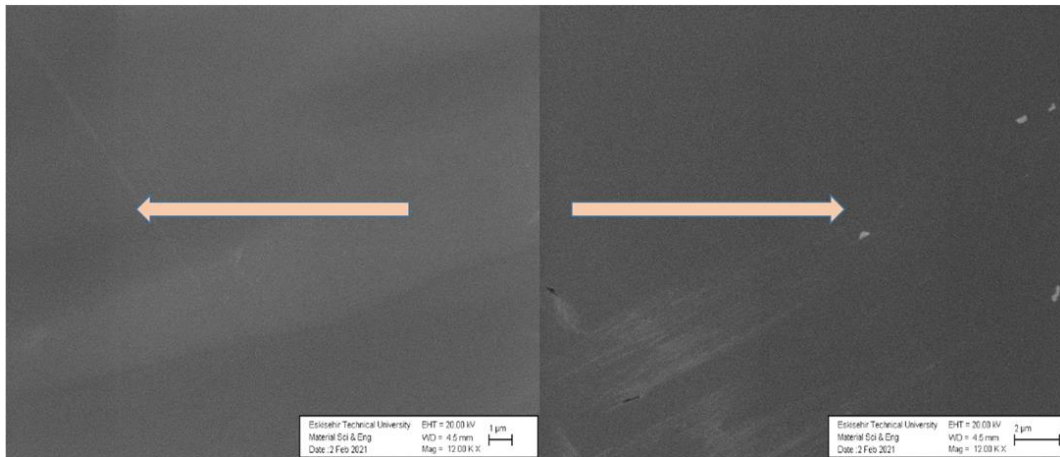


Şekil 6. 4. Mg-Ba alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları



Şekil 6. 5. Mg-Ca alaşımına ait SEM-BSE görüntüleri ve ilgili bölgelere ait EDS analiz sonuçları

Çalışma kapsamında incelenen saf Mg numunelere tek kristal yapıda oldukları için herhangi bir optik mikroskop çalışması gerçekleştirilmemiştir. Ancak içerisinde bulunan empürite atomlarının yaratmış olduğu çok az kontrast farkı SEM-In lens tekniği ile belirlenerek empürite atomlarının varlığına işaret edilmiştir. Buradaki elementler safsızlık olarak nitelendirilen ve çok az miktarda yapı içerisinde bulunan elementlerdir. Bu sebeple kontrastta minimal değişime sebep olmuşlardır. Bu empürite atomlarının belirli bir kontrast gradyanına sahip olmaları döküm ile üretilmesinden kaynaklanmaktadır ve tipik bir göbeklenme (coring) segregasyonudur [99,100]. Saf Mg numunelerden elde edilen SEM-In lens görüntüleri Şekil 6.6'da verilmiştir. Görseller üzerindeki oklar kontrast farkına işaret etmektedir.



Şekil 6. 6. Saf Mg numunenin farklı bölgelerinden alınmış SEM-In lens görüntüleri

6.2. Saf Mg Numunenin Spektroskopi Analizi

Numunenin optik emisyon spektroskopik analizinin sonuçları Tablo 6.1’de verilmiştir. Bir önceki bölümde bahsedilen “coring” etkisine yapı içerisinde var olan bu safsızlık elementleri sebep olmuştur. Görüldüğü üzere numuneler esasen pek çok safsızlık bulunduğu bir seyreltik sistemdir. Mg’nin buradaki her bir element ile farklı bir elektronegativite farkına bağlı olarak davranacağı aşıkardır. Empürite elementlerin bu açıdan varlığını ve dağılımlarını ileride KPFM analizi bölümünde iş fonksiyonu üzerinden değerlendirilecektir.

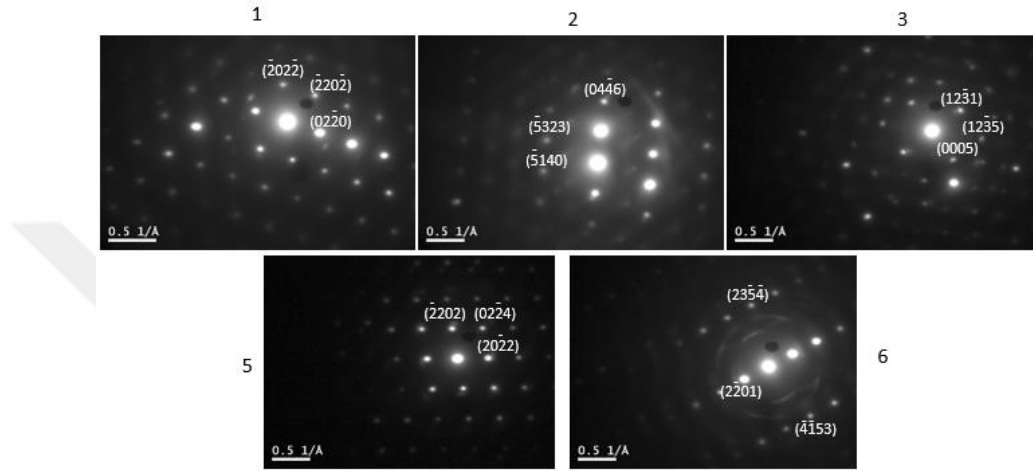
Tablo 6. 1. *Saf Mg numuneye ait spektroskopi analiz sonucu*

Ag Kons. [%]	Nd Kons. [%]	Ce Kons. [%]	Mn Kons. [%]	Ca Kons. [%]	Al Kons. [%]
<u><0.00010</u>	<u><0.0040</u>	<u><0.0040</u>	<u>0.019</u>	<u>0.0019</u>	<u>0.29</u>
Pb Kons. [%]	Fe Kons. [%]	Ni Kons. [%]	Zr Kons. [%]	Zn Kons. [%]	Cu Kons. [%]
<u>0.008</u>	<u>0.0081</u>	<u>0.0024</u>	<u><0.00100</u>	<u>0.0243</u>	<u>0.00099</u>
Th Kons. [%]	Be Kons. [%]	Cd Kons. [%]	Sn Kons. [%]	P Kons. [%]	Si Kons. [%]
<u>0.115</u>	<u><0.00005</u>	<u>0.0019</u>	<u>0.0016</u>	<u>0.00059</u>	<u>0.0171</u>
La Kons. [%]	Sr Kons. [%]	Pr Kons. [%]	Na Kons. [%]	Y Kons. [%]	Mg Kons. [%]
<u><0.00070</u>	<u><0.00100</u>	<u><0.0015</u>	<u>0.00066</u>	<u><0.0050</u>	<u>99.5</u>

6.3. Farklı Kristalografik Yönetime Sahip Saf Mg Tek Kristal Numunelerin TEM Analizi

Yapılan bu çalışma kapsamında saf Mg numune üzerinde bulunan 5 farklı taneden alınan örneklerin temsil ettikleri kristalografik oryantasyonun belirlenmesi için TEM-SAED analizleri gerçekleştirilmiştir. 5 adet numuneye ait SAED elektron difraksiyon görüntüleri Şekil 6.7’de verilmiştir. CrysTBox programı ile difraksiyon indeksleme

sonuçlarına bağlı olarak her bir numunenin belirlenen zone eksenleri Tablo 6.2’de verilmiştir [113]. Elde edilen sonuçlar incelendiğinde alınan her bir numunenin farklı bir kristalografik oryantasyonu temsil ettiği görülmektedir. Malzemenin sahip olduğu oryantasyon, özellikle Mg gibi anizotropik özellikler sergileyen malzemeler için oldukça kritiktir. Kristalografik oryantasyonun da dikkate alındığı KPFM analizlerine ileride değinilecektir.



Şekil 6. 7. Saf Mg numunelere (1, 2, 3, 5, 6) ait seçilmiş alan difraksiyon desenleri

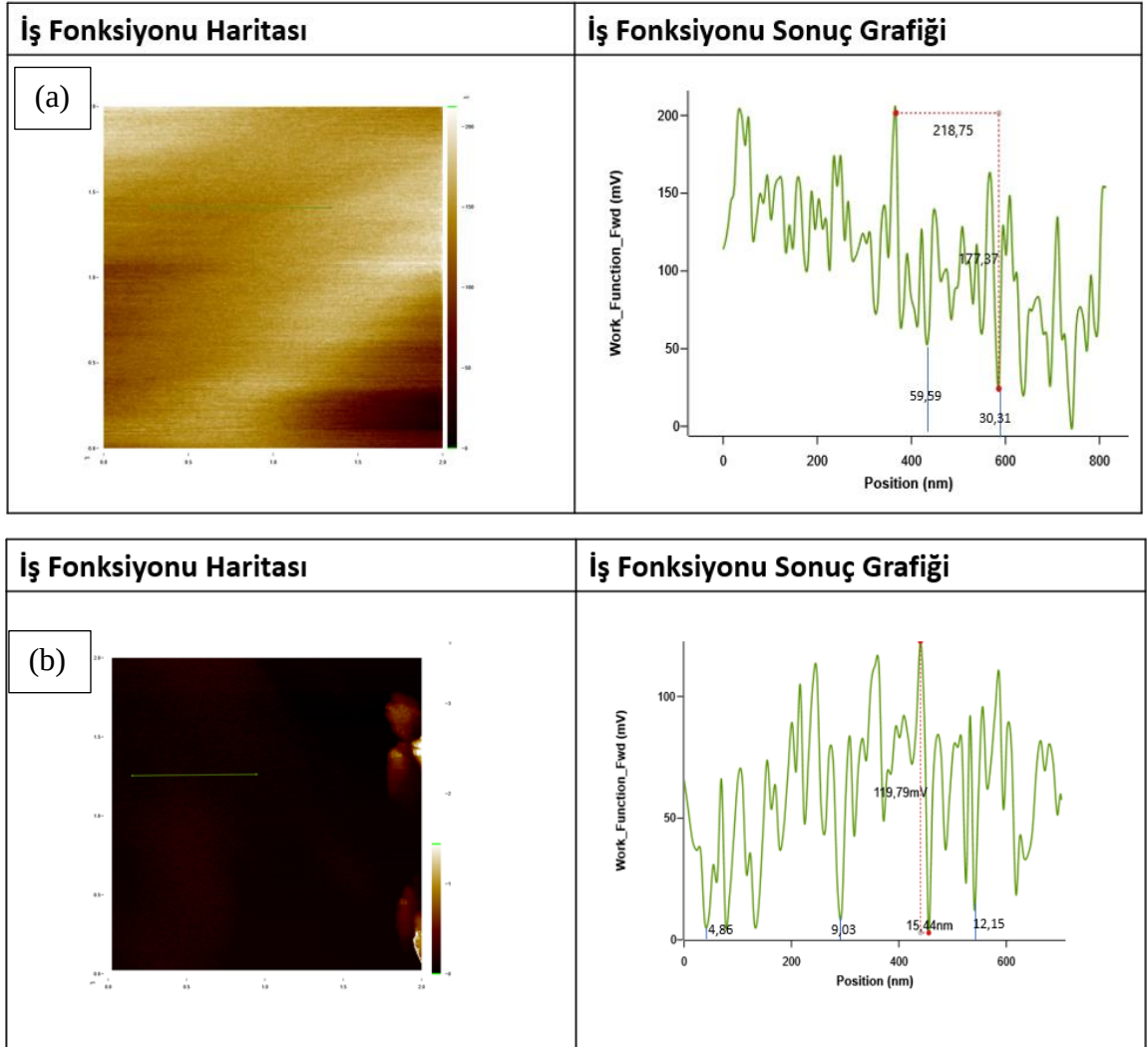
Tablo 6. 2. Saf Mg numunelerin TEM SAED metoduyla belirlenen yüzey normalleri (kristalografik yönüne zone eksenleri)

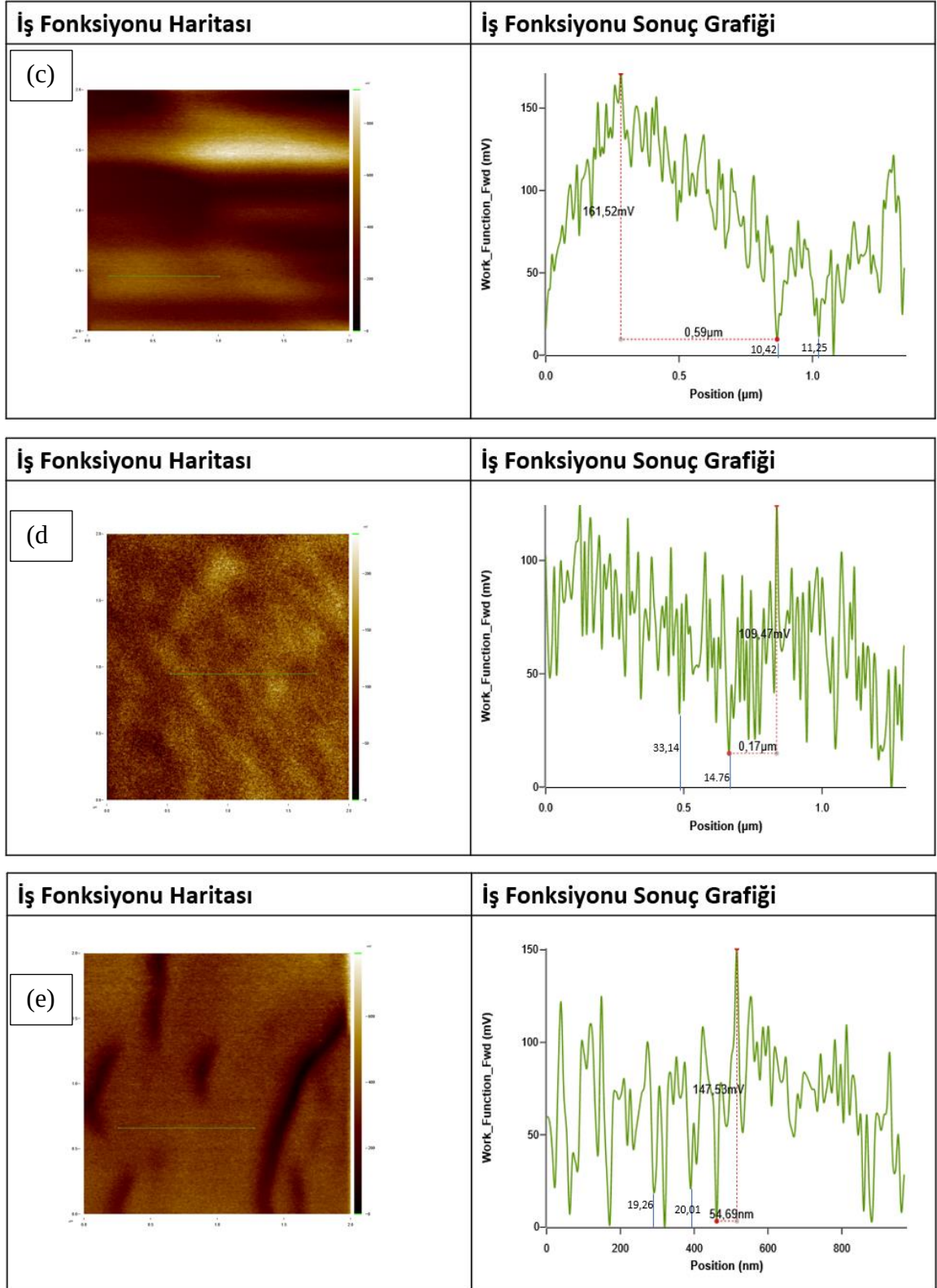
Numune No.	Yüzey Normali [hkil]	KPFM Ölçümleri Yapılan Yüzeylerin İndisleri
1	[-1-121]	(1102)
2	[-5-163]	(1411)
3	[2-1-10]	(1110)
5	[-1-231]	(2111)
6	[12-32]	(-2123)

6.4. Saf Mg Numunelerin KPFM Analizi

KPFM ölçümlerinde herhangi bir fazın mutlak iş fonksiyonu değeri ölçülmemektedir. Taranılan alanda iki bölge/nokta arasındaki potansiyel fark ne kadar büyükse, okunan maksimum iş fonksiyonu değeri o derece büyük olmaktadır.

Her biri farklı kristalografik yönelimi temsil eden 5 adet saf Mg tek kristal numuneler AFM cihazının KPFM modülü ile iş fonksiyonu değerleri belirlenerek analiz edilmişlerdir. Buradaki amaç farklı yönelimlere sahip numunelerin kristalografik oryantasyonları ile sahip oldukları iş fonksiyonu değerleri arasında bir fark tespit edilemeyeceğinin görülmesidir. Şekil 6.8 (a-e)'de KPFM ile ölçümü yapılan ilgili numunenin iş fonksiyonu haritası ve ölçüm grafiği verilmiştir. Tablo 6.4'te saf Mg'nin kristalografik yönlerine bağlı ölçtüğümüz iş fonksiyonu değerleri gösterilmiştir.





Şekil 6. 8. Saf Mg tek kristal numunelere ait KPFM ile ölçüm sonucunda elde edilen iş fonksiyonu haritası ve iş fonksiyonu sonuç grafiği (a) Numune 1, (b) Numune 2, (c) Numune 3, (d) Numune 5 ve (e) Numune 6.

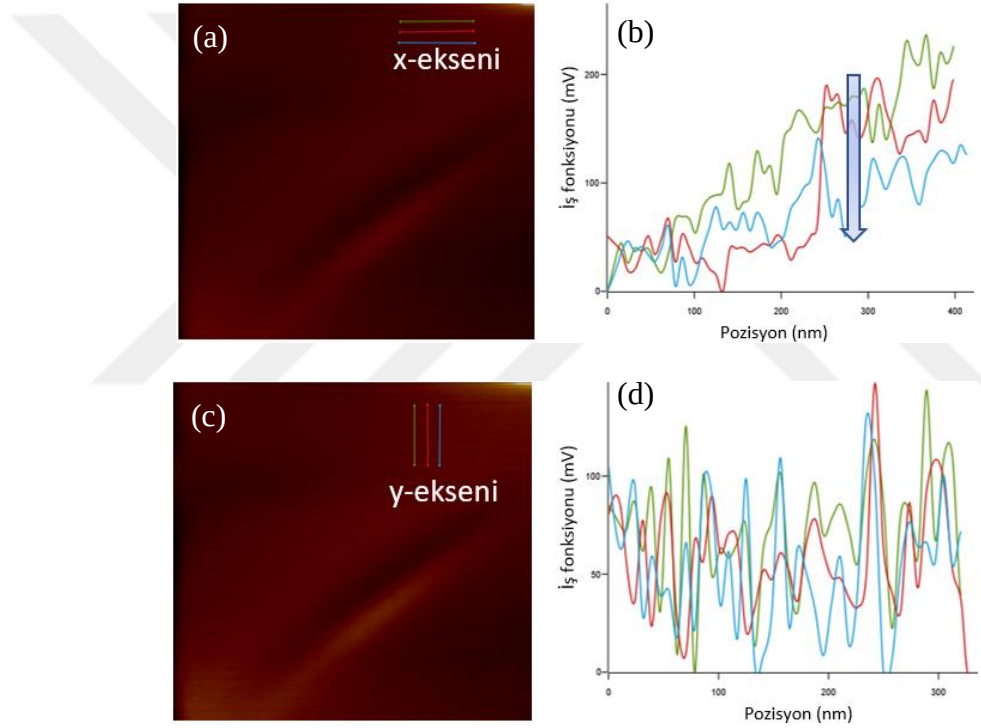
Tablo 6. 3. *Saf Mg numunelerin kristalografik yönlerine bağlı iş fonksiyonu değerleri*

Numune No.	Yüzey Normalinin Kristalografik İndisleri [hkil]	Ölçülen İş Fonksiyonu (mV)
1	[1-21-3]	177.37
2	[11-21]	119.79
3	[2-1-10]	161.52
5	[01-11]	109.47
6	[12-32]	147.43

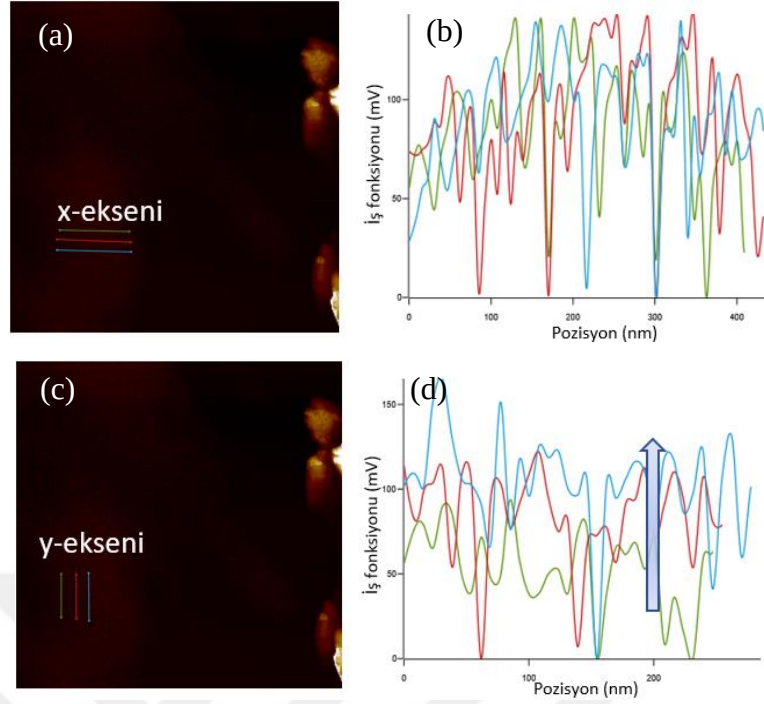
Tablo 6.3'te verilen değerlerden de görüldüğü üzere numunenin kristalografik yönüne bağlı olarak iş fonksiyonu değerlerinde beklenen farklılaşma vardır. 177.37 mV ile en yüksek iş fonksiyonu değerine [121-3] yönelimine sahip 1 numaralı numune sahipken, 109.47 mV ile en düşük iş fonksiyonu değerine [01-10] yönelime sahip 5 numaralı numune sahiptir. Empürite konsantrasyonu kaynaklı farklılaşmalar ayrıca farklı KPFM analizleri ile değerlendirilmiştir. Bu noktada yapılan analizlere ait görseller Şekil 6.9 - Şekil 6.11'de paylaşılmıştır.

KPFM sonuçları incelendiğinde her bir numune için aynı bölgeyi kapsayacak şekilde x ve y eksenlerinde ölçümler alınmıştır. Numune 1'e ait sonuçlara göre y eksenini üzerinden yapılan analizde empürite atomlarının belirgin bir etkisi olmayıp her bir adımda benzer bir iş fonksiyonu profili elde edilmiştir. Ancak x eksenini üzerinden alınan ölçümlerde yeşil ölçüm profilinden mavi ölçüm profiline doğru empürite atomları kaynaklı iş fonksiyonu değerinde belirgin bir azalma görülmektedir. 2 numaralı numuneye ait iş fonksiyonu verileri incelendiğinde, 1 numaralı numunenin aksine farklılaşma hem y eksenini üzerinden alınan ölçümlerde görülmüş, hem de yeşil ölçüm profilinden mavi ölçüm profiline doğru iş fonksiyonu değerinde bir artış gözlemlenmiştir.

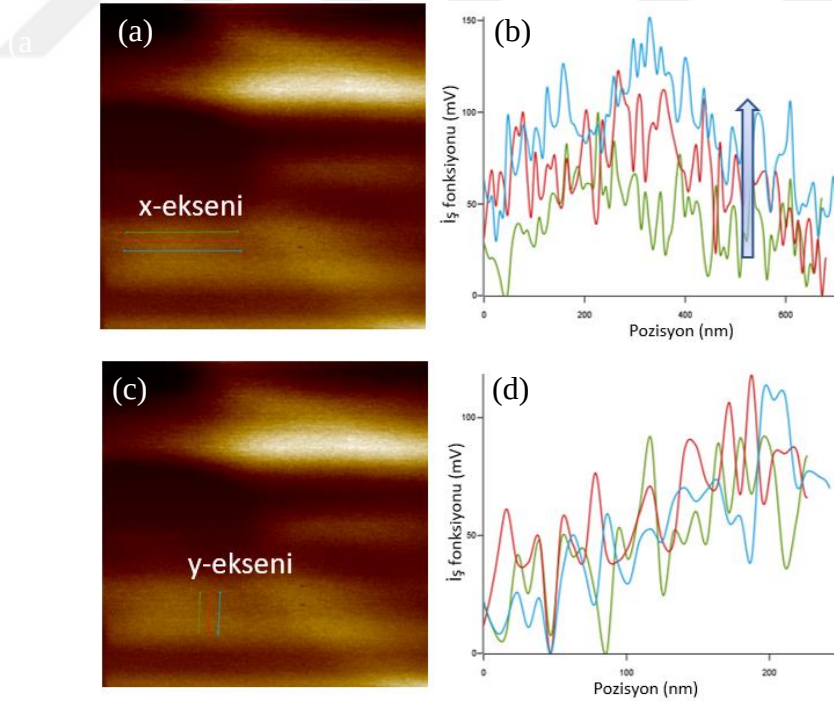
Bu numune için x ekseninde alınan ış fonksiyonu ölçümlerinde empürite atomları kaynaklı belirgin bir etki saptanmamıştır. Aynı şekilde empürite atomlarının varlığı ve etkileri numune 3 değerlendirildiğinde, numune 1 ile benzer şekilde x ekseninde alınan ölçümlerde farklılaşma belirlenmiştir. Ancak burada 1 numaralı numunenin aksine yeşil ölçüm profilinden mavi ölçüm profiline empürite atomları kaynaklı bir artış gözlemlenmiştir. Numune 3 için y ekseninde alınan ölçümlerde ise belirgin bir farklılık göze çarpmamıştır.



Şekil 6. 9. Numune 1'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen ış fonksiyonu değişim grafiği (a-c ış fonksiyonu haritası, b-d ış fonksiyonu ölçüm grafiği)



Şekil 6. 10. Numune 2'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen ış fonksiyonu değişim grafiği (a-c ış fonksiyonu haritası, b-d ış fonksiyonu ölçüm grafiği).



Şekil 6. 11. Numune 3'e ait x ve y eksenlerinde alınan ölçümlerin görseli ve elde edilen ış fonksiyonu değişim grafiği (a-c ış fonksiyonu haritası, b-d ış fonksiyonu ölçüm grafiği).

Metalik malzemeler için özellikleri belirleyen parametre sahip oldukları serbest elektron yoğunluğu dağılımıdır. Serbest elektron yoğunluğu dağılımı (free-electron density distribution) alaşım elementlerinin varlığı ile değişebildiği gibi, saf bir kristalde atom yoğunluğunun kristal yönüne bağlı olarak değişimi ile de farklılık gösterecektir. Yapılan çalışmada empürite atomların etkisinin açıklaması “elektronik metalurji” kavramına dayanmaktadır. Bu kavrama göre her bir elementin sahip olduğu elektronegativite değeri ve atomik çaplarına bağlı olarak ortaya çıkan elektronik konfigürasyon, malzemenin bölgesel veya tüm özelliklerini belirlemektedir. Bu açıdan olaya yaklaşıldığında malzemenin sahip olduğu serbest elektron yoğunluğu dağılımı numune içerisinde var olan empürite atomları tarafından değişime uğrayacaktır. Bunun bir sonucu olarak bizim numunelerimizde de görüldüğü gibi iş fonksiyonu değerinde değişimler gözlemlenecektir [70,101,102]. Ayrıca yaptığımız analizler göstermektedir ki kristalografik oryantasyona bağlı olarak empürite atomlarının oturduğu konumlardaki değişimler KPFM analizleri ile belirlenebilmektedir.

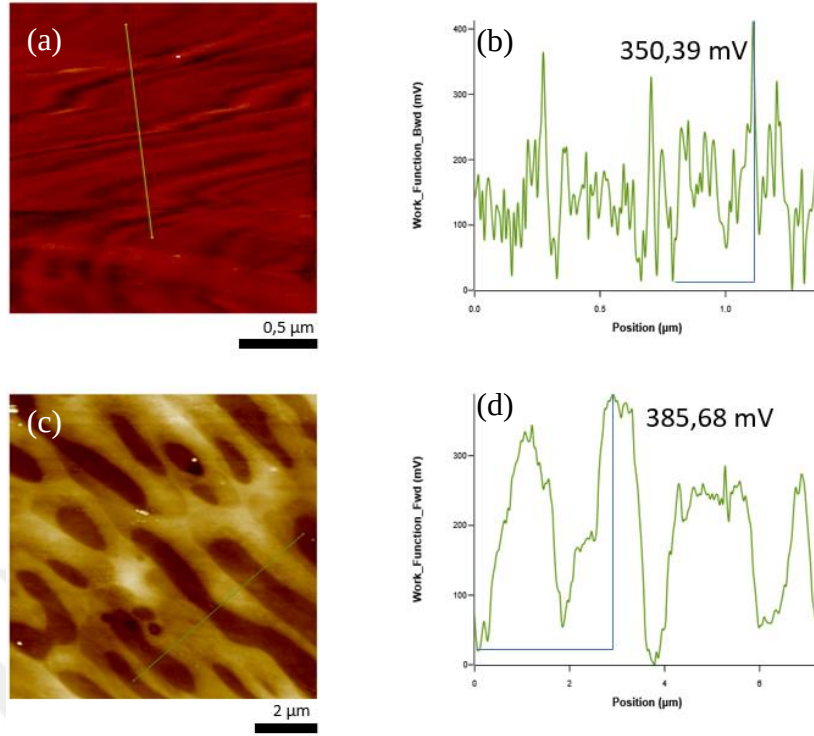
Burada incelenen saf magnezyum numuneler esasen empüriteler nedeniyle seyreltik sistemlerdir. Bu nedenle iş fonksiyonları değerleri bu elementlerin Mg ile olan elektronegativite farkına bağlı olarak yaratacağı etkileri barındıracaktır. Bunun etkisi, döküm yapısının getirdiği kompozisyon gradyanında her bir tek kristal oryantasyonu için yüzey üzerinde mesafe ile gözlemlenmek durumundadır. Nitekim yapılan KPFM ölçümleri her bir α -Mg kristali üzerinde mesafeyle değişen değişimlerle bunu ortaya koymaktadır. KPFM ölçümlerinin farklı oryantasyona sahip numunelerdeki iş fonksiyonu değerlerinin birbirleriyle kıyaslanması ise, empürite konsantrasyonlarının kristalin yönüne bağlı değiştiğini göstermiştir. Her bir tek kristalin iş fonksiyonu değerlerinin, saf magnezyumun en azından teorik olarak hesaplanmış aynı kristal yönlerindeki iş fonksiyonu değerleri ile kıyaslanması da anlamlı bir yaklaşım olabilirdi. Ne yazık ki, literatürde bu tür teorik hesap değerlerine rastlanmamıştır. Bu nedenle farklı tek kristaller üzerinde yapmış olduğumuz ölçümler arasındaki iş fonksiyonu farklılıklarının ne kadarının sadece o yöndeki atom yoğunluklarının farkından kaynaklandığını ve ne kadarının empüritelerin Mg ile elektronegativite kaynaklı olarak yarattığı olası iş fonksiyonu katkısı olduğunu değerlendirmek mümkün olmamıştır. Ancak görünen odur ki, empürite konsantrasyonun kristal yönüne bağlı olarak değiştiği de KPFM ile tespit edilebilmektedir. Bu gözlemlere dayanarak, bilinen empürite konsantrasyonları ile

kalibre edildiği taktirde, KPFM ölçümleri, standart alaşımlarda safsızlık miktarlarının tespiti için bir yöntem olabilir.

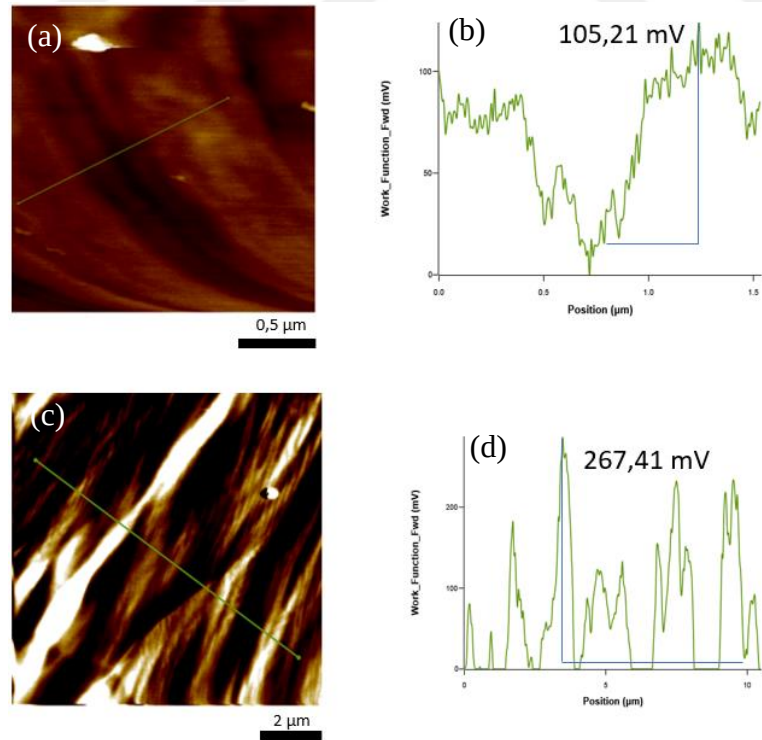
6.5. Alaşımlı Numunelerin KPFM Analizleri ve İş Fonksiyonunun İstif Hatası Enerjisi İle İlişkilendirilmesi

Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımlarının ötektik bölge iş fonksiyonu ölçümleri KPFM çalışması ile belirlenmiştir. Her bir alaşım sisteminin ötektiği içerisinde, intermetalik ve α -Mg faz sınırı bölgelerinden alınmış iş fonksiyonu haritaları ve ölçümlere ait sonuç grafikleri Şekil 6.12 – Şekil 6.14’de verilmiştir. Analiz sonuçları Tablo 6.4’te verilmiştir. Bir KPFM iş fonksiyon haritası incelendiğinde aydınlık ve karanlık alanların varlığı görülmektedir. Alan ne kadar parlak ise iş fonksiyonu değerinin o kadar yüksek olduğu bilinmelidir. Başka bir deyişle, bir elektronu yüzeyden uzaklaştırmak için gereken enerji miktarı arttıkça parlaklık artmaktadır. Ötektik bölgelerden alınan ölçümler sonucunda iş fonksiyonu değerlerinin büyükten küçüğe sıralanmasının Mg-Ba, Mg-Sr ve Mg-Ca olduğu görülmektedir.

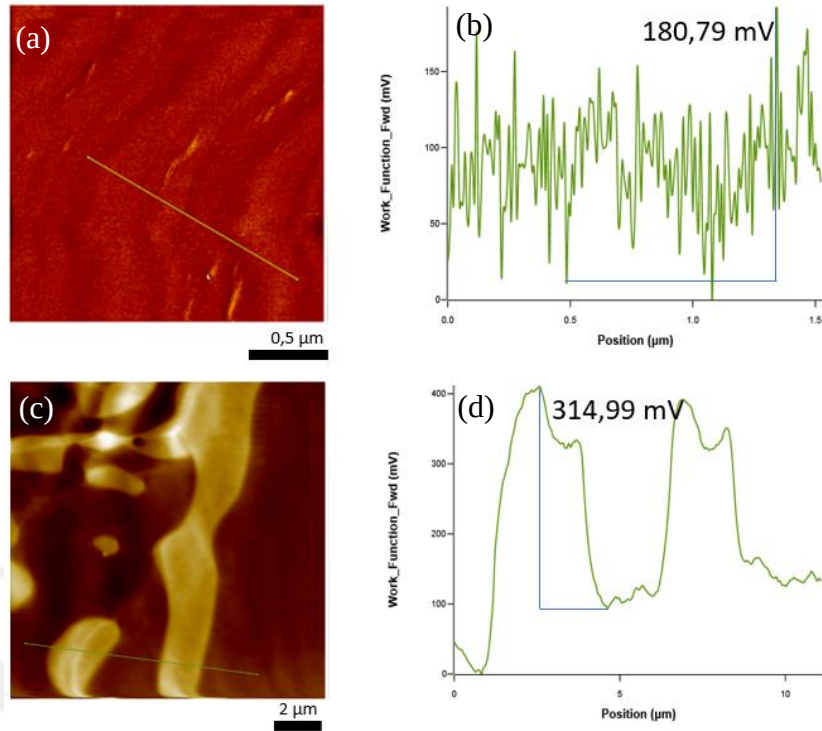
Numuneler desikatörde oksidasyona karşı korunmuş olmasına rağmen analiz sırasında ortam havasına maruz kalmışlardır. Numunelerin yüzeylerinde görülen parlak küçük tepeler bu dönemde oluşan oksitler veya kirlilik tepelikleridir. Her örnek özdeş koşullara maruz kaldığı için yüzey oksitleri kalınlığı ve bunların olası etkileri de aynı kabul edilmiş ve yorumlarda bu durumun göz ardı edilebileceği düşünülmüştür. Elbette elde edilen sonuçları etkileyen daha birçok parametre vardır. Örneğin, alaşımların ölçüldüğü tanenin kristalografik yönü gibi çok önemli kavramlar sonuçlarda farklılıklara neden olabilir. Ancak alaşımlardaki çalışma kapsamında elde edilen verilerin mutlak rakamlar olarak kullanılmasından ziyade kalitatif bir kıyas aracı olarak kullanılması hedeflenmiştir. Dolayısıyla, var olduğu düşünülen olası yan etkiler özdeş kabul edilmiş ve göz ardı edilmiştir.



Şekil 6. 12. *Mg-Ba alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d)*



Şekil 6. 13. *Mg-Ca alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d)*



Şekil 6. 14. Mg-Sr alaşımına ait iş fonksiyonu haritaları (a-c), ilgili bölgeler üzerinden alınan iş fonksiyonu ölçüm sonuç grafikleri (b-d)

Tablo 6. 4. KPFM ölçümü ile matris ve matris-Mg dendrit bölgelerinden elde edilen iş fonksiyonu değerleri

Alaşım Adı	Ölçüm Alanı	İş Fonksiyonu (mV)
Mg-Ba	2x2 μm^2	350,39
Mg-Ba	10x10 μm^2	385,68
Mg-Ca	2x2 μm^2	105,21
Mg-Ca	10x10 μm^2	267,41
Mg-Sr	2x2 μm^2	180,79
Mg-Sr	10x10 μm^2	314,99

6.6. Alaşımlı Numunelerin KPFM Ölçüm Sonuçlarının İHE İle Korelasyonu

Daha önce tartışıldığı üzere, metalik malzemelerin deformasyon davranışını belirleyen en temel kavram İHE seviyesidir [100,101–103]. Ancak deformasyon açısından çok önemli olan İHE'nin değeri, transmisyon elektron mikroskobu (TEM) veya

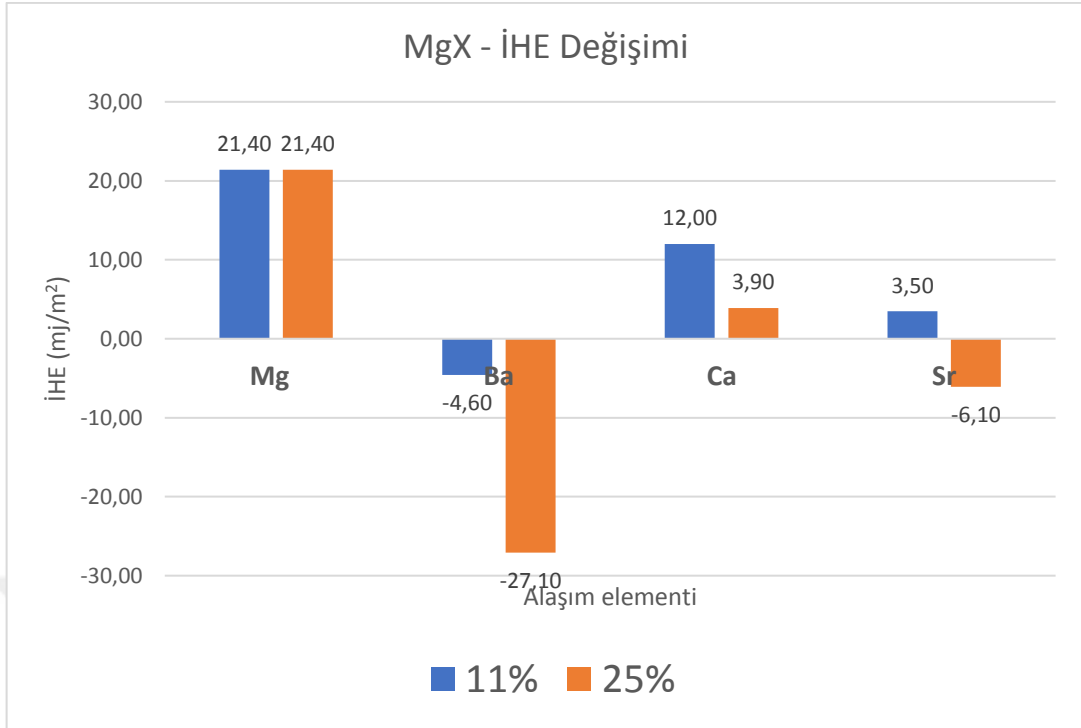
kuantum tabanlı *ab initio* hesaplamaları gibi zahmetli tekniklerle belirlenebilmektedir [103,107]. İHE seviyesini malzemenin elektronik yapısı belirlemektedir. Elektronların bu etkisine dayanarak, daha önce kuantum tabanlı *ab initio* yöntemiyle hesaplanan İHE enerjileri baz alınarak metalik malzemelerin iş fonksiyonu değerleri arasında korelasyon kuran çalışmalar mevcuttur [67,108,109]. Zhang ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada, incelediğimiz alaşımların %11 ve %25 konsantrasyonlarında alaşım elementleri içeren varyasyonları için *ab initio* yöntemlerle hesaplanan İHE değerleri belirlenmiş ve Tablo 6.5'te hesapladıkları bu değerler verilmiştir [110]. Verileri daha iyi anlamak için, her bir elementin alaşımın İHE değeri üzerindeki etkisi Tablo 6.6'da yüzde olarak ifade edilmiştir. Ayrıca, yüzde olarak ifade edilen veriler, ayrı alaşım konsantrasyonları için Şekil 6.15'te grafiksel olarak sunulmuştur.

Tablo 6. 5. *Mg, Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımları için hesaplanan SFE değerleri (konsantrasyon: %11-25) [110]*

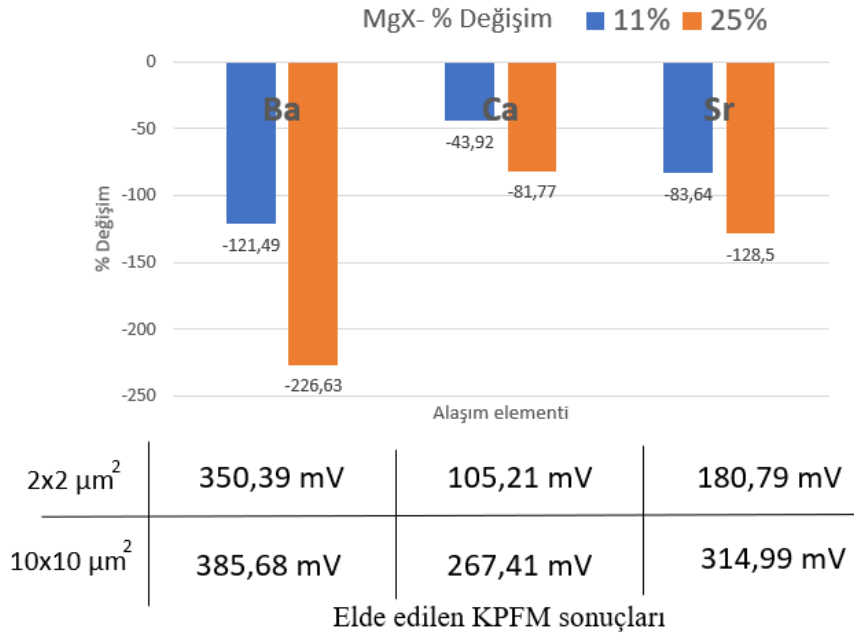
Mg ve Mg-X	İHE (mj/m ²)	
	11%	25%
Mg	21.40	21.40
Ba	-4.60	-27.10
Ca	12.00	3.90
Sr	3.50	-6.10

Tablo 6. 6. *Tablo 6.5'deki %11 ve %25 alaşım elementleri için Mg'nin İHE'sindeki yüzdede değişim*

Alaşım Mg-X	11%	25%
	% İHE Değişimi	
X=Ba	-121.5	-226.63
X=Ca	-43.92	-81.77
X=Sr	-83.64	-128.5



Şekil 6. 15. %11-%25 konsantrasyona bağlı alaşım elementlerinin SFE değişimi üzerindeki yüzdece etkisi ile iş fonksiyonu değişimi arasındaki ilişki [110]



Şekil 6. 16. %11-%25 konsantrasyona bağlı Ba, Ca ve Sr elementlerinin İHE üzerinde etkilerinin yüzdece değişimi ile yapılan KPFM ölçüm sonuçlarını bir arada gösteren grafik

Çalışma kapsamında incelenen her üç alaşım elementi de Mg'nin İHE'sinde düşüşe sebep olması literatürden görülmektedir. En yüksek azalmayı Ba elementi sağlarken, en düşük azalmayı Ca elementi sağlar. Bu elementlerin konsantrasyonlarının artmasıyla İHE'sindeki azalma miktarında bir artış olduğu da açıkça görülmektedir. Ba elementinin yarattığı negatif İHE değerinin anlamı, dislokasyonların tamamen kısmi dislokasyonlar şeklinde oluşacağıdır. Kullanılan alaşım elementlerinin İHE üzerindeki etkisi, ölçülen ötektik fazlar arası İF değerleri farkları ile birlikte değerlendirildiğinde (Şekil 6.16), en yüksek iş fonksiyonu değeri, istif hatası enerjisinde en büyük azalmayı sağlayan Ba elementinin bulunduğu Mg-Ba alaşımında görülmüştür. Söz konusu İHE düşüşü, sadece α -Mg fazı için konuşulabilecek bir kavramdır. Çünkü intermetalikler kovalent bağlı yapılardır ve katı çözünürlük kavramı kullanılarak alaşım elementi ilavesinin İHE üzerindeki etkisini değerlendirmeye uygun değildirler. Şu husus da unutulmamalıdır ki, Mg-Ba denge diyagramına bakıldığında Ba elementinin α -Mg fazı içerisinde çözünürlüğü yoktur. Baryumun İHE üzerindeki etkisi literatürden alınmış ve *ab initio* tekniklerle hesaplanmış bir etkidir. Buradaki çalışmada EDS ölçüm kapasitesiyle saf α -Mg görünen dendrit adacıkları ise, çözünürlüğün en azından yüksek sıcaklıklarda sıfır olmadığını işaret etmektedir. Buna göre, Ba'nın Mg içerisindeki çözünürlüğünü sıfır olarak almayıp, belki de ppt seviyelerinde çok küçük bir seviye olarak kabul edebiliriz. Bu kabul bize, *ab initio* tekniklerle Ba'nın İHE üzerinde hesap yoluyla bulunan etkisini, deneysel olarak da var kabul etmemizi sağlar.

Yukarıdaki yaklaşıma dayanılarak, Ba'nın α -Mg içerisinde eser miktarlarda bulunması durumunda İHE değerini *ab initio* hesaplamaların işaret ettiği üzere, deneysel olarak da negatif seviyelere düşüreceğini söyleyebiliriz. Diğer bir deyişle, α -Mg içerisinde serbest elektron yoğunluğu dağılımı, mutlak saf Mg'ye kıyasla bile çok daha homojen hale gelmiş ve İHE değeri negatife çekilmiş demektir (böyle bir elektronik yapıdaki magnezyumda dislokasyonlar “full” dislokasyonlar olarak doğamaz ve kısmi dislokasyonlar olarak doğarlar). Bu durumda ise α -Mg fazına kıyasla, buna komsu olan intermetalik fazdan elektron koparmak çok daha güçleşeceği için KPFM ölçüm farkı, tıpkı gözlemlendiği üzere, çok yüksek çıkacaktır.

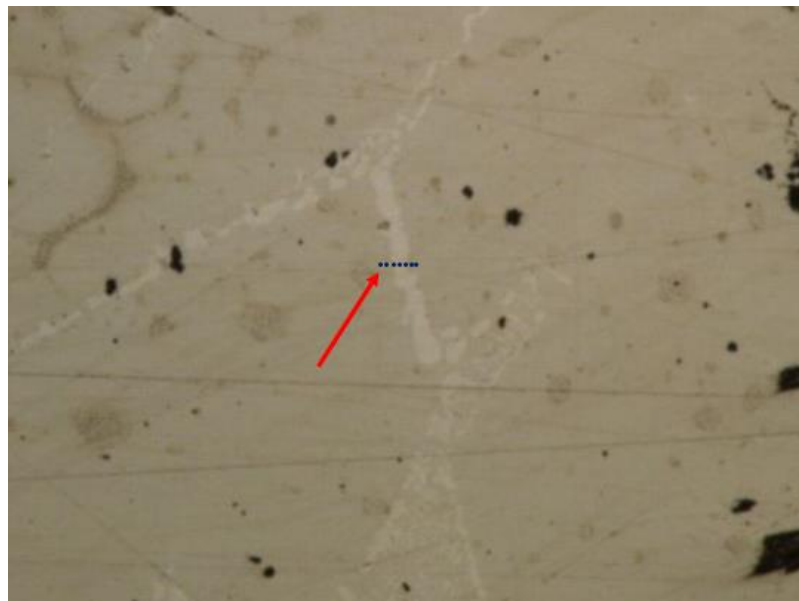
Aynı temel prensiplere dayalı olarak Mg-Sr sisteminde ötektik komponentler arasında gözlemlenen yüksek iş fonksiyonu farkı da açıklanabilir. Sr'nin α -Mg içerisinde *ab initio* tekniklerin sonucuna bakarak İHE seviyesini düşürdüğü zaten literatürden

anlaşılmaktadır. Bu durumda yine göreceli olarak α -Mg ve komşu intermetalik arasındaki iş fonksiyonu değeri farkı, yani KPFM okuması büyüyecektir (Şekil 6.14). α -Mg içerisinde çözünmüş olan eser miktardaki Sr (bu değerin baryumun Mg içerisindeki çözünürlüğünden çok çok fazla olduğu kesindir, çünkü denge diyagramında en azından sınırlı yüksek sıcaklıkta çözünürlük olduğu görülmektedir) elektronegativite farkı nedeniyle SRO oluşturacaktır. Bu ise, en azından bazı kristal düzlemlerinde bağ tipini daha kuvvetli yapacak ve elektron koparmayı güçleştirecektir. KPFM ölçümlerinde α -Mg iş fonksiyonu değerlerinin, aynı fazın Mg-Ba sistemindeki değerlerine kıyasla daha yüksek (Şekil 6.12 ve 6.14) olmasının olası bir sebebi de budur.

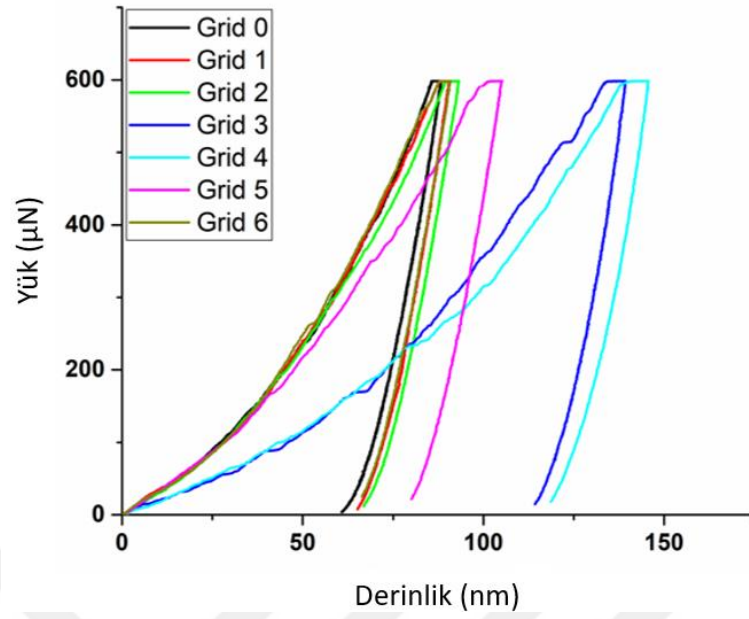
6.7. Alaşım Numunelerin Nanoindentasyon Analizleri ve Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi

6.7.1. Mg-Sr alaşımına ait nanoindentasyon sonuçları

Mg-Sr alaşımına ait nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı bölge Şekil 6.17’de ok ile gösterilmiştir. Burada beyaz bölgenin içeriği ötektik α -Mg ve $Mg_{23}Sr_6$ karışımıdır. Daha koyu bölge ise kaba Mg_2Sr intermetaliklidir. İşaretli bölgeden 7 adet ölçüm gerçekleştirilmiştir. Ölçüm neticesinde elde edilen yük-derinlik grafiği ve ölçüm sonuçları sırasıyla Şekil 6.18 ve Tablo 6.7’de verilmiştir.



Şekil 6. 17. Mg- Sr alaşımında nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı bölgenin görseli



Şekil 6. 18. Mg-Sr alaşımının nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği

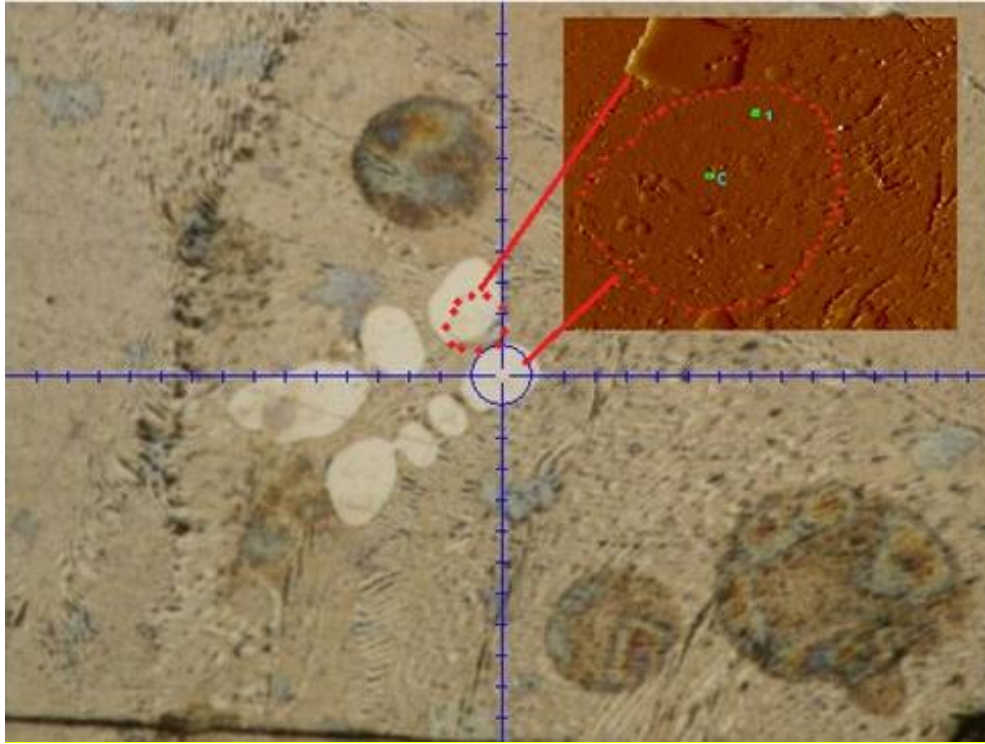
Tablo 6. 7. Mg-Sr alaşımının nanoindentasyon test sonuçları

	Temas Derinliği (nm)	Elastisite Modülü (GPa)	Sertlik (GPa)
Grid 0	74.88	79.44	4.35
Grid 1	77.51	79.47	4.06
Grid 2	79.35	73.35	3.87
Grid 3	127.91	54.63	1.49
Grid 4	133.76	49.97	1.36
Grid 5	91.59	64.97	2.9
Grid 6	76.812	74.48	4.13
Ortalama değer	94.55	68.05	3.17
Standart sapma	25.44	11.87	1.28

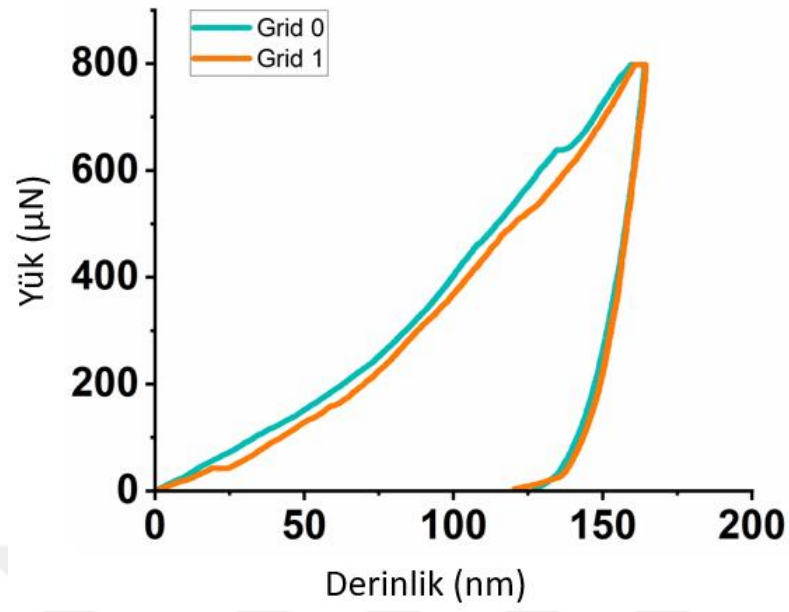
Mg-Sr intermetaliklerinin mekanik özelliklerinin saf Mg'ye kıyasla daha yüksek olduğu bilinmektedir [111]. Bu perspektif ile elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde, 3 ve 4 numaralı izlerin α -Mg bölgesine denk geldikleri 1.49 ve 1.36 GPa'lık sertlik değerlerinden anlaşılmaktadır.

6.7.2. Mg-Ca alaşımına ait nanoindentasyon sonuçları

Mg-Ca alaşımında α -Mg bölgesine ait nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı bölge Şekil 6.19 verilmiştir. Burada açık renkli bölge α -Mg dendrit adacıklarına tekabül eder. Daha koyu bölge ise α -Mg ve Mg_2Ca fazlarından oluşan ötektik yapıdır. İşaretli bölgeden 2 adet ölçüm alınmıştır. Ölçüm neticesinde elde edilen yük-derinlik grafiği ve ölçüm sonuçları sırasıyla Şekil 6.20 ve Tablo 6.8'de gösterilmiştir.



Şekil 6. 19. Mg-Ca numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı α -Mg bölgesinin görseli

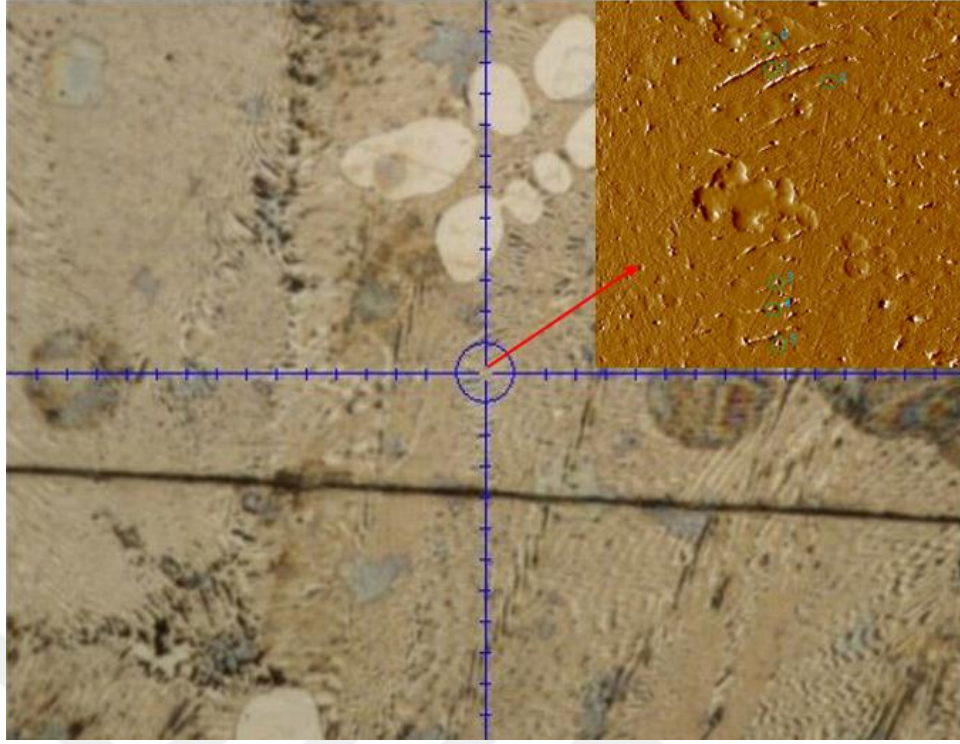


Şekil 6. 20. Mg-Ca alaşımasının α -Mg bölgesinin nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği

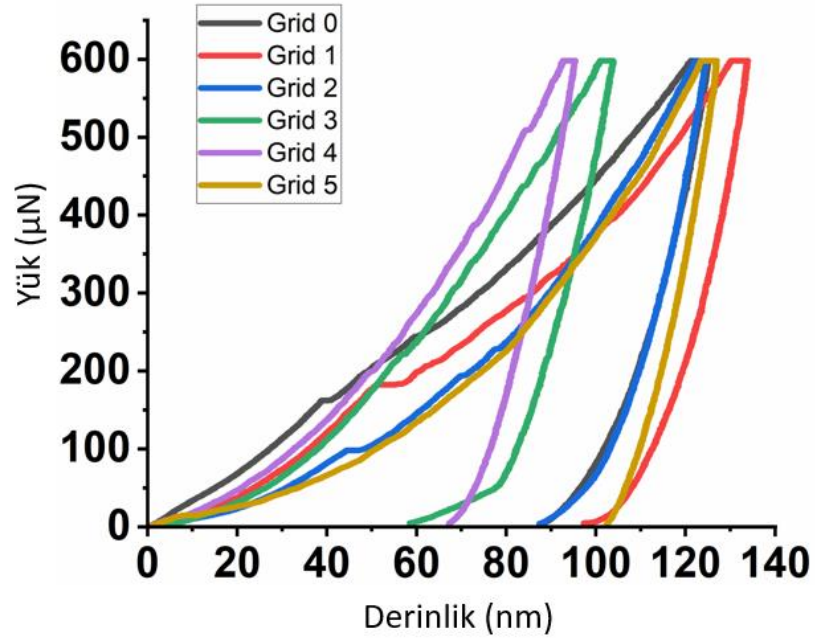
Tablo 6. 8. Mg-Ca alaşımında α -Mg bölgesine ait nanoindentasyon test sonuçları

	Temas Derinliği (nm)	Elastisite Modülü (GPa)	Sertlik (GPa)
Grid 0	153.126	62.78	1.389
Grid 1	153.164	61.05	1.388
Ortalama değer	153.145	61.913	1.389
Standart sapma	0.26	1.23	0.4

Mg-Ca alaşımında nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı ötektik bölge Şekil 6.21 verilmiştir. İşaretli bölgeden 2 adet ölçüm alınmıştır. Ölçüm neticesinde elde edilen yük-derinlik grafiği ve ölçüm sonuçları sırasıyla Şekil 6.22 ve Tablo 6.9'da gösterilmiştir.



Şekil 6. 21. Mg-Ca numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı ötektik bölgesinin görseli



Şekil 6. 22. Mg-Ca alaşımlarının ötektik bölgesinin nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği

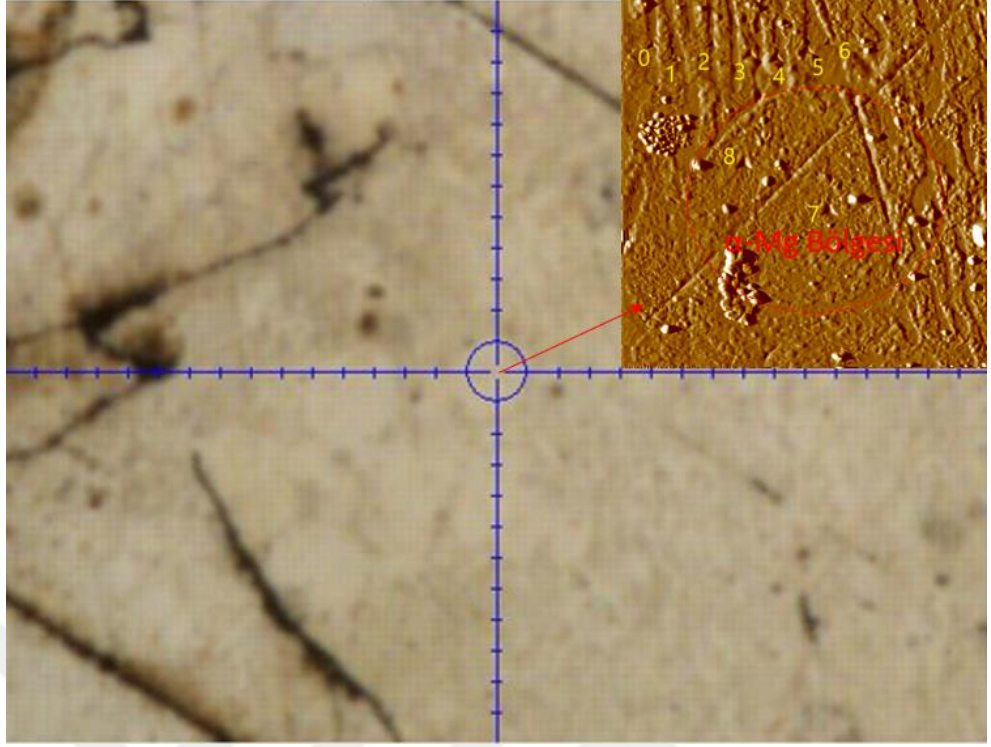
Tablo 6. 9. *Mg-Ca alařımında ötektik bölgeye ait nanoindentasyon test sonuçları*

	Temas Derinliđi (nm)	Elastisite Modülü (GPa)	Sertlik (GPa)
Grid 0	112.264	54.955	1.937
Grid 1	122.500	57.003	1.627
Grid 2	112.423	58.610	1.932
Grid 3	90.113	64.435	3.005
Grid 4	81.967	72.612	3.633
Grid 5	115.999	62.101	1.814
Ortalama deđer	105.878	61.62	2.325
Standart sapma	16.016	6,38	0.804

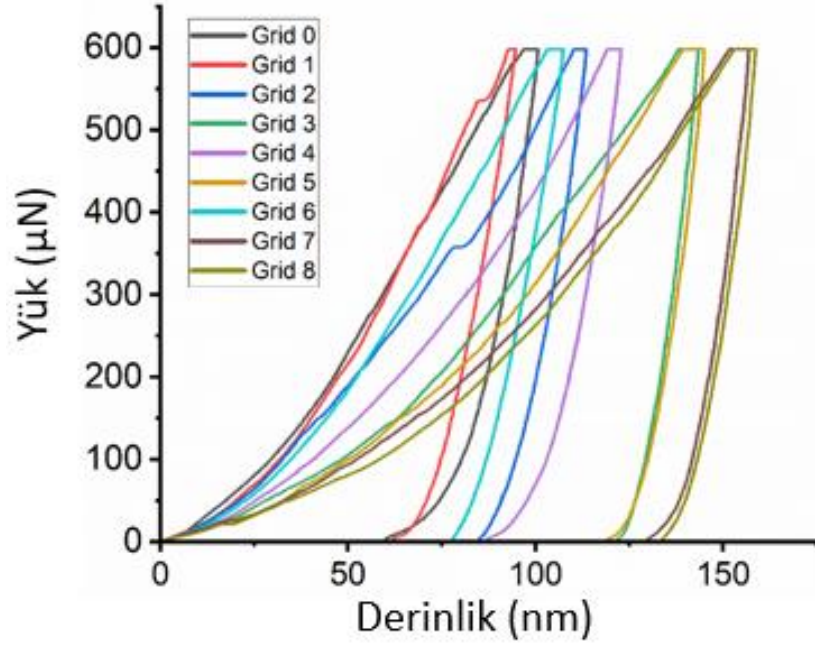
Bu alařım sistemi için intermetalik bölgeden alınan nanoindentasyon sonuçlarını incelediđimizde 3 ve 4 numaralı izlerin ötektik yapıdaki Mg_2Ca intermetalikleri üzerinden alındıđı, ortalama 3.32 GPa deđerindeki sertlik sonuçları ve diđer bölgelere göre daha yüksek elastisite modülü deđerlerinden anlařılmaktadır. 0, 1, 2 ve 5 numaralı ölçümlerin verdiđi deđerler ölçümün çođunlukla α -Mg bölgesi olduđunu iřaret etmektedir.

6.7.3. Mg-Ba alařımına ait nanoindentasyon sonuçları

Mg-Ba alařımında α -Mg dendrit adacıkları ve ötektik bölgeye ait nanoindentasyon ölçümünün yapıldıđı yerler řekil 6.23'te verilmiřtir. Burada beyaz bölgenin içeriđi α -Mg, daha koyu bölge ise α -Mg ve $Mg_{17}Ba_2$ fazlarından oluřan ötektik yapıdır. α -Mg bölgesinden 7 ve 8 numaralı izler olmak üzere 2 adet ölçüm alınmıřtır. Ötektik bölgeye yapılan 7 adet iz ise 0, 1, 2, 3, 4, 5 ve 6 numaralı ile görsel üzerinde iřaretlenmiřtir. Ölçüm neticesinde elde edilen yük-derinlik grafiđi ve ölçüm sonuçları sırasıyla řekil 6.24 ve Tablo 6.10'da gösterilmiřtir.



Şekil 6. 23. Mg-Ba numunesinde nanoindentasyon ölçümünün yapıldığı α -Mg ve ötektik bölgenin görseli (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)



Şekil 6. 24. Mg-Ba alaşımında α -Mg ve ötektik bölgeden nanoindentasyon ölçüm sonucunda elde edilen yük-derinlik grafiği (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)

Tablo 6. 10. *Mg-Ba alařımında α -Mg ve ötektik bölgeye ait nanoindentasyon test sonuçları (Grid 7 ve 8 α -Mg bölgesi; Grid 0,1,2,3,4,5,6 ötektik bölge)*

	Contact Depth (nm)	Modulus (GPa)	Hardness (GPa)
Grid 0	84.910	54.197	3.386
Grid 1	78.107	58.348	4.001
Grid 2	98.302	49.059	2.526
Grid 3	131.869	48.310	1.404
Grid 4	106.938	43.088	2.135
Grid 5	132.769	44.374	1.385
Grid 6	90.225	47.904	2.999
Grid 7	144.674	41.192	1.166
Grid 8	146.101	39.272	1.144
Ortalama değer	112.655	47.305	2.238
Standart sapma	26.511	6.146	1.053

Sertlik değerleri açısından değerlendirme yaptığımızda, α -Mg bölgesinden ortalama 1.155 GPa’lık bir değer elde ederken; ötektik bölgeden ortalama 2.548 GPa’lık sertlik değeri elde edilmektedir.

6.7.4. Nanoindentasyon test sonuçlarının değerlendirilmesi

Nanoindentasyon testinden elde edilen verilerin her bir alařım için ve ölçümün yapıldığı bölge baz alınarak elde edilen değerlerin ortalamaları Tablo 6.11’de verilmiştir. Tabloda ölçüm yapılan bölgelerin elastisite modül değerlerinin ortalamaları da bulunmaktadır. Nanoindentasyon yönteminde belirlenen bu değerlerin hesaplanmasında kullanılan “Oliver-Pharr” yaklaşımına göre önce indirgenmiş elastisite modülü, daha sonra buradan elde edilen veriler ile elastisite modülü değeri elde edilebilmektedir. Formülasyonlarda kullanılan Poisson oranı değeri analizlerde her bir alařım için saf Mg’nin değeri olarak sisteme girilmiştir. Oysa ki her bir alařımın kendi Poission oranı kullanılmalıydı. Ancak alařım numunelerinin Poisson oranları mevcut olmadığından, analiz sonucu elde edilen elastisite modülü değerleri RFDA ölçümlerinin aksine gerçeği

tam yansıtmamaktadır. Bu sebeple tablodaki sadece nano sertlik verileri dikkate alınmış ve yorumlanmıştır.

Tablo 6. 11. Nanoindentasyon analizlerinden alınan verilerin alaşımlar ve bölgeler açısından ortalama değerleri

	Ba	Sr	Ca
	Ötektik bölge	Ötektik bölge	Ötektik bölge
E	49.33 GPa	76.69 GPa	63.79 GPa
H	4.258 GPa	4.16 GPa	2.582 GPa
	α -Mg bölgesi	α -Mg bölgesi	α -Mg bölgesi
E	40.23 GPa	52.3 GPa	40.23 GPa
H	1.16 GPa	1.436 GPa	1.389 GPa

α -Mg dendrit adaları üzerinden yapılan sertlik ölçümleri Mg-Ca için 1.389 GPa ve Mg-Ba için 1.16 GPa'dır. Mg-Sr için ise α -Mg ölçümü ötektik bileşen olan α -Mg üzerinden alınmıştır ve 1.436 GPa'dır. Bu değerlerin yorumlanması alaşım elementinin Mg içerisindeki çözünürlük seviyesi ve kısa mesafe düzen üzerinden yapılmalıdır. Kısa mesafe düzen değerlendirilmesi yapılırken literatürdeki saf Mg nanoindentasyon sonuçları kullanılmıştır. Literatüre göre saf Mg'nin nanoindentasyon testi sonucunda, ölçümün yapıldığı tanenin kristalografik oryantasyonuna bağlı olarak nano sertlik değerleri 0.9 – 1.2 GPa arasında değiştiği bildirilmiştir [112]. Buna göre α -Mg bölgelerinden alınan sonuçlar incelendiğinde, Mg içerisinde çözünürlüğü hiç olmayan Ba elementinin oluşturduğu alaşım, en düşük sertlik ve saf α -Mg ile uyumlu bir değer karşımıza çıkmaktadır. Ca ve Sr elementlerinin Mg içerisinde sınırlı çözünürlüklerinin olması sebebiyle bu değer daha yukarı çıkarak literatürdeki 1.2 GPa değerini geçmektedir. Ayrıca literatürdeki Mg'nin Ca ve Sr ile kısa mesafe düzen oluşturabildiği [2] verileri de göz önünde bulundurulduğunda, Mg-Sr'nin 1.436 GPa ve Mg-Ca'nın 1.389 GPa'lık nano sertlik değerleri seyreltik katı çözeltiler α -Mg dendrit adacıkları kısa mesafe düzenin oluşturduğunu işaret etmektedir.

Tez kapsamında kullanılan Mg alaşımları, Mg-10Ba(%), Mg-15Ca(%) ve Mg-25Sr(%) bileşimleri ile kendi denge diyagramlarında izlenebilirler. Oluşturacakları

ötektik yapılardaki intermetalik komponentlerin ergime sıcaklıkları, bu fazların sertlik (mukavemet) düzeylerinin konvansiyonel açıdan kıyaslanması için önemli bir parametredir. Buna göre, Mg-Ba ötektiğinin intermetalik fazının ergime sıcaklığı yaklaşık 700°C, Mg-Ca ötektiği intermetaliginin yaklaşık 711°C ve Mg-Sr ötektiğinin intermetaliginin ise 680°C'dir. Bu değerler üzerinden konvansiyonel bir kıyaslama ile bu sistemlerde numunelerde görülen intermetaliklerin mukavemetleri muhtemelen ihmal edilebilir küçük farklarla $Mg-Ca > Mg-Ba > Mg-Sr$ şeklinde olmak durumundadır. Ötektiklerin diğer bileşeni ise α -Mg'dir. Ötektik bölgelerin sertlikleri bu iki fazın sertliklerinin karışımlar kuralına göre ortalamasını oluşturacak şekilde gözlemlenmesi gerekir. Her iki ötektik bileşenin 3 alaşım sisteminin hepsinde kıyaslamalı ortalama kalınlıkları aynıdır.

Her 3 alaşımda ötektik bölgeler için alınan nano sertlik sonuçlarının ortalaması incelendiğinde 4.258 GPa'lık değer ile Mg-Ba alaşımı ötektiğinin en yüksek sertliğe sahip olduğu görülmektedir. Mg-Sr alaşımı 4.16 GPa ve Mg-Ca ise 2,582 GPa değerlerine sahiptir. Ergime sıcaklıkları bazında kıyaslandıklarında $Mg_{17}Ba_2$ intermetaliginin dahil olduğu ötektik yapının sertliğinin, $Mg_{23}Sr_6$ intermetaliginin bulunduğu ötektik yapıya kıyasla marjinal olarak daha yüksek olması normaldir (esasen özdeş kabul edilebilir).

Bu noktada ilginç olan şudur ki Mg-Ca sistemi, ötektiğinde bulunan en yüksek ergime sıcaklığına sahip Mg_2Ca bileşiğine sahip olmasına ve ayrıca bu sistemin α -Mg fazının çözünen ve SRO oluşturan alaşım elementi olarak Ca içermesine rağmen, sistemin ötektiği en düşük sertlik değerini taşımaktadır. Bu durumda sertliklerinin en azından benzer olması gerekirken Mg-Ba ve Mg-Sr intermetaliklerini (sırasıyla $Mg_{17}Ba_2$ ve $Mg_{23}Sr_6$) içeren ötektik yapılar, Mg_2Ca içeren Mg-Ca sistemi ötektiğine kıyasla neredeyse iki kat yüksek sertliğe sahiptir. Bu gözlemin açıklamasının olası yegâne yolu, ötektik yapı bileşenleri arasındaki ara yüzeyin bağ mukavemetinin irdelenmesidir. Ötektik yapıların sertlikleri, onu oluşturan iki fazın arayüzey bağ mukavemetinden etkilenmek durumundadır.

Görünen odur ki, iki ötektik komponentleri arasındaki bağ mukavemeti, Mg-Ca sisteminde (yani α -Mg ve Mg_2Ca arasındaki arayüzeyde) önemli bir farkla en düşüktür. Bu durumda, arayüzeyde polaritelerin düşük olduğunu düşünmek ve düşük sertlik gözlemini buna bağlamak gerekmektedir. Esasen, en kuvvetli olması gereken Mg_2Ca intermetaliginin kendisi içerisinde elektronların diğer sistemlerdeki intermetaliklere

kıyasla daha yüksek polaritelerle kullanılmış olması, bu fazın, komşu bir fazla bağ oluşturmada kullanabileceği elektron sayılarını azaltıyor diye düşünebiliriz. Diğer yandan aynı ötektiğin α -Mg komponenti içerisinde Ca çözünürlüğü ve SRO oluşması nedeniyle elektronların yine yüksek polaritelerle kullanılıyor olması, bu faz içerisinde de komşu ile fazla bağ yapmakta kullanılacak elektron sayılarında düşüş anlamını taşımalıdır. Bu kurguda, iki ötektik komponent arasında bağ oluşturmada kullanılacak elektron sayılarında önemli bir düşüş oluşması ve bunun neticesinde de arayüzeydeki polaritenin azalması, yani bağ kuvvetlerinin düşmesi beklenmelidir. Böylelikle beklenenin aksine, Mg-Ca sistemi ötektiğinin sertlik seviyesi göreceli olarak diğer iki alaşım sistemine kıyasla daha düşük çıkmaktadır.

KPFM analizlerinden alınan iş fonksiyonu değerleri ve nano sertlik değerlerinin bir arada irdelenmesi konusunda ise şunlar söylenebilir:

α -Mg ve intermetaliklerden oluşan ötektik bölgede, ötektik lamellere dik yönde KPFM ile okunan iş fonksiyonu değişimleri ve aynı bölgelerden alınan nano sertlik değerlerinin büyüklük sıralaması aynı paralelliktedir. Mg-Ca sisteminde α -Mg ve intermetalik faz arasındaki iş fonksiyonu değerleri farkı (bkz. Şekil 7.13) diğer sistemlere kıyasla çok daha düşüktür. Bu durum söz konusu fazlarda polaritenin düşük olması ve elektron koparmanın Mg-Ca sisteminde daha kolay olduğu anlamına gelmez. Ötektik yapı bileşeni fazların her birinin kendi içlerinde atomlar arası bağ oluşturulmasında kullanılan serbest elektron yoğunlukları fazladır ve polariteler her iki fazın içerisinde yüksektir. Bunun sonucu olarak iki faz arasındaki KPFM ölçüm değer farkları azalmakta, yani iş fonksiyonları arasındaki fark düşük olmaktadır. Unutulmamalıdır ki KPFM ölçümleri, her bir bölge için mutlak iş fonksiyonu değerlerinin değil, iki bölge arasındaki farkların okunduğu ölçümlerdir.

6.9. Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr Alaşımlarının RFDA Analizleri

Çalışma kapsamında kullanılan Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımlarının elastisite modülleri ve sönümleme (damping) karakteristiklerinin belirlenmesi için RFDA analizi gerçekleştirilmiştir. Elde edilen RFDA sonuçlarına ait veriler Tablo 6.12’de verilmiştir.

Tablo 6. 12. RFDA analizi yapılan Mg alaşımlarının fiziksel özellikleri ile elde edilen elastisite modülü ve damping değerleri

Numune Adı	Kütle (g)	Uzunluk (mm)	Genişlik (mm)	Kalınlık (mm)	E-Mod (GPa)	Damping
Mg-Ba	1.3548	39.97	6.02	3.07	41.18	0.00068
Mg-Ca	0.9288	32.02	5.91	2.92	41.43	0.000541
Mg-Sr	1.3705	43.00	5.00	3.00	44.24	0.000713

Verilerden elde edilen sonuçlar elastisite modülü açısından 3 alaşım için de büyük farklılıklar göstermemektedir. Elastisite modül değerlerini büyükten küçüğe doğru sıraladığımızda Mg-Sr, Mg-Ca ve Mg-Ba şeklinde bir sıralama elde edilmektedir. Sr elementinin Mg içerisinde hiç çözünürlüğü olmaması nedeniyle tamamen intermetalik ağırlıklı bir mikroyapısı vardır. α -Mg az miktarda ve sadece kaba intermetaliklerin arasında bulunan ötektik yapıda mevcuttur. Mevcut intermetalikler nedeniyle E-modülü daha yüksek çıkmıştır. Mg-Ba ve Mg-Ca sistemleri ise mikroyapısal açıdan özdeşirler. Her ne kadar intermetaliklerin tipi değişse de faz diyagramlarına bakılarak bunların ergime sıcaklıklarının benzer ve dolayısıyla mukavemet (sertlik) seviyelerinin çok benzer oldukları sonucu çıkarılabilir. Bunun doğal bir neticesi olarak ve faz oranlarının da çok yakın olması nedeniyle, karışımlar kuralı gereği, elastisite modülleri de özdeş çıkmıştır.

RFDA bir mekanik spektroskopi yöntemidir. Doğru ölçümler yapıldığı takdirde elastisite Modülü ve ses/titreşim sönümleme özelliklerini atomik ölçekteki değişimler ile açıklayabilmemizi sağlar. Yapı içerisindeki zayıf bağlar ile malzemenin sönümleme davranışı arasında doğru bir orantı vardır. Elde edilen RFDA sonuçları iş fonksiyonu ve dolayısı ile İHE arasında ilişki değerlendirildiğinde İHE seviyelerinin düşürülmesinin düzlemler üzerinde dislokasyon aktivitelerini kolaylaştıracağından sönümleme kapasitesini artıracığından önceki bölümde (Bölüm 2.) bahsetmiştik. Burada mikroyapısal olarak benzer Mg-Ba ve Mg-Ca alaşımları üzerinden bir değerlendirme yapmak mümkündür. Sönümle değerlerine göre Mg-Ca beklenenin aksine daha düşük bir sönümleme değerine sahip gözükmemektedir. Bu durum, ötektik yapıda bulunan α -Mg dendrit içerisindeki mukavemet artırıcı kısa mesafe düzen kaynaklıdır. Mg-Ba açısından değerlendirme yapıldığında, Mg-Ba için hesaplanmış İHE değerinin, Mg'nin İHE

değerini negatif değere çektiği görülmektedir. Bu durum daha öncede belirtildiği; Baryumun α -Mg içerisinde eser miktarlarda bulunması durumunda İHE değerini *ab initio* hesaplamaların işaret ettiği gibi, deneysel olarak da negatif seviyelere düşüreceğini işaret etmektedir. α -Mg içerisinde serbest elektron yoğunluğu dağılımı, mutlak saf magnezyuma kıyasla bile çok daha homojen hale gelmiş olacaktır. Ayrıca, çözünürlüğün olmaması, çökelti tanelerinin oluşamayacağı dolayısı ile bağ mukavemetinin düşük olacağından ötürü sönümleme davranışı Mg-Ca'dan daha yüksek olması olağandır. Aynı zamanda yapılan nanoindentasyon testinde α -Mg bölgesinden alınan 1.16 GPa'lık en düşük nano sertlik değeri de yapılan değerlendirmenin doğruluğunu kanıtlar niteliktedir.

Yapılan RFDA ölçümlerinden elde edilen elastisite modülü değerlerinin hesaplanmasında kullanılan Poission oranı, saf Mg'a ait Poission oranı olduğu için elde edilen sonuçlardaki hata payı olasıdır. Bu sebeple RFDA sonuçlarına ait değerlendirme yapılırken sönümleme davranışı üzerinde durulmuştur.

7. GENEL SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında, kısa mesafeli düzen (SRO) ve *ab initio* tekniklerle hesaplanmış İHE (SFE) seviyelerinin, basit alaşım sistemlerinde ölçülen deneysel nanoindentasyon ve KPFM (iş fonksiyonu) ölçümleri ile birlikte kullanılarak korele edilip edilemeyeceği araştırılmıştır. Bu tür bir korelasyonun, literatür verileri ve referans basit alaşım sistemlerinin birlikte kullanımıyla çoklu alaşım geliştirme çalışmalarında faydalı olacağı düşünülmektedir ve çok kısa bir süre (2021) önce literatürde “Elektronik Metalurji” şeklinde bir başlık kazanmış durumdadır. Çalışma kapsamında, endüstriyel olarak ilgi çeken Mg metali baz alınmış ve literatüre dayalı olarak İHE üzerindeki görece farklı etkileri olan alaşım elementi ilaveleri içeren basit ikili alaşım sistemleri olan (Mg-Ba, Mg-Ca, ve Mg-Sr sistemleri ve empüriteler nedeniyle seyreltik) sistemler olarak görülecek tek kristal saf Mg numuneler kullanılmıştır.

Metalik malzemelerin deformasyon davranışları en temel seviyede İHE kavramına bağlıdır ve bu nedenle iyi anlaşılması gerekmektedir. İHE seviyesi çok çeşitli yöntemler ile ölçülmekteyse de bu teknikler zordur ve birbirlerinden farklı sonuçlar verebilmektedir. Mevcut durumda *ab initio* hesaplama teknikleri bile uzun ve meşakkatli süreçleri içerisinde barındırmaktadır ve deneysel teyit gerektirmektedir. Malzemelerin İHE’si elektronik özelliklere bağlı ve iş fonksiyonu değerleri ile sıkı ilişkide değişim gösteren bir özelliğidir. Anlaşılabilmesi için temel yaklaşımlardan bir tanesi İHE kavramının iyi anlaşılabilmesi gerekmektedir. Bu noktada daha pratik olan KPFM ölçümleri ile iş fonksiyonu değerleri belirlenerek İHE ile ilişkilendirilmiştir. Tez çalışması neticesinde elde edilen sonuçlar aşağıda maddeler halinde paylaşılmıştır;

- Çalışma kapsamında kullanılan ve empüriteleri nedeniyle seyreltik sistemler olarak kabul edilecek saf tek kristal Mg numunelerde yapılan KPFM iş fonksiyonu ölçümleri, bu tekniğin pratik bir deneysel yöntem olduğunu ve bileşim değişimlerine çok hassas sonuçlar verdiğini göstermiştir. Tek kristal saf Mg numunelerin KPFM analiz sonuçlarına göre elde edilen iş fonksiyonu değerlerinin kristalografik oryantasyona bağlı olarak da değiştiği gösterilmiş ve yöntemin bu açıdan da hassas ve güvenilir olarak kullanılabileceği ortaya konulmuştur.
- Bu çalışma, farklı ötektik sistemlerde lamelar fazlar arası bağ mukavemeti kıyaslamasının, KPFM ve nanoindentasyon ölçümlerinin birlikte kullanılarak yapılabileceğini göstermiştir. Böylelikle, farklı alaşım sistemlerindeki ötektik

yapıların, göreceli kıyaslamalarının, lamelar morfolojiden (lamel inceliğine bağlı geometrik irdeleme) farklı bir kavrama bağlı olarak yapılabileceği görülmektedir.

- Çalışmada kullanılan Mg-Ba, Mg-Ca ve Mg-Sr alaşımları sistemleri üzerinde yapılan KPFM ölçümleri ile bu alaşım elementlerinin Mg matris içerisinde seyreltik konsantrasyonlarda iş fonksiyonu değerlerini ve dolayısıyla İHE seviyelerini kalitatif olarak nasıl değiştirdiği gösterilmiş ve ölçüm sonuçları literatürden alınan değerlere referansla irdelenmiş ve teorik hesaplarla belirlenmiş İHE enerjisi değişimleri ile örtüştüğü bulunmuştur. Bu korelasyon da KPFM ölçümlerinin pratik bir deneysel yöntem olarak bileşime çok hassas sonuçlar verdiğini göstermiş ve sonuçların lokal olarak farklı fazlarda yapılan nanoindentasyon gibi mekanik ölçümlerle de uyumlu olduğu ortaya konulmuştur.
- Numunelere gerçekleştirilen nanoindentasyon testleri sonucunda elde edilen nano sertlik değerlerine göre α -Mg bölgeleri için Mg içerisinde çözünürlüğü bulunan Ca ve Sr elementlerinin α -Mg ile kısa mesafe düzen (SRO) oluşturdukları anlaşılmıştır. Bu sonucun dayanağı beklenen 1.2 GPa'lık değerden daha yüksek nano sertliğe sahip olmalarıdır.
- RFDA analizleri ile elastisite modülü ve sönümlleme (damping) karakteristikleri belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre büyükten küçüğe elastisite modül değerleri Mg-Sr>Mg-Ca>Mg-Ba olarak elde edilmiştir. Sönümlleme kapasitesi açısından ise sistemlerin Mg-Ba>Mg-Ca>Mg-Sr şeklinde sıralanabileceği tespit edilmiştir.
- İş fonksiyonu kavramı 100 yılı aşkın bir geçmişe sahiptir. Farklı ölçüm teknikleri mevcuttur ve yüzey koşullarına hassas bir değer ortaya çıkar. Özellikle metaller ve bunlar içerisinde oksitlenme eğilimi özellikle yüksek olan Mg ve alaşımları için KPFM gibi atmosfere açık bir sistemde yapılan ölçümlerin teorik (İHE ölçümleri) ve pratik (nanoindentasyon ve RFDA ölçümleri) sonuçlar ile topluca uyumlu sonuçlar vermesi “Elektronik Metalurji” başlığı altında bu yöntemin başarıyla kullanılabileceğini bu tez çalışması ortaya koymuş durumdadır. Çalışma sonucunda ortaya çıkan İHE, İF, *ab initio* hesap sonuçları ve nanoindentasyon ölçümleri korelasyonunun, sadece Mg alaşımları için değil diğer tüm metalik malzemelerin geliştirilmesinde kullanılabilecek bir yaklaşım olduğu düşünülmektedir.

KAYNAKÇA

- [1] Pekguleryuz, M. O., Kainer, K. and Kaya, A. (Eds.). (2013). Fundamentals of magnesium alloy metallurgy. Elsevier. 3-49
- [2] Kaya, A. (2020) A Review on Developments in Magnesium Alloys. *Front Mater.* 7,1-26.
- [3] Serrenho, A.C., Norman, J.B. and Allwood, J.M. (2017) The impact of reducing car weight on global emissions: The future fleet in Great Britain. *Philos Trans R Soc A Math Phys Eng Sci.* 375, 2095
- [4] Dziuba, D., Meyer-Lindenberg, A., Seitz, J.M., Waizy, H., Angrisani, N. and Reifenrath, J. (2013). Long-term in vivo degradation behaviour and biocompatibility of the magnesium alloy ZEK100 for use as a biodegradable bone implant. *Acta Biomater.* 9:85, 48-60.
- [5] Dong, Q., Luo, Z., Zhu, H., Wang, L., Ying, T., Jin, Z. and et al. (2018). Basal-plane stacking-fault energies of Mg alloys: A first-principles study of metallic alloying effects. *J Mater Sci Technol.* 34:17, 73-80.
- [6] Trang, T.T.T., Zhang, J.H., Kim, J.H., Zargaran, A., Hwang, J.H., Suh, B.C. and et al. (2018). Designing a magnesium alloy with high strength and high formability. *Nat Commun.* 9.
- [7] Yu, L., Yan, H., Chen, J., Xia, W., Su, B. and Song, M. (2020). Effects of solid solution elements on damping capacities of binary magnesium alloys. *Mater Sci Eng A.* 772:138707.
- [8] Kishida, K., Yokobayashi, H., Inui, H., Yamasaki, M. and Kawamura, Y. (2012). The crystal structure of the LPSO phase of the 14H-type in the Mg-Al-Gd alloy system. *Intermetallics.* 31, 55-64.
- [9] Xu, D., Han, E.H. and Xu, Y. (2016). Effect of long-period stacking ordered phase on microstructure, mechanical property and corrosion resistance of Mg alloys: A review. *Prog Nat Sci Mater Int.* 26, 117-28.
- [10] Inoue, A., Kawamura, Y., Matsushita, M., Hayashi, K. and Koike, J. (2001). Novel hexagonal structure and ultrahigh strength of magnesium solid solution in the Mg-

Zn–Y system. *J Mater Res.* 16:1894–900.

- [11] Minárik, P., Král, R., Čížek, J. and Chmelík, F. (2016). Effect of different c/a ratio on the microstructure and mechanical properties in magnesium alloys processed by ECAP. *Acta Mater.* 107:83–95.
- [12] Styczynski, A., Hartig, C., Bohlen, J. and Letzig, D. (2004). Cold rolling textures in AZ31 wrought magnesium alloy. *Scr Mater.* 50:943–7.
- [13] Pekguleryuz, M., Celikin, M., Hoseini, M., Becerra, A. and MacKenzie, L. (2011). Study on edge cracking and texture evolution during 150 °C rolling of magnesium alloys: The effects of axial ratio and grain size. *J Alloys Compd.* 510:15–25.
- [14] Chang, Y. and Kochmann, D.M. (2015). A variational constitutive model for slip-twinning interactions in hcp metals: Application to single- and polycrystalline magnesium. *Int J Plast.* 73:39–61.
- [15] Becerra, A. and Pekguleryuz, M. Effects of lithium, indium, and zinc on the lattice parameters of magnesium. (2008). *J Mater Res.* 23:3379–86.
- [16] Yoo, M.H. (1981). Slip, twinning, and fracture in hexagonal close-packed metals. *Metall Trans A.* 12:409–18.
- [17] Friedrich, H.E. and Mordike B.L. (2006). *Magnesium Technology*. Springer. 31–97.
- [18] Barnett, M.R., Keshavarz, Z. and Ma, X. (2006). A semianalytical Sachs model for the flow stress of a magnesium alloy. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 37:2283–93.
- [19] Fan, H., Tang, J., Tian, X., Wang, Q., Tian, X. and El-Awady, J.A. (2017). Core structures and mobility of $\langle c \rangle$ dislocations in magnesium. *Scr Mater.* 135:37–40.
- [20] Kim, S.H. and Park, S.H. (2018). Underlying mechanisms of drastic reduction in yield asymmetry of extruded Mg-Sn-Zn alloy by Al addition. *Mater Sci Eng A.* 733:285–90.
- [21] Nan, X.L., Wang, H.Y., Zhang, L., Li, J.B. and Jiang, Q.C. (2012). Calculation of Schmid factors in magnesium: Analysis of deformation behaviors. *Scr Mater.* 67:443–6.

- [22] Wang, Y.N. and Huang, J.C. (2007). The role of twinning and untwinning in yielding behavior in hot-extruded Mg-Al-Zn alloy. *Acta Mater.* 55:897–905.
- [23] Koike, J., Kobayashi, T., Mukai, T., Watanabe, H., Suzuki, M., Maruyama, K. and et al. (2003). The activity of non-basal slip systems and dynamic recovery at room temperature in fine-grained AZ31B magnesium alloys. *Acta Mater.* 51:2055–65.
- [24] Agnew, S.R., Brown, D.W. and Tomé, C.N. (2006). Validating a polycrystal model for the elastoplastic response of magnesium alloy AZ31 using in situ neutron diffraction. *Acta Mater.* 54:4841–52.
- [25] Muránsky, O., Barnett, M.R., Carr, D.G., Vogel, S.C. and Oliver, E.C. (2010). Investigation of deformation twinning in a fine-grained and coarse-grained ZM20 Mg alloy: Combined in situ neutron diffraction and acoustic emission. *Acta Mater.* 58:1503–17.
- [26] Huang, Z., Yang, C., Allison, J.E., Qi, L. and Misra, A. (2021). Dislocation cross-slip in precipitation hardened Mg–Nd alloys. *J Alloys Compd.* 859:157858.
- [27] Máthis, K., Nyilas, K., Axt, A., Dragomir-Cernatescu, I., Ungár, T. and Lukáč, P. (2004). The evolution of non-basal dislocations as a function of deformation temperature in pure magnesium determined by X-ray diffraction. *Acta Mater.* 52:2889–94.
- [28] Pierce, D.T., Jiménez, J.A., Bentley, J., Raabe, D. and Wittig, J.E. (2015). The influence of stacking fault energy on the microstructural and strain-hardening evolution of Fe-Mn-Al-Si steels during tensile deformation. *Acta Mater.* 100:178–90.
- [29] Zhu, Y.T., Liao, X.Z. and Wu, X.L. (2012). Deformation twinning in nanocrystalline materials. *Prog Mater Sci.* 57:1–62.
- [30] Wu, X.L., Youssef, K.M., Koch, C.C., Mathaudhu, S.N., Kecskés, L.J. and Zhu, Y.T. (2011). Deformation twinning in a nanocrystalline hcp Mg alloy. *Scr Mater.* 64:213–6.
- [31] Yu, Q., Zhang, J. and Jiang, Y. (2011). Direct observation of twinning-detwinning-retwinning on magnesium single crystal subjected to strain-controlled cyclic

- tension-compression in [0 0 0 1] direction. *Philos Mag Lett.* 91:757–65.
- [32] Mann, G.E., Sumitomo, T., Cáceres, C.H. and Griffiths, J.R. (2007). Reversible plastic strain during cyclic loading-unloading of Mg and Mg-Zn alloys. *Mater Sci Eng A.* 456:138–46.
 - [33] Hasegawa, S., Tsuchida, Y., Yano, H. and Matsui, M. (2007). Evaluation of low cycle fatigue life in AZ31 magnesium alloy. *Int J Fatigue.* 29:1839–45.
 - [34] Cáceres, C.H., Sumitomo, T. and Veidt, M. (2003). Pseudoelastic behaviour of cast magnesium AZ91 alloy under cyclic loading-unloading. *Acta Mater.* 51:6211–8.
 - [35] Huppmann, M., Lentz, M., Chedid, S. and Reimers, W. (2011). Analyses of deformation twinning in the extruded magnesium alloy AZ31 after compressive and cyclic loading. *J Mater Sci.* 46:9, 38–50.
 - [36] Gharghoury, M.A., Weatherly, G.C., Embury, J.D. and Root, J. (1999). Study of the mechanical properties of Mg-7.7at.% Al by in-situ neutron diffraction. *Philos Mag A Phys Condens Matter, Struct Defects Mech Prop.* 79:1671–95.
 - [37] Obara, T., Yoshinga, H. and Morozumi, S. (1973). {1122} <1123> Slip system in magnesium. *Acta Metall.* 21:8, 45–53.
 - [38] Fukuda, K., Koyanagi, Y., Tsushida, M., Kitahara, H., Mayama, T. and Ando, S. (2017). Activation stress for slip systems of pure magnesium single crystals in pure shear test. *Mater Trans.* 58, 587–91.
 - [39] Takagi, K., Yamasaki, M., Mine, Y. and Takashima, K. (2020). Temperature dependence of prismatic slip in a single-crystalline long-period stacking ordered Mg–Zn–Y alloy. *Scr Mater.* 178, 498–502.
 - [40] Liao, M., Li, B. and Horstemeyer, M.F. (2013). Interaction between prismatic slip and a Mg₁₇Al₁₂ precipitate in magnesium. *Comput Mater Sci.* 79:534–9.
 - [41] Brown, D.W., Agnew, S.R., Bourke, M.A.M., Holden, T.M., Vogel, S.C. and Tomé, C.N. (2005). Internal strain and texture evolution during deformation twinning in magnesium. *Mater Sci Eng A.* 399, 1–12.
 - [42] Masoumi, M., Hoseini, M. and Pekguleryuz, M. (2011). The influence of Ce on the microstructure and rolling texture of Mg-1%Mn alloy. *Mater Sci Eng A.*

528:3122–9.

- [43] Wang, J., Hirth, J.P. and Tomé, C.N. (2009). (over(1,) 0 1 2) Twinning nucleation mechanisms in hexagonal-close-packed crystals. *Acta Mater.* 57:5521–30.
- [44] Scroll, P. and For, D. (2006). Deformation twinning in h.c.p. metals and alloys. *Philos Mag A.* 63:987–1000.
- [45] Chen, K. and Boyle, K.P. (2009). Elastic properties, thermal expansion coefficients, and electronic structures of Mg and Mg-based alloys. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 40:2751–60.
- [46] Kim, K.H., Jeon, J.B., Kim, N.J. and Lee, B.J. (2015). Role of yttrium in activation of “c + a” slip in magnesium: An atomistic approach. *Scr Mater.* 108:104–8.
- [47] Liu, Z.R. and Li, D.Y. (2015). The electronic origin of strengthening and ductilizing magnesium by solid solutes. *Acta Mater.* 89:225–33.
- [48] Yasi, J.A., Hector, L.G. and Trinkle, D.R. (2010). First-principles data for solid-solution strengthening of magnesium: From geometry and chemistry to properties. *Acta Mater.* 58:5704–13.
- [49] Rissanen, K. (2012). Crystallography and Crystal Engineering. vol. 2.
- [50] Smallman, R.E. and Ngan, A.H.W. (2014). Introduction to Dislocations. *Mod Phys Metall.* 121–58.
- [51] Agnew, S.R. (2012). Deformation mechanisms of magnesium alloys. *Woodhead Publishing Limited.*
- [52] Jian, W.W., Cheng, G.M., Xu, W.Z., Yuan, H., Tsai, M.H., Wang, Q.D. and et al. (2013). Ultrastrong Mg alloy via nano-spaced stacking faults. *Mater Res Lett.* 1:61–6.
- [53] Malik, A., Wang, Y., Huanwu, C., Nazeer, F., Ahmed, B., Khan, M.A. and et al. (2020). Constitutive analysis, twinning, recrystallization, and crack in fine-grained ZK61 Mg alloy during high strain rate compression over a wide range of temperatures. *Mater Sci Eng A.* 771:138649.
- [54] Wang, Z.W., Wang, Y.B., Liao, X.Z., Zhao, Y.H., Lavernia, E.J., Zhu, Y.T. and et

- al. (2009). Influence of stacking fault energy on deformation mechanism and dislocation storage capacity in ultrafine-grained materials. *Scr Mater.* 60:52–5.
- [55] Rohatgi, A., Vecchio, K.S. and Gray, G.T. (2001). The influence of stacking fault energy on the mechanical behavior of Cu and Cu-al alloys: Deformation twinning, work hardening, and dynamic recovery. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 32:135–45.
- [56] Moitra, A., Kim, S.G. and Horstemeyer, M.F. (2014). Solute effect on basal and prismatic slip systems of Mg. *J Phys Condens Matter.* 26.
- [57] Matli, P.R., Krishnan, A.V., Manakari, V., Parande, G., Chua, B.W., Wong, S.C.K. and et al. (2020). A new method to lightweight and improve strength to weight ratio of magnesium by creating a controlled defect. *J Mater Res Technol.* 9:3664–75.
- [58] Popov, II. and Shitikova, M.V. (2020). Impulse excitation technique and its application for identification of material damping: An overview. *IOP Conf Ser Mater Sci Eng.* 962.
- [59] Kaya, A.A., Celik, C., Ture, Y., Ataman, A., Arkin, E., Guglielmi, P. and et al. (2017). Elasticity Modulus and Damping in Some Novel Magnesium Alloys. *MME2017 Conference.*
- [60] Swarnakar, A.K., Donzel, L., Vleugels, J. and Van der Biest, O. (2009). High temperature properties of ZnO ceramics studied by the impulse excitation technique. *J Eur Ceram Soc.* 29:2991–8.
- [61] Roebben, G., Bollen, B., Brebels, A., Van Humbeeck, J. and Van Der Biest, O. (1997). Impulse excitation apparatus to measure resonant frequencies, elastic moduli, and internal friction at room and high temperature. *Rev Sci Instrum.* 68:4511–5.
- [62] Ganeshan, S., Shang, S.L., Wang, Y. and Liu, Z.K. (2009). Effect of alloying elements on the elastic properties of Mg from first-principles calculations. *Acta Mater.* 57:3876–84.
- [63] Hu, X.S., Zhang, Y.K., Zheng, M.Y. and Wu, K. (2005). A study of damping

- capacities in pure Mg and Mg-Ni alloys. *Scr Mater.* 52:1141–5.
- [64] Woodley, S.M. and Catlow, R. (2008). Crystal structure prediction from first principles. *Nat Mater.* 7:937–46.
- [65] Shebzukhova, I.G. and Aref'eva, L.P. (2015). Anisotropy in the electronic work function of crystals of 3d metals. *Bull Russ Acad Sci Phys.* 79:811–4.
- [66] Miedema, A.R. (1973). A Simple Model for Alloys- I. Rules for the Alloying Behaviour of Transition Metals. 33:149–60.
- [67] Luo, Y., Tang, Y., Guo, L. and Li, D.Y. (2021). Microstructure – electron work function relationship: A crucial step towards “electronic metallurgy.” *Mater Today Commun.* 26.
- [68] Lu, H., Hua, G. and Li, D. (2013). Dependence of the mechanical behavior of alloys on their electron work function - An alternative parameter for materials design. *Appl Phys Lett.* 103:10–4.
- [69] Hua, G. and Li, D. (2012). The correlation between the electron work function and yield strength of metals. *Phys Status Solidi Basic Res.* 249:1517–20.
- [70] Hua, G. and Li, D. (2011). Generic relation between the electron work function and Young's modulus of metals. *Appl Phys Lett.* 99:2011–4.
- [71] Miedema, A.R. (1973). The electronegativity parameter for transition metals: Heat of formation and charge transfer in alloys. *J Less-Common Met.* 32:117–36.
- [72] Abaspour, S. and Cáceres, C.H. (2015). Thermodynamics-Based Selection and Design of Creep-Resistant Cast Mg Alloys. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 46:5972–88.
- [73] Houska, C.R. and Averbach, B.L. (1959). Diffuse X-ray scattering in powder patterns Arising from static displacements in cubic solid solutions. *J Appl Phys.* 30:1532–4.
- [74] Suzuki, H. (1962). Segregation of solute atoms to stacking faults. *J Phys Soc Japan.* 17:322–5.
- [75] Cahn, R.W. and Davies, R.G. (1960). X-ray evidence for segregation of solute to

- stacking faults in a copper-aluminium alloy. *Philos Mag.* 5:1119–26.
- [76] van der Planken, J. and Deruyttere, A. (1969). Solution hardening of magnesium single crystals by tin at room temperature. *Acta Metall.* 17:451–4.
- [77] Akhtar, A. and Teghtsoonian, E. (1969). Solid solution strengthening of magnesium single crystals-I alloying behaviour in basal slip. *Acta Metall.* 17:1339–49.
- [78] Yang, K.V., Cáceres, C.H. and Easton, M.A. (2014). Strengthening micromechanisms in cold-chamber high-pressure Die-Cast Mg-Al alloys. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 45:4117–28.
- [79] Blake, A.H. and Cáceres CH. (2008). Solid-solution hardening and softening in Mg-Zn alloys. *Mater Sci Eng A.* 483–484:161–3.
- [80] Zhang, B., Gavras, S., Nagasekhar, A. V., Cáceres, C.H. and Easton, M.A. (2014). The strength of the spatially interconnected eutectic network in HPDC Mg-La, Mg-Nd, and Mg-La-Nd alloys. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 45:4386–97.
- [81] Zhiping, L., Shaoqing, Z., Yali, T. and Dongshan, Z. (1994). Microstructures of MgZnZrRE alloys with high RE and low ZN contents. *J Alloys Compd.* 209:275–8.
- [82] Abaspour, S. and Cáceres, CH. (2016). High Temperature Strength and Stress Relaxation Behavior of Dilute Binary Mg Alloys. *Metall Mater Trans A Phys Metall Mater Sci.* 47:1313–21.
- [83] Abaspour, S., Zambelli, V., Dargusch, M. and Cáceres, C.H. (2016). Atomic size and local order effects on the high temperature strength of binary Mg alloys. *Mater Sci Eng A.* 673:114–21.
- [84] Voigtländer, B. (2019). Atomic force microscopy designs.
- [85] Giessibl, F.J. (2003). Advances in atomic force microscopy. *Rev Mod Phys.* 75:949–83.
- [86] Melitz, W., Shen, J., Kummel, A.C. and Lee, S. (2011). Kelvin probe force microscopy and its application. *Surf Sci Rep.* 66:1–27.

- [87] García, R. and Pérez, R. (2002). Dynamic atomic force microscopy methods. vol. 47.
- [88] Albrecht, T.R., Grütter, P., Horne, D. and Rugar, D. (1991). Frequency modulation detection using high-Q cantilevers for enhanced force microscope sensitivity. *J Appl Phys.* 69:668–73.
- [89] Shebzukhova, I.G. and Aref'eva, L.P. (2019). Anisotropy of the Surface Energy and Work Function of IIB Metals. *Tech Phys.* 64:274–7.
- [90] Leamy, H.J. (1982). Charge collection scanning electron microscopy. *J Appl Phys.* 53.
- [91] Sadhal, S.S. (2011). Transport Phenomena with Drops and Bubbles. *Springer.* 279.
- [92] Mougnot, R., Sarikka, T., Ehrnstén, U. and Hänninen, H. (2019). Nanoindentation study of short-range ordering. *Mater Res Express.* 6.
- [93] Selvarajou, B., Shin, J.H., Ha, T.K., Choi, I.S., Joshi, S.P. and Han, H.N. (2014). Orientation-dependent indentation response of magnesium single crystals: Modeling and experiments. *Acta Mater.* 81:358–76.
- [94] Shin, J.H., Kim, S.H., Ha, T.K., Oh, K.H., Choi, I.S. and Han, H.N. (2013). Nanoindentation study for deformation twinning of magnesium single crystal. *Scr Mater.* 68:483–6.
- [95] Sánchez-Martín, R., Pérez-Prado, M.T., Segurado, J., Bohlen, J., Gutiérrez-Urrutia, I., Llorca, J. and et al. (2014). Measuring the critical resolved shear stresses in Mg alloys by instrumented nanoindentation. *Acta Mater.* 71:283–92.
- [96] Sánchez-Martín, R., Zambaldi, C., Pérez-Prado, M.T. and Molina-Aldareguia, J.M. (2015). High temperature deformation mechanisms in pure magnesium studied by nanoindentation. *Scr Mater.* 104:9–12.
- [97] Kozlov, A., Ohno, M., Arroyave, R., Liu, Z.K. and Schmid-Fetzer, R. (2008). Phase equilibria, thermodynamics and solidification microstructures of Mg-Sn-Ca alloys, Part 1: Experimental investigation and thermodynamic modeling of the ternary Mg-Sn-Ca system. *Intermetallics.* 16:299–315.
- [98] Nayeib-Hashemi, A.A. and Clark, J.B. (1986). The Ba-Mg (Barium-Magnesium)

- system. *Bull Alloy Phase Diagrams*. 7:144–9.
- [99] Munitz, A., Samuha, S., Brosh, E., Salhov, S., Derimow, N. and Abbaschian, R. (2018). Liquid phase separation phenomena in Al_{2.2}CrCuFeNi₂ HEA. *Intermetallics*. 97:77–84.
 - [100] Shimizu, H., Poirier, J.P. and Le Mouél, J.L. (2005). On crystallization at the inner core boundary. *Phys Earth Planet Inter*. 151:37–51.
 - [101] Luo, Y., Tang, Y., Guo, L. and Li, D.Y. (2021). Microstructure – electron work function relationship: A crucial step towards “electronic metallurgy.” *Mater Today Commun*. 26.
 - [102] Tran, R., Li, X.G., Montoya, J.H., Winston, D., Persson, K.A. and Ong, S.P. (2019). Anisotropic work function of elemental crystals. *Surf Sci*. 687:48–55.
 - [103] Shih, M., Miao, J., Mills, M. and Ghazisaeidi, M. (2021). Stacking fault energy in concentrated alloys. *Nat Commun*. 12:1–10.
 - [104] Dillamore, I.L., Butler, E. and Green, D. (1968). Crystal Rotations under Conditions of Imposed Strain and the Influence of Twinning and Cross-Slip. *Met Sci J*. 2:161–7.
 - [105] Smallman, R.E. and Green, D. (1964). The dependence of rolling texture on stacking fault energy. *Acta Metall*. 12:145–54.
 - [106] Groves, G.W. and Kelly, A. (1963). Independent slip systems in crystals. *Philos Mag*. 8:877–87.
 - [107] Ojima, M., Adachi, Y., Tomota, Y., Katada, Y., Kaneko, Y., Kuroda, K. and et al. (2009). Weak beam TEM study on stacking fault energy of high nitrogen steels. *Steel Res Int*. 80:4, 77–81.
 - [108] Lu, H. and Li, D. (2014). Correlation between the electron work function of metals and their bulk moduli, thermal expansion and heat capacity via the Lennard-Jones potential. *Phys Status Solidi Basic Res*. 251:815–20.
 - [109] Lu, H., Liu, Z., Yan, X., Li, D., Parent, L. and Tian, H. (2016). Electron work function-a promising guiding parameter for material design. *Sci Rep*. 6:1–11.

- [110] Zhang, J., Dou, Y., Liu, G. and Guo, Z. (2013). First-principles study of stacking fault energies in Mg-based binary alloys. *Comput Mater Sci.* 79:564–9.
- [111] Brar, H.S., Wong, J. and Manuel, M.V. (2012). Investigation of the mechanical and degradation properties of Mg-Sr and Mg-Zn-Sr alloys for use as potential biodegradable implant materials. *J Mech Behav Biomed Mater.* 7:87–95.
- [112] Bočan, J., Maňák, J. and Jäger, A. (2015). Nanomechanical analysis of AZ31 magnesium alloy and pure magnesium correlated with crystallographic orientation. *Mater Sci Eng A.* 644:121–8.
- [113] M. Klinger and A. Jäger. (2015) Crystallographic Tool Box (CrysTBox): automated tools for transmission electron microscopists and crystallographers. *Journal of Applied Crystallography*, 48(6)

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Yiğit TÜRE

Yabancı Dil : İngilizce

Eğitim ve Mesleki Geçmişi:

- 2008-2012, Anadolu Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Malzeme Bil. Ve Müh. A.B.D. (Lisans)
- 2013-2016, Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Malzeme Bil. Ve Müh. A.B.D. (Yüksek Lisans)
- 2015-2019, Bilecik Şeyh Edebali Üniversitesi, Mühendislik Fak., Metalurji ve Malz. Müh. Bölümü, Araştırma Görevlisi
- 2019-Halen, Eskişehir Teknik Üniversitesi, Porsuk MYO, Mekatronik Prog. Öğretim Görevlisi

Yayınları ve/veya Bilimsel/Sanatsal Faaliyetleri:

- Türe, Y., & Türe, C. (2021). Environmental and economic effects of fuel savings in driving phase resulting from substitution of light metals in European passenger car production. Transportation research record, 2675(9), 1163-1174.
- Türe, Y., & Türe, C. (2020). An assessment of using Aluminum and Magnesium on CO2 emission in European passenger cars. Journal of Cleaner Production, 247, 119120.
- Guglielmi, P., Kaya, A. A., Türe, Y., Ataman, A., Arkın, E., Sorgente, D., & Palumbo, G. (2019). Deformation Capacity of a Ternary Magnesium Alloy in a Gas-Forming Process at Elevated Temperatures. JOM, 71(6), 2087-2096.
- Calis Acikbas, N., Ture, Y., Gurlek, E., Ozcan, S., Soylu, S., Acikbas, G., & Gudu, T. (2018). Microstructural characterization, mechanical, physical and thermal properties of a diesel particulate filter. Arabian Journal for Science and Engineering, 43(3), 1383-1394.
- Sorgente, D., Turan, D., & Kaya¹, A. A. Changes in Elasticity Modulus and Damping in Some Novel Magnesium Alloys at Room and High Temperatures.