T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HBN/EPOKSİ NANOKOMPOZİTLERİN ÜRETİMİ VE ISIL-MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN YAPAY SİNİR AĞLARI İLE TAHMİNİ

Ali Samet ARICA

YÜKSEK LİSANS TEZİ
Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı
Malzeme Tezli Yüksek Lisans Programı

Danışman
Prof. Dr. Hale BERBER

Temmuz, 2025

T.C.

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HBN/EPOKSİ NANOKOMPOZİTLERİN ÜRETİMİ VE ISIL-MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN YAPAY SİNİR AĞLARI İLE TAHMİNİ

Ali Samet ARICA tarafından hazırlanan tez çalışması 11.07.2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı, Malzeme Tezli Yüksek Lisans Programı **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hale BERBER
Yıldız Teknik Üniversitesi
Danışman

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Hale BERBER, Danışman
Yıldız Teknik Üniversitesi _____

Doç. Dr. Peyman MAHOUTİ, Üye
Yıldız Teknik Üniversitesi _____

Dr. Öğr. Üyesi Burçin ÖZBAY KISASÖZ, Üye
Fatih Sultan Mehmet Vakıf Üniversitesi _____

Danışmanım Prof. Dr. Hale BERBER sorumluluğunda tarafımca hazırlanan "hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Üretimi ve Isıl-Mekanik Özelliklerinin Yapay Sinir Ağları ile Tahmini" başlıklı çalışmada veri toplama ve veri kullanımında gerekli yasal izinleri aldığımı, diğer kaynaklardan aldığım bilgileri ana metin ve referanslarda eksiksiz gösterdiğimi, araştırma verilerine ve sonuçlarına ilişkin çarpıtma ve/veya sahtecilik yapmadığımı, çalışmam süresince bilimsel araştırma ve etik ilkelerine uygun davrandığımı beyan ederim. Beyanımın aksinin ispatı halinde her türlü yasal sonucu kabul ederim.

Ali Samet ARICA
İmza

Aileme

TEŞEKKÜR

Bu yüksek lisans tezinin hazırlanmasında maddi ve manevi desteğini her zaman hissettiren başta aileme en derin minnet ve şükranlarımı sunarım. Onların sarsılmaz inancı, sabrı ve cesaret verici sözleri, bu sürecin en zorlu anlarında dahi bana güç vermiştir. Varlıklarıyla her zaman yanımda oldukları için teşekkür ederim.

Tez çalışmamın her aşamasında bilgi ve tecrübesiyle bana yol gösteren, kıymetli danışmanım Prof. Dr. Hale Berber'e içten teşekkürlerimi sunuyorum. Değerli katkıları, yönlendirmeleri ve akademik rehberliği, bu çalışmanın şekillenmesinde ve bilimsel niteliğinin artmasında büyük rol oynamıştır. Kendisiyle çalışmak benim için büyük bir onur olmuştur.

Bu çalışmanın gerçekleştirilmesine olanak tanıyan araştırma altyapısı, kaynaklar ve teşvik edici akademik ortam nedeniyle Yıldız Teknik Üniversitesi'ne ve Baykar Teknoloji'ye içten teşekkür ederim. Söz konusu kurumların sunduğu çok yönlü destekler, yalnızca tez sürecine değil, aynı zamanda araştırmacı kimliğimin şekillenmesine, bilimsel bakış açımın derinleşmesine ve hem akademik hem de mesleki gelişimimin güçlenmesine önemli ölçüde katkı sağlamıştır.

Tez çalışmamın deneysel boyutunda üretim ve test faaliyetlerine sundukları katkılarla sürece doğrudan destek olan kıymetli arkadaşlarım Mustafa Alperen Şakar, Rabia Caran, Burak Çetin, Yunus Orhun Kaya, Yunus Emre Özdemir, Abdüssamet Kesen ve Feyza Acar'a gönülden teşekkür ederim. Bu süreçte gösterdikleri özveri ve teknik destek, çalışmanın başarıyla tamamlanmasında önemli rol oynamıştır.

Tüm bunlara ek olarak, bu yolculukta her daim yanımda olan, manevi desteğiyle bana güç veren sevgili kardeşim Nur Pelin Arıca'ya da özel olarak teşekkür ederim.

Son olarak, bana inanan, yanımda olan ve bu süreçte desteklerini esirgemeyen tüm dostlarıma en içten teşekkürlerimi sunarım. Bu tez, onların katkıları olmadan tamamlanamazdı.

Ali Samet ARICA

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR v

İÇİNDEKİLER vi

SİMGE LİSTESİ viii

KISALTMA LİSTESİ ix

ŞEKİL LİSTESİ xi

TABLO LİSTESİ xiii

ÖZET xiv

ABSTRACT xvi

1 GİRİŞ 18

1.1 Literatür Özeti…… 18

1.2 Tezin Amacı……...21

1.3 Hipotez……...22

2 POLİMER NANOKOMPOZİTLER 23

2.1 Sınıflandırma……..23

2.1.1 Boyutsal Sınıflandırma…….. 23

2.2 Üretim Yöntemleri…… 40

2.3 Uygulamaları……..43

3 YAPAY SİNİR AĞLARI VE OPTİMİZASYON 52

3.1 Makine Öğrenimi Yaklaşımlarına Genel Bakış……52

3.2 Makine Öğrenimi Yöntemleri……53

3.3 Yapay Sinir Ağlarının Temel Yapısı ve Öğrenme Mekanizmaları……54

3.4 Derin Yapay Sinir Ağı Mimarileri……59

3.5 Veri Hazırlama, Karakterizasyon Teknikleri ve Model Performansı… 64

3.6 Malzeme Bilimi Uygulamalarında Veri Toplama Süreci…….. 64

3.7 Eksik ve Aykırı Verilerin Yönetimi……...65

3.8 Veri Ön İşleme ve Normalizasyon Süreçleri…… 65

3.9 Aşırı Öğrenme (Overfitting) Problemi ve Çözüm Yöntemleri…….. 66

3.10 YSA Yöntemlerinin Malzeme Bilimindeki Uygulama Örnekleri……. 68

4 MALZEMELER VE YÖNTEMLER 70

4.1 Kullanılan Kimyasal Maddeler…….. 70

4.2 hBN-110 Nanotaneciklerinin Fonksiyonelleştirilmesi……...70

4.3 hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Üretimi…….. 71
4.4 hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Karakterizasyonu……...74
4.5 Yapay Sinir Ağı Modelinin Geliştirilmesi……80
5 BULGULAR VE TARTIŞMA 86
5.1 FTIR Analizi…….. 86
5.2 SEM Analizi……...88
5.3 DSC Analizi……... 92
5.4 Mekanik Çekme Testi…… 95
5.5 Mekanik Basma Testi…….99
5.6 Mekanik Eğilme Testi……..101
5.7 Gerçekleştirilen Deneylerin Parametre Matrisindeki Yeri……...104
5.8 Model Performansı……...106
6 SONUÇ VE ÖNERİLER 116
KAYNAKÇA 119
EK- A MODEL AÇIK KAYNAK KODU 133
TEZDEN ÜRETİLMİŞ YAYINLAR 134

SİMGE LİSTESİ

%	Yüzde
>	Büyüktür
B	Bor
°	Derece
C	Celcius
cm^3	Santimetreküp
dB	Desibel
dk	Dakika
g	Gram
H	Hidrojen
K	Kelvin
Kg	Kilogram
M	Metre
m^3	Metreküp
mL	Mililitre
mPa	Milipaskal
MPa	Megapascal
µm	Mikrometre
n	Nano
N	Azot
O	Oksijen
OH	Hidroksil
S	Saniye
Si	Silisyum
Σ	Toplam Sembolü
II	Paralel Yön
⊥	Dik Yön
Ω	Ohm
W	Watt

KISALTMA LİSTESİ

0B	Sıfır Boyutlu
1B	Bir Boyutlu
2B	İki Boyutlu
3B	Üç Boyutlu
ABS	Akrilo-nitril-bütadien-stiren
ANN	Yapay Sinir Ağları (Artifical Neural Networks)
APTES	(3-aminopropil)trietoksisilan
BC	Bakteriyel Selüloz
BNNS	Bor Nitrür Nanolevhaları (Boron Niride Nanosheets)
BMC	Yığın Kalıplama Bileşiği
CFRP	Karbon Elyaf Takviyeli Polimer
CNN	Evrişimsel Sinir Ağları (Convolutional Neural Networks)
CNT	Karbon Nanotüp
CVD	Kimyasal Buhar Biriktirme
DSC	Diferansiyel Taramalı Kalorimetre (Differential Scannig Calorimetry)
DVM	Destek Vektör Makineleri
DT	Karar Ağaçları (Decision Tree)
FTIR	Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi
EMI	Elektromanyetik Girişim
GO	Grafen Oksit
GPa	Gigapascal
GRU	Kapılı Tekrarlayan Birim (Gated Recurrent Unit)
HAP	Hidroksiapatit
hBN	Altıgen Bor Nitrür (Hexagonal Boron Nitride)
ILSS	Katmanlar Arası Kayma Mukavemeti (Interlaminar Shear Stress)
IQR	İnterkuartil Aralık
LSTM	Kısa Süreli Hafıza (Long Short-Term Memory)
MAE	Ortalama Mutlak Hata (Mean Absolute Error)
MFC	Mikrofibriller Selüloz
ML	Makine Öğrenimi (Machine Learning)

MLPNN	Çok Katmanlı Algılayıcı Sinir Ağları (Multi Layer Perceptron Neural Networks)
MOÇ	Metal Organik Çerçeveler
MPa	Megapascal
MSE	Ortalama Kare Hata (Mean Squared Error)
MWCNT	Çok Duvarlı Karbon Nanotüp
NCC	Nanokristalin Selüloz
PA	Poliamid
PC	Polikarbonat
PEEK	Polietereterketon
PLA	Polilaktikasit
PMMA	Polimetilmetakrilat
PI	Poliimid
PP	Polipropilen
PET	Polietilenterafitalat
PNK	Polimer Nanokompozitler
ReLU	Doğrultulmuş Doğrusal Birim (Rectified Linear Unit)
RL	Pekiştirmeli Öğrenme (Reinforcement Learning)
RNN	Yinelenen Sinir Ağları (Recurrent Learning)
SEM	Taramalı Elektron Mikroskobu (Scanning Electron Microscope)
SMC	Levha Kalıplama Bileşiği
SiC	Silisyum Karbür
SWCNT	Tek Duvarlı Karbon Nanotüp
T_g	Camsı Geçiş Sıcaklığı
TEM	Geçirimli Elektron Mikroskobu (Transmission Electron Microscope)
TPa	Terapascal
UV	Morötesi (Ultraviolet)
YSA	Yapay Sinir Ağları
YZ	Yapay Zeka
XRD	X-Işını Kırınımı (X-Ray Diffraction)

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1 Nanotaneciklerin boyutsal sınıflandırması [27] 24
Şekil 2.2 2B nanotaneciklerın gaz geçirgenliği azaltma mekanizması [33] 25
Şekil 2.3 Epoksi gruplarının aminler ile reaksiyonu [39] 27
Şekil 2.4 APTES kimyasal yapısı 30
Şekil 2.5 APTES fonksiyonelleştirme süreci [50] 30
Şekil 2.6 Altıgen bor nitrür (hBN) yapısı [71] 35
Şekil 2.7 hBN nanolevhaların kovalent olmayan ve kovalent modifiyeleri [33] .. 38
Şekil 2.8 Çözelti döküm yöntemi ile nanokompozit üretimi [91] 41
Şekil 2.9 Eriyik karıştırma yöntemi ile nanokompozit üretimi [86] 42
Şekil 2.10 Yerinde polimerizasyon yöntemi ile nanokompozit üretimi [95] 43
Şekil 3.1 Makine öğrenimi iş akış şeması [133] 53
Şekil 3.2 Makine öğrenimi yöntemleri ana başlıkları [136] 53
Şekil 3.3 Memeli sinir hücresi yapısı şematik gösterimi [139] 55
Şekil 3.4 Yapay nöron yapısı şematik gösterimi [137] 55
Şekil 3.5 Temel ysa yapısı şematik gösterimi [140] 56
Şekil 3.6 Evrişimsel sinir ağı yapısı [147] 62
Şekil 4.1 hBN epoksi nanokompozit üretim prosesi akış şeması 73
Şekil 4.2 ISO 527 çekme testi numune hazırlama kalıbı 75
Şekil 4.3 Videoekstansometre ölçümleri için etiketlenen test numuneleri 76
Şekil 4.4 Çekme testi numunesine ait geçerli kırılma görüntüsü 76
Şekil 4.5 Test numuneleri model tasarımı 77
Şekil 4.6 Test numuneleri silikon kalıbı 78
Şekil 4.7 ISO 604 basma testi modül ölçümü 79
Şekil 4.8 ISO 604 basma testi mukavemet ölçümü 79
Şekil 4.9 ISO 178 üç nokta eğilme testi 80
Şekil 4.10 Zwickroell mekanik test cihazı ısı kabini 80
Şekil 5.1 hBN nanotaneciklerinin FTIR spektrumları 87
Şekil 5.2 %0.5-hBN-110/Epoksi nanokompozit SEM görüntüsü (x6000) 90
Şekil 5.3 %0.1-hBN-110-APTES/Epoksi nanokompoziti SEM görüntüsü (x35000) 91
Şekil 5.4 %0.1-hBN-40/Epoksi nanokompozitinin (x2500) ve (x50000)'deki SEM görüntüleri 92
Şekil 5.5 Katkılandırılmamış saf epoksi DSC termogramı 93
Şekil 5.6 Nanokompozitlerin camsı geçiş sıcaklığı değerleri 95
Şekil 5.7 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C'de çekme testi elastik modül değerleri 97
Şekil 5.8 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C çekme testi mukavemet değerleri 98
Şekil 5.9 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 80°C çekme testi elastik modül değerleri 98
Şekil 5.10 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 80°C çekme testi mukavemet değerleri 99
Şekil 5.11 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C basma testi elastik modül değerleri 100
Şekil 5.12 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C basma testi mukavemet değerleri 101
Şekil 5.13 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C eğilme testi elastik modül değerleri 102

Şekil 5.14 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C eğilme testi mukavemet değerleri 103
Şekil 5.15 Farklı çıktı özellikleri için yapay sinir ağı tahmin doğruluklarının karşılaştırılması 107
Şekil 5.16 Yapay sinir ağı modellerinin farklı malzeme özellikleri için öğrenme davranışları: (a) basma modülü @25°C, (b) çekme modülü @25°C, (c) basma mukavemeti @25°C, (d) çekme modülü @80°C, (e) çekme mukavemeti @25°C, (f) eğme modülü @25°C, (g) çekme mukavemeti @80°C, (h) eğme mukavemeti @25°C, (ı) cam geçiş sıcaklığı (Tg)109
Şekil 5.17 Deneysel veriler ile ysa tahminleri arasındaki ilişki – çoklu özellik analizi: (a) çekme modülü (MPa) @80 °C, (b) basma modülü (MPa) @25 °C, (c) çekme modülü (MPa) @25 °C, (d) basma mukavemeti (MPa) @25 °C, (e) çekme mukavemeti (MPa) @25 °C, (f) eğme modülü (gpa) @25 °C, (g) eğme mukavemeti (MPa) @25 °C, (h) çekme mukavemeti (MPa) @80 °C ve (ı) camsı geçiş sıcaklığı – Tg (°C).. 111
Şekil 5.18 Farklı mekanik ve termal özellikler için yapay sinir ağı (ysa) modelleri ile elde edilen shap (shapley additive explanations) açıklanabilirlik analizi sonuçları. a: çekme modülü (MPa) @80°C, b: basma mukavemeti (MPa) @25°C, c: çekme modülü (MPa) @25°C, d: basma modülü (MPa) @25°C, e: eğilme mukavemeti (MPa) @25°C, f: eğilme modülü (gpa) @25°C, g: çekme mukavemeti (MPa) @25°C, h: çekme mukavemeti (MPa) @80°C, ı: camsı geçiş sıcaklığı (Tg, °C)..... 114

TABLO LİSTESİ

Tablo 2.1 Epoksi reçinenin çeşitli polimerler ile mekanik özelliklerinin kıyaslanması [40] 27
Tablo 2.2 Altıgen bor nitrür özellikleri [77] 36
Tablo 2.3 Epoksi ve hBN fiziksel özellikleri karşılaştırması [89] 40
Tablo 3.1 YSA'larda sık kullanılan aktivasyon fonksiyonları [141] 57
Tablo 3.2 Sık kullanılan YSA türleri [141] 60
Tablo 4.1 Nanokompozit bileşimleri ve numune kodları 74
Tablo 4.2 Hiperparametre özellikleri 85
Tablo 5.1 Deneysel parametreler ve parametre sayıları 104
Tablo 5.2 Malzeme test matrisi 105

ÖZET

hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Üretimi ve Isıl-Mekanik Özelliklerinin Yapay Sinir Ağları ile Tahmini

Ali Samet ARICA

Metalurji ve Malzeme Mühendisliği Anabilim Dalı
Malzeme Tezli Yüksek Lisans Programı
Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Prof. Dr. Hale BERBER

Altıgen bor nitrür (hBN), yüksek ısıl iletkenliği, kimyasal kararlılığı ve elektriksel yalıtkanlığı sayesinde polimer matrisli nanokompozitlerin (PNK) işlevselliğini artıran önemli bir katkı malzemesidir. Bu özellikleriyle hBN; havacılık, otomotiv ve elektronik gibi yüksek performans gerektiren uygulamalarda geniş bir kullanım potansiyeli sunmaktadır. Ancak PNK sistemlerinin nihai performansı yalnızca katkı fazının varlığıyla sınırlı olmayıp; katkı oranı, nanotanecik boyutu, çözücü türü ve yüzey fonksiyonlandırma gibi çok sayıda parametrenin birlikte etkisiyle belirlenmektedir. Bu çok değişkenli yapıların anlaşılması, doğrusal olmayan ilişkileri modelleyebilen yapay sinir ağı (YSA) gibi makine öğrenimi temelli yöntemlerin önemini artırmaktadır.

Bu çalışmada, iki temel parametre olarak belirlenen nanotanecik boyutu (40 nm ve 110 nm) ile katkı oranlarının (ağırlıkça %0.1–0.5), hBN katkılı epoksi nanokompozitlerin ısıl ve mekanik özellikleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ayrıca çözücü türü ve yüzey fonksiyonlandırma gibi değişkenler de değerlendirilmiştir. Bulgular, özellikle ağırlıkça %0.1 oranında 40 nm boyutundaki hBN katkısıyla hazırlanan kompozitte camsı geçiş sıcaklığının (Tg) yaklaşık 5 °C artarak 89 °C'ye ulaşmasıyla, daha küçük boyutlu taneciklerin ısıl kararlılığa olumlu etkide bulunduğunu göstermiştir.

Gerçekleştirilen mekanik testler sonucunda 40 nm boyutlu hBN tanecikleriyle hazırlanmış ağırlıkça %0.1 katkılı numunenin (EP/ETH-hBN-40-0.1) basma mukavemetinde %210'a varan bir artış elde edilmiştir. Buna karşılık, aynı katkı

oranında 110 nm boyutlu ve üstelik yüzey fonksiyonlandırılmış tanecik içeren numunede (ASE-hBN-110-APTES-0.1) ise, basma dayanımı yalnızca %1 oranında artmıştır. Bu sonuçlar hBN katkılı epoksi nanokompozitlerde özellikle tanecik boyutunun ısıl davranış yük ve transferi mekanizmaları üzerindeki belirleyici etkisini açığa çıkarmıştır.

Deneysel verilerle oluşturulan çok katmanlı YSA modelleri, katkı parametreleri ile mekanik özellikler arasındaki doğrusal olmayan ilişkileri başarıyla modellemiştir. Ancak sentetik verilerle eğitilen modellerin tahmin doğruluğunun düşük olması, fiziksel gerçekliğe dayalı yüksek kaliteli verilerin önemini ortaya koymuştur.

Anahtar Kelimeler: altıgen bor nitrür (hBN), epoksi, polimer nanokompozitler, yapay sinir ağları (YSA), özellik tahmini

ABSTRACT

Production of hBN/Epoxy Nanocomposites and Prediction of Thermal-Mechanical Properties with Artificial Neural Networks

Ali Samet ARICA

Department of Metallurgical and Materials Engineering
Master of Science Thesis

Supervisor: Prof. Dr. Hale BERBER

Hexagonal boron nitride (hBN) is a promising nanoparticle for enhancing the functionality of polymer matrix nanocomposites (PMCs) due to its high thermal conductivity, chemical stability, and electrical insulation properties. These characteristics make hBN particularly attractive for high-performance applications in the aerospace, automotive, and electronics industries. However, the final performance of PMCs is not solely dependent on the presence of the nanoparticle phase, but rather is determined by the combined effects of various parameters such as nanoparticle loading, particle size, solvent type, and surface functionalization. Understanding these multivariate systems underscores the importance of machine learning-based approaches, such as artificial neural networks (ANNs), which are capable of modeling nonlinear relationships.

In this study, the effects of two key parameters—nanoparticle size (40 nm and 110 nm) and loading level (0.1–0.5 wt%)—on the thermal and mechanical properties of hBN-based epoxy nanocomposites were investigated. Additionally, the influence of solvent type and surface functionalization was evaluated. The results revealed that in the system prepared with 40 nm hBN at 0.1 wt%, the glass transition temperature (Tg) increased by approximately 5 °C to reach 89 °C, demonstrating the positive contribution of smaller nanoparticles to thermal stability.

Mechanical testing showed that the sample containing 0.1 wt% of 40 nm hBN nanoparticles (EP/ETH-hBN-40-0.1) exhibited up to a 210% increase in

compressive strength compared to neat epoxy. In contrast, the sample incorporating 110 nm surface-functionalized nanoparticles at the same loading level (ASE-hBN-110-APTES-0.1) showed only a marginal 1% improvement. These findings highlight the critical role of nanoparticle size in governing the thermal behavior and load transfer mechanisms in hBN-based epoxy nanocomposites.

Multilayer ANN models developed using experimental data successfully captured the nonlinear relationships between nanoparticle parameters and mechanical performance. However, models trained with synthetic data exhibited lower predictive accuracy, emphasizing the vital importance of high-quality, experimentally grounded data for reliable modeling.

Keywords: hexagonal boron nitride (hBN), epoxy, polymer nanocomposites, artificial neural networks (ANN), property prediction

1
GİRİŞ

1.1 Literatür Özeti

Nanoteknoloji, modern malzeme mühendisliğinde yüksek mukavemetli, hafif ve dayanıklı kompozit malzemelerin geliştirilmesinde önemli ilerlemeler sağlamıştır. Nanomalzemelerle güçlendirilmiş polimer kompozitler, otomotiv, havacılık ve elektronik gibi sektörlerde geniş bir uygulama yelpazesi sunarak performans iyileştirmelerine olanak tanımaktadır. Nanokompozit kavramı 1990'larda popülerlik kazanmış; makro veya mikro boyuttaki dolgular yerine nano ölçekli parçacıkların polimer matrisle birleştirilmesi, yüksek yüzey alanı ve üstün dağılım avantajları sunarak malzemelerde çarpıcı iyileşmeler yapabileceği öngörüsüne dayanmıştır [1].

Altıgen bor nitrür (hBN) nanomalzemesi, yüksek ısıl iletkenlik, kimyasal kararlılık ve elektriksel yalıtkanlık gibi özellikleriyle polimer matrislerle kombinasyon için ideal bir nanodolgu malzemesi adayıdır. Bor nitrür (BN) bileşiği, tarihte ilk defa William Henry Balmain tarafından 1842 yılında sentezlenmiştir [2]. Bu dönemde BN'ün amorf, vürtzit ve kübik gibi farklı fazları henüz netleştirilmemiş olsa da "beyaz grafit" olarak anılan altıgen bor nitrür (hBN), öncelikle 1940'lı yıllarda Japonya'da kozmetik sektöründe kullanılmış ve daha sonra özellikle yüksek sıcaklık ve kimyasal direnç gerektiren uygulamalarda 20. yüzyılın başlarından itibaren ilgi görmüştür [3]. Endüstriyel ölçekte üretim ve kullanım ise, 1940-1950'li yıllarda hBN nanotaneciklerinin üretim teknolojisindeki gelişmelerle yaygınlaşmaya başlamıştır [4].

Epoksi reçineler, 1930'larda keşfedilen ilk termoset polimerler arasında yer almaktadır. Bu yıllarda İsviçreli kimyager Dr. Pierre Castan ve Amerikan kimyager Dr. Sylvan Greenlee birbirlerinden bağımsız olarak ilk defa dental protezler için bu sentetik reçineleri geliştirmiştir [5]. 1940-1950'li yıllarda endüstriyel üretimlerinin hız kazanmasıyla birlikte, elektriksel yalıtım, kimyasal direnç ve yüksek yapışma özellikleri sayesinde havacılık, otomotiv ve savunma gibi alanlarda yoğun şekilde benimsenmiştir [6]. 1960'lardan itibaren cam veya karbon fiber takviyeli epoksilerin yaygın kullanımı, epoksi reçinelerin yüksek performanslı yapısal

malzemeler arasındaki yerini pekiştirmiştir. Ancak düşük ısıl iletim özellikleri, epoksilerin ısı yönetimi gereken uygulamalarda yetersiz kalmasına yol açmıştır [7]. Bu eksikliği gidermek üzere, hBN gibi yüksek ısıl iletkenliğe sahip dolgu maddeleri, epoksi matrisine eklenerek kompozitlerde ısı yayma kapasitesinin iyileştirilmesi amaçlanmıştır. Erken dönem araştırmalarda, homojen dağılım zorlukları ve yetersiz arayüz etkileşimleri, beklenen mekanik ve ısıl performans artışını kısıtlamıştır. Örneğin bazı çalışmalarda hBN dolgu oranını yükseltmenin ısıl iletkenliği arttırdığı fakat aynı zamanda çekme dayanımını belirli bir düzeyin ötesinde düşürdüğü rapor edilmiştir; bu çelişkili bulgular, dolgunun epoksi içinde yeterince homojen dağılmamasından ve dolgu-matris ara yüzey bağının zayıflığından kaynaklanmaktadır [8].

2000'li yıllarda ultrasonik karıştırma, silan kaplama ve plazma fonksiyonlandırma gibi gelişmiş sentez/dağıtma yöntemleriyle hBN/epoksi nanokompozitlerdeki ısıl ve mekanik özelliklerde belirgin artışlar sağlanmıştır [9]. Bu dönemde yapılan bazı çalışmalarda ısı iletkenliğinde çarpıcı yükselmeler rapor edilirken, bazı diğer çalışmalar aynı oranda iyileşme gösterememiştir; bu çelişkili sonuçlar ise dolgu oranı, tanecik boyutu, yüzey fonksiyonlandırma derecesi ve kürleme koşullarının farklılığıyla ilişkilendirilmiştir [10]. 2010'lardan günümüze, elektronik ısı yönetimi ve hafif-yüksek mukavemetli yapı malzemeleri için hBN/epoksi sistemlerine yönelik araştırmalar artmıştır. Özellikle yüzey fonksiyonelleştirme yöntemlerindeki ilerlemeler, hBN parçacıklarının epoksi matrise daha iyi bağlanmasını sağlamış ve bu sayede hem ısıl iletkenlik hem de mekanik mukavemetin birlikte artırılabildiği başarılı sonuçlar elde edilmiştir [11].

Yapay zekâ ve makine öğrenimi kavramları, 1950'lerdeki Turing testinden ve 1960'lardaki ilk algılayıcı (perceptron) modellerinden itibaren akademik literatürde yer edinmiştir [12], [13]. Yapay sinir ağları (YSA), beyin sinapslarının işleyişini modelleyerek öğrenme ve karar verme mekanizmalarını taklit eden bir algoritma ailesi olarak gelişimini sürdürmüştür. Geri yayılım (backpropagation) algoritmasının 1980'lerin sonunda ortaya çıkması, YSA tabanlı uygulamalar ciddi biçimde yaygınlaştırmıştır [14].

Malzeme biliminde YSA kullanımı, 1990'larda metal alaşımları ve seramiklerde sertlik, korozyon, mukavemet tahmini gibi alanlarla başlamıştır [15]. 2000'lerde ise polimer kompozitlerin çok sayıda parametreye sahip karmaşık özellik ilişkileri

nedeniyle YSA açısından ilgi çekici bir alan oluşmuştur (Ghaemy ve ark., 2001). 2010'larla birlikte "büyük veri (big data)" olgusu ve yüksek işlem kapasiteli donanımlar, makine öğrenimi tekniklerini (YSA, destek vektör makineleri, karar ağaçları, genetik algoritmalar vb.) malzeme tasarımında daha erişilebilir kılmıştır [16].

Yapay sinir ağlarının yanı sıra, destek vektör makineleri (DVM), derin öğrenme veya karar ağaçları gibi farklı makine öğrenimi yöntemleri de literatürde çalışılmaktadır [17]. Yapay sinir ağları, özellikle doğrusal olmayan ve çok boyutlu verilerde iyi bir genelleme yeteneği göstermesi nedeniyle tercih edilmiştir [18]. Bununla birlikte, DVM veya derin öğrenme yöntemlerinin de yüksek doğrulukta tahminler sunduğu durumlar vardır; veri setinin büyüklüğü, gürültü oranı ve parametre sayısı gibi etkenler, yöntemin etkinliğini belirlemede kritiktir.

Makine öğrenimi (MÖ) ve özellikle YSA, çok boyutlu parametre uzayına sahip malzeme sistemlerinde deneysel deneme-yanılma gereksinimini azaltarak araştırma süreçlerini hızlandırma potansiyeli taşımaktadır. hBN/epoksi nanokompozitler, dolgu oranı, parçacık boyutu, yüzey

, kürleme sıcaklığı, kürleme süresi, karıştırma hızı gibi değişkenlerin mekanik (çekme, eğilme, darbe dayanımı vb.) ve ısıl (camsı geçiş sıcaklığı, ısıl iletkenlik vb.) çıktılara aynı anda etki ettiği karmaşık bir sistemdir [19]. Bu noktada, literatürde hBN/epoksi sistemlerinde YSA'nın kullanıldığı çalışmaların sınırlı olduğu; ancak malzeme optimizasyonuna dair mevcut örneklerde olumlu bulgular elde edildiği görülmektedir [20]. Örneğin, YSA modelleri, deneysel verilerle eğitildikten sonra farklı hBN oranları ve yüzey kaplama tekniklerine ait mekanik ve ısıl özellikleri yüksek doğruluk seviyesinde tahmin edebilmektedir [21]. Bazı çalışmalar, genetik algoritma veya bulanık mantık yaklaşımları ile YSA'nı birleştirerek optimum üretim parametrelerini saptamaya çalışmıştır [22]. Buna karşın, veri setinin boyutu ve ölçüm belirsizlikleri, bu modellerin güvenilirliğini sınırlayabilmekte, dolayısıyla büyük ölçekte genelleme yapabilmek için daha kapsamlı veri tabanlarına gereksinim duyulmaktadır [23].

Ek olarak, transfer öğrenme (transfer learning) ve derin sinir ağları (deep neural networks) gibi ileri yöntemlerin kullanımı, veri sıkıntısı çekilen durumlarda model performansını artırabilmektedir [24], [25]. Bu tür yaklaşımların hBN/epoksi

sistemlerinde daha yaygın benimsenmesi halinde, literatürdeki "çoklu özellik optimizasyonu" hedefine ulaşmak daha kolay hale gelebilir [26]. Ancak hâlen, farklı boyut ve yüzey işlem kombinasyonlarına dair veri setlerinin sınırlı oluşu, doğrulamanın (validation) önünde bir engel teşkil etmektedir.

Bu çalışmada, hBN nanotanecikleri ile takviye edilmiş epoksi esaslı polimer nanokompozitlerin morfolojik, ısıl ve mekanik özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir. Çalışma kapsamında, 40 nm ve 110 nm boyutundaki hBN nanotanecikleri farklı katkı oranlarında (ağırlıkça %0.1–0.5) epoksi matris içerisine izopropil alkol, etanol ve aseton gibi farklı çözücülerde dağıtılarak numuneler hazırlanmıştır. Ayrıcı (3-aminopropil)trietoksisilan APTES ile yüzey fonksiyonelleştirmenin nanotaneciklerin matris içindeki dağılımına fonksiyonlandırmanın etkileri değerlendirilmiştir. Nanokompozitler Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR), Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve Diferansiyel Taramalı Kalorimetre (DSC) analizleriyle karakterize edilerek yapısal, morfolojik ve ısıl özellikler incelenmiştir. Ayrıca çekme, basma ve eğilme testleri ile mekanik performans üzerinde tanecik boyutu, katkı oranı, çözücü türü ve yüzey fonksiyonlandırma gibi parametrelerin etkileri araştırılmıştır. Elde edilen deneysel veriler ışığında, çok katmanlı YSA modelleri kurulmuş ve bu modeller aracılığıyla seçilen mekanik özelliklerin tahmin edilmesi hedeflenmiştir. Ayrıca, deneysel verilerle oluşturulan eğitim veri seti üzerinden sentetik veri üretimi yapılmış ve bu sentetik veri kullanılarak modelin tahmin performansı değerlendirilmiştir. Böylece, veri kalitesinin ve fiziksel gerçekliğin korunmasının makine öğrenimi tabanlı tahmin modellerinin başarısı üzerindeki etkisi ortaya konmuştur.

1.2 Tezin Amacı

Bu çalışmanın amacı ileri mühendislik uygulamaları için hBN/epoksi nanokompozitlerinde hBN taneciklerinin katkı oranının, tanecik boyutunun, dağıtıcı çözücü türünün ve yüzey fonksiyonlandırmanın ısıl ve mekanik performansı üzerine etkilerini incelenmesi ve elde edilen verilerle eğitilen yapay sinir ağı (YSA) modelleri aracılığıyla, bu parametrelerin etkilerinin tahmin edilerek veri odaklı malzeme analizinin gerçekleştirilmesidir.

1.3 Hipotez

Bu tez çalışma kapsamında aşağıdaki hipotezler araştırılacaktır:

1. hBN yükleme oranı, hBN tanecik boyutu, dağıtıcı çözücü türü ve yüzey fonksiyonlandırma parametreleri gibi üretim değişkenleri, hBN/epoksi nanokompozitlerin hem mekanik hem de ısıl özelliklerini belirleyici faktörler olabilir.
2. Kısıtlı deneysel veri ile eğitilmiş bir yapay sinir ağı modeli, hBN/epoksi nanokompozitlerin performansını başarılı bir şekilde tahmin edebilir.

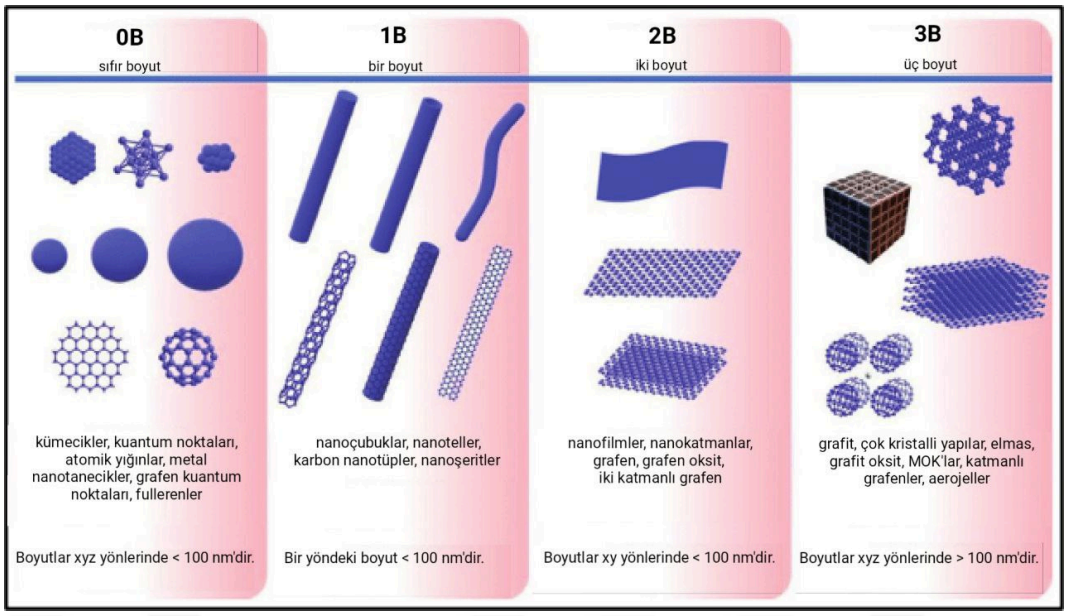
2
POLİMER NANOKOMPOZİTLER

Polimer nanokompozitler genellikle en az bir boyutta 1-100nm arasında nano ölçekli dolgu malzemelerinin bir polimer matris içerisinde dağıtılmasıyla oluşan yapılar olarak adlandırılır. Matrisin nano ölçekli bir takviye ile takviyelendirilmesi, geleneksel mikro veya makro kompozitlerle kıyaslandığında temelde yüzey alanın hacme oranla çok artması dolayısıyla önemli ölçüde gelişmiş mekanik, ısıl veya elektriksel özelliklerin kazandırılmasına yol açabilmektedir. Bu arttırılmış yüzey alanı etkileşimi nano tanecik ile polimer matrisi arasında daha yoğun bir etkileşimi kolaylaştırır ve sonuç olarak kompozit malzemenin makroskobik özelliklerinin iyileşmesine yol açar. Bu kazanımlar ayrıca nano tanecik türü, dolgunun matris içerisindeki dağılım seviyesi, dolgu ile polimer matris arayüzeyindeki etkileşimler ve kullanılan proses yöntemleri gibi birden fazla faktörün lineer veya lineer olmayan ilişkilerine bağlıdır.

2.1 Sınıflandırma

2.1.1 Boyutsal Sınıflandırma

Nanotanecikler en temelde boyutsal olarak sınıflandırılırlar. Bu bölümde boyutsal sınıflandırmalar detaylıca açıklanmış ve kullanım alanlarıyla örneklendirilmiştir. Nanotanecikler genellikle dört ana boyutsal kategoriye ayrılır. Sıfır boyutlu (0B) nanotanecikler; kuantum noktaları, nanotanecikler, fuleren yapılarını kapsar. Bir boyutlu (1B) nanotanecikler ise; nano tüpler, nano çubuklar ve nano tel yapılarını kapsar. İki boyutlu (2B) nanotanecikler; grafen, grafen oksit, altıgen bor nitrür gibi katmanlı iki boyutlu levhalardan oluşur. Son olarak, üç boyutlu (3B) nanotanecikler ise grafit, metal organik iskeleler ve aerojel yapılarından oluşur. Yapıların görünüşleri Şekil 2.1'de paylaşılmıştır.

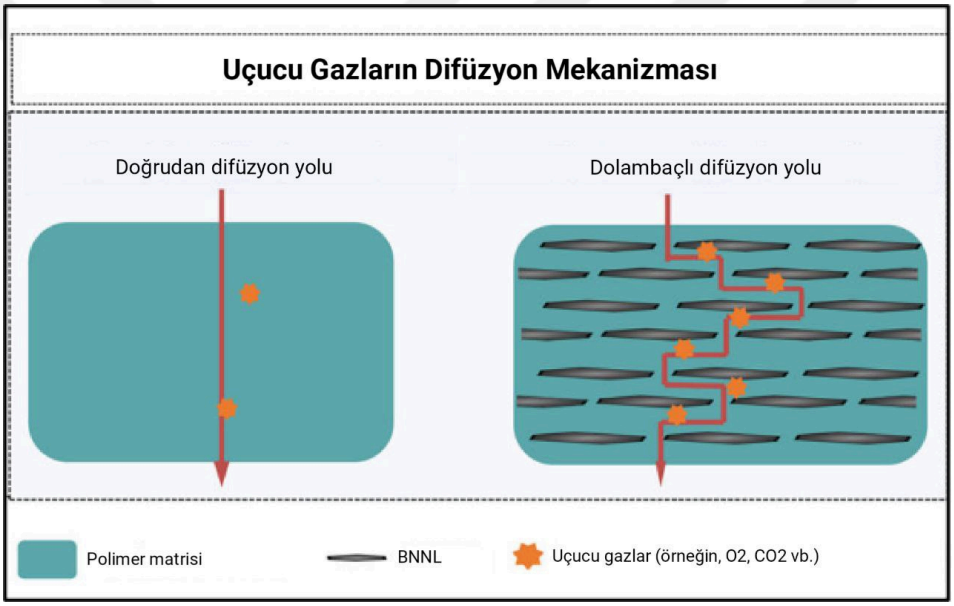


Şekil 2.1 Nanotaneciklerin boyutsal sınıflandırması [27]

Sıfır boyutlu nanotanecikler, 3 boyutta da ölçüleri 1-100nm aralığında olması dolayısıyla genellikle küresel veya küresilimsi formdadır. İzotropik geomektrik yapıları, polimer matrisi içerisinde homojen dağılıma yol açmaktadır ki bu durum özelliklerin yapı içerisinde homojen artışını sağlamaktadır. Örneğin silika nanotaneciklerın epoksi reçineler içerisinde kullanılmasıyla havacılık motor parçalarında ve kaplamalarda ısıl ve mekanik dayanım artışı gözlemlenmektedir [27]. Gümüş nanotaneciklerın kullanımıyla da matris içerisinde elektriksel iletkenlik artışı sağlanır ve böylece kompozit hava araçları yapısallarının elektromanyetik kalkanlama özellikleri iyileştirilir [28]. Ancak yüksek yüzey enerjileri, nanotaneciklerin topaklanmasına yol açmakta ve yüzey fonksiyonlandırmayla dağılımın stabilizasyonuna ihtiyaç duyulmaktadır.

Bir boyutlu nanotaneciklerın iki boyutta ölçüleri nano seviyedeyken bir boyuttaki ölçüleri mikron seviyesine uzayabilmektedir. Metal nano teller, nano çubuklar ve birçok uygulamada kullanılan nanotüpler 1B malzemeler kategorisinde yer almaktadır. Yüksek en-boy oranı dolayısıyla matris malzemesine yönlü olarak özellik artışı sağlayabilen 1B nanotanecikler genellikle elektriksel ve ısıl iletim uygulamalarında sıklıkla kullanılır ancak kuvvetli van der Waals kuvvetlerinin etkileşimi matris içerisinde homojen dağılım sağlanmasında güçlük yaşanmaktadır [29].

İki boyutlu nanotanecikların kalınlıkları nano seviyedeyken, diğer iki boyutu ise oldukça geniş ölçülere ulaşabilmektedir. Bu yapıların klasik örneklerinden olan grafen ve altıgen bor nitrür malzemeleri ile ısıl ve elektriksel iletkenlik yönetimlerinin yanı sıra sahip oldukları geniş yüzey alanları ile sıvı ve gazların yapı içerisindeki geçirgenliklerini önemli ölçüde kontrol edebilirler [30] (Şekil 2.2). Yüksek yükleme oranlarında, 2B nanotanecikler polimer matrisinde oluşturdukları iç ağ yapısıyla perkolasyon etkisi sayesinde yapının mekanik özelliklerinde önemli artışlar sağlamaktadırlar [31]. Bu iyileşmenin sağlanabilmesi için mekanik yük altında gerilim dağılımının homojen bir şekilde gerçekleştirilmesi gerekir. Bu durum fonksiyonelleştirme işlemleriyle matris nanodolgu arayüzey etkileşimlerinin arttırılmasıyla sağlanır [32].



Şekil 2.2 2B Nanotaneciklerin gaz geçirgenliği azaltma mekanizması [33]

Üç boyutlu nanotanecikların tüm boyutlardaki ölçüleri 100nm'den büyük olmasına rağmen bu sınıflandırmaya dahil edilir çünkü 0B, 1B ve 2B nanotaneciklerin kullanımıyla her yöne doğru büyüyen hiyerarşik bir mimariye sahiptir. Polimer matris yapısı içerisine bu dolgular katıldığında mekanik, ısıl ve bariyer özelliklerin geliştirilmesini sağlamaktadır. Bu nanotanecikler'a en iyi örnekler, metal organik çerçeveler (MOÇ), aerojeller ve karbon bazlı yapılardır. MOÇ'lar metal iyonlarının organik ligandlara koordine edildiği boşluklu kristalin malzemelerdir. Yüksek yüzey alanları ve ayarlanabilir boşluk oranları dolayısıyla gaz depolama ve geçirgenlik uygulamalarında kullanılmaktadır [34]. Aerojeller ise jellerden oluşan ve sıvı yapının yerini havaya bıraktığı oldukça hafif malzemelerdir. Polimer

matrisine katılmalarıyla birlikte içerdikleri hava miktarı sayesinde yapının ısıl izolasyonunu ve hafiflemesini başarıyla sağlamaktadır [35].

2.1.2 Matris Türüne Göre Sınıflandırma

Nanokompozit malzemelerin üretiminde bir önemli husus ise matris malzemesinin seçimidir. Bu seçim en temelde hedeflenen mekanik, ısıl, elektriksel veya diğer fonksiyonel özelliklerin başarılmasında kritik öneme sahiptir. Genelde, polimerler her biri farklı işleme parametreleri ve son kullanım davranışlarına sahip termoplastikler ve termosetler olarak kategorilere ayrılır. Uygun matrisin seçimi gerekli performans özelliklerinin yanı sıra maliyet, üretim ölçeklendirilebilirliği ve belirli nanotaneciklerle spesifik uyumlarına da doğrudan bağlıdır [36].

Termoplastikler kritik bir tekrar sayısına kadar önemli bir kimyasal bozunum göstermeden eritilip yeniden şekillendirilebilir. Geniş bir erime sıcaklığı ve mekanik özellikler aralığına sahip olmaları, seri üretim ürünlerinde popüler kılmaktadır. Bu ürünlerin arasında başlıca polipropilen (PP), poliamid (PA), polikarbonat (PC) ve polietilenterafitalat (PET) gibi polimerler gelmektedir [37]. Genellikle düşük erime sıcaklıklarına sahip olmaları, maliyetlerinin düşük olmasına sebep olmaktadır. Enjeksiyon kalıplama, ekstrüzyon ve şişirme kalıplama gibi birçok üretim yöntemiyle işlenebilmeleri yüksek hacimli olarak üretilmelerine imkân sağlamaktadır. Öte yandan seri üretim ihtiyacı beyaz eşya ve otomotiv kadar yüksek olmayan ancak üretilen parçalarda yüksek kimyasal ve mekanik dayanımların beklendiği havacılık ve uzay gibi uygulama alanlarında genellikle termoset malzemelere göre daha az tercih edilmektedir [38].

Termoset polimerler kürlenme sırasında geri döndürülemez çapraz bağlanma reaksiyonları ile oldukça stabil üç boyutlu bir ağsı yapı oluşturur. Reçineye göre kürlenme prosesi ısı, kimyasal başlatıcılar veya morötesi ışık ile başlayabilir. Polyester, vinilester, epoksi ve fenolik reçineler endüstride hacimce en çok tüketilen termosetler arasında sayılabilir. Çapraz bağlanmış yapıları sayesinde termoplastiklere kıyasla daha yüksek elastisite modülü ve mukavemet sunmaktadır. Aynı zamanda genellikle daha düşük oranda büzülme yaşamaları da çapraz bağlı yapılarının sağladığı ısıl kararlılık sayesindedir. Çevresel koşullara ve kimyasallara karşı olan dayanımları dolayısıyla enerji, denizcilik, havacılık ve yapısal uygulamalarda sıklıkla tercih edilmektedir [39].

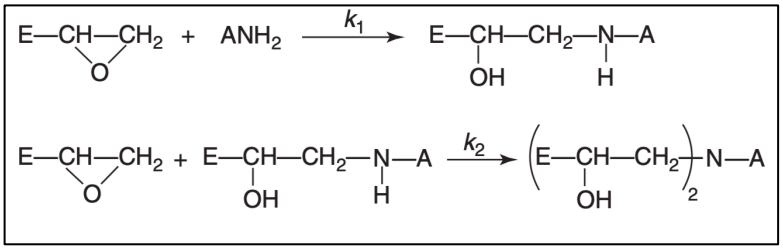
Termoset polimerler arasında, üstün mekanik özellikleri, kimyasal dayanımı ve ısıl kararlılığı ile öne çıkan epoksi reçineler, özellikle havacılık, uzay ve elektronik gibi ileri teknoloji gerektiren uygulamalarda yüksek performanslı nanokompozitlerin üretimi için güçlü bir aday olarak değerlendirilmektedir. Tablo 2.1'de epoksi reçinenin çeşitli polimerler ile mekanik özellikleri kıyaslanmıştır.

Tablo 2.1 Epoksi reçinenin çeşitli polimerler ile mekanik özelliklerinin kıyaslanması [40]

Polimer Matrisi	Yoğunluk (g/cm3)	Elastik Modülü (GPa)	Çekme Mukavemeti (MPa)	Kopma Uzaması (%)
LDPE	0.91-0.93	0.1-0.3	5-25	400
HDPE	0.94-0.96	0.5-1.3	15-40	150
PP	0.9-0.92	0.9-2	25-40	80
Fenolik Reçine	1.21	6.5	45	1.2
Epoksi Reçine	1.1-1.4	3-6	35-100	1-6

2.1.2.1 Epoksi Reçine

Epoksi reçine, moleküler yapısı içerisinde en az iki adet oksiran halkası içeren bir termoset polimer olarak tanımlanır. Bu oksiran halkaları, sertleştirici olarak da adlandırılan çapraz bağlayıcı amin, asit anhidrit, fenolik vb. reaktif gruplarla reaksiyona girerek çapraz bağlanmış bir yapı oluşturur (Şekil 2.3). Ortaya çıkan ağsı yapı sayesinde epoksi reçine yüksek mekanik mukavemet ve boyutsal kararlılık gösterir.



Şekil 2.3 Epoksi gruplarının aminler ile reaksiyonu [39]

Yüksek mekanik dayanım ve rijitlik, epoksi reçinelerin kürlenme sürecinde meydana gelen üç boyutlu çapraz bağlar neticesinde ortaya çıkar. Böyle bir yapı, özellikle havacılık, otomotiv, uzay ve elektronik sektörlerinde tercih edilen sağlam ve hafif malzemelerin elde edilmesini kolaylaştırır. Kimyasallara ve korozyona karşı koruma kapasitesi ise çapraz bağlı ağ yoğunluğundan kaynaklanır; bu yoğun

ağ yapısı asit, baz ve çeşitli çözücülere karşı önemli oranda koruma sağlar. Epoksi reçinelerin kürlenme sırasında düşük büzülme göstermesi, üretim sırasında boyutsal toleransların korunmasına imkân tanır. Gelişmiş ısıl kararlılık ise camsı geçiş sıcaklığının (T_g) yüksek seviyelerde seyretmesinden ötürü, epoksi kompozitlerin yüksek sıcaklık ortamlarında dahi yapısal bütünlüğünü korumasını sağlar [41]. Bu temel özelliklere ek olarak, tercih edilen kimyasal fonksiyonlandırma, epoksi reçinelerin nihai malzeme performansını önemli ölçüde etkilediği bilinmektedir. Örneğin asit anhidrit veya fenolik bazlı sistemler ile amin gruplu sertleştiricilerin reaksiyon mekanizmaları farklılık gösterir ve bu durum epoksinin elastik modülü, darbe dayanımı ya da kimyasal direnç gibi parametrelerinde çeşitlilik yaratır. Örneğin amin grupları reçine içindeki oksiran halkalarıyla reaksiyona girerek bağlar oluşturur. Bu reaksiyon, başlangıç aşamasından son aşamaya dek farklı birkaç kademeler içerir. Başlangıçta oksiran halkaları açılır ve kısa zincirli yapılar oluşur. Gelişme aşamasında ise çapraz bağlanma yoğunluğu giderek artar ve jelleşme noktasına varılır, malzeme yarı katılaşır ve geri dönülemez bir şekil alma sürecine girer. Son aşamada ise uygun sıcaklık ve süre ile tam kürlenme işlemi gerçekleştirilir. Bazı özel durumlarda ileri-kür işlemiyle mekanik veya ısıl özelliklerde ek iyileştirmeler sağlanabilir [42].

Kürlenme sürecinde sıcaklık, sertleştirici tipi, karıştırma yöntemi, katkı maddeleri gibi parametrelerin her biri nihai malzeme özelliklerine doğrudan etki eder. Yüksek sıcaklıkta hızlı kürlenme, üretim sürecini kısaltsa da iç gerilmelerin yükselmesine neden olabilir. Düşük sıcaklıkta yavaş kürlenme ise daha düşük iç gerilme sağlar fakat üretim süresini uzatabilir. Benzer şekilde, reaktif ya da reaktif olmayan katkıların eklenmesiyle viskozite ve akış davranışı üzerinde oynama yapmak mümkündür [43]. Ek olarak, UV stabilizatörleri, plastikleştiriciler ya da diğer katkı maddeleri, sertleşme sırasında ağ yapısının oluşumunu değiştirerek darbe dayanımı veya tokluk gibi özelliklerde dönüşüme yol açabilir. Bu nedenle epoksi reçine formülasyonu, uygulama alanının gereksinimleri doğrultusunda optimize edilmelidir.

Nanokompozitler, en az bir bileşeninin boyutu nanoölçekte (yaklaşık 1–100 nm aralığında) olan çok fazlı sistemleri ifade eder. Bu boyut aralığında gerçekleşen değişimler, malzemenin yüzey alanı-hacim oranını çarpıcı ölçüde artırır ve polimer matris ile dolgu maddesi arasındaki etkileşimi güçlendirir. Böylelikle, çekme,

eğilme ve darbe dayanımı gibi mekanik özellikler daha ileri düzeye taşınabilir [44]. Bunun yanı sıra ısıl iletkenlikteki artış, özellikle elektronik ve havacılık uygulamalarda ısıl yönetimin daha etkin biçimde yapılmasını sağlar. Epoksinin elektriksel yalıtkan karakteri, grafen veya karbon nanotüp gibi iletken nanotaneciklerle dönüştürülebilir; bu da sensör veya antistatik uygulamalarda farklı işlevler kazandırır. Isıl iletkenlik artışının ihtiyaç duyulmasına karşın yapının elektriksel yalıtkanlığının korunması istendiğinde de hBN nanodolgu malzemesi kullanımı öne çıkmaktadır [45].

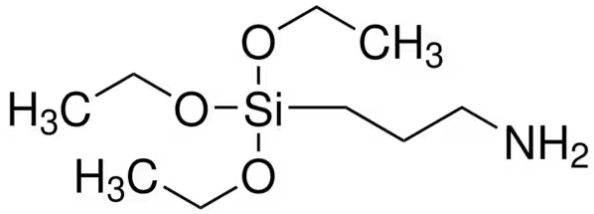
Nanotanecikleın epoksi matris içerisinde homojen şekilde dağılması, nanokompozitin performansını belirleyen en kritik konulardan biridir. Aglomerasyon veya yığılma problemleri istenilen seviyede özellik geliştirmenin önüne geçer. Bu nedenle yüksek kesme kuvvetli karıştırma, ultrasonik dağıtma veya ön yüzey fonksiyonlandırma (örneğin silan kaplama) gibi işlemlerle dolgu maddelerinin yüzey kimyası epoksi reçineyle uyumlu hale getirilmeye çalışılır [46]. Farklı morfolojilere sahip nanotaneciklerin (nanotüp, nanolevha, nanoçubuk vb.) arayüz davranışları, mekanik ve ısıl özelliklerin iyileşme derecesi üzerinde belirleyici olduğu için, her bir dolgu türünün yapısal avantajları ve zorlukları sistematik biçimde ele alınmalıdır.

Nanokompozitlerin nihai özelliklerini belirleyen en önemli faktörlerden biri, epoksi matris ile nanotanecik arasında oluşan arayüz etkileşimleridir. Nanotanecik yüzeyinin kimyasal veya fiziksel özellikleri, matris ile kurulan bağın kuvveti ve kararlılığıyla doğrudan ilgilidir. Yüzey enerjisi ve ıslanabilirlik temel parametreler olarak öne çıkar; epoksi reçinenin akışkan haldeyken nanodolgu yüzeyini ıslatabilmesi, arayüzde yeterli tutunmanın sağlanması açısından zorunludur [47].

Kimyasal fonksiyon gruplarının varlığı da bir başka önemli faktördür. Nanotanecikler amin ($-NH_2$), hidroksil (-OH), karboksil (-COOH) veya silanol (-SiOH) gibi fonksiyonel gruplar içeriyorsa, epoksi reçinedeki reaktif noktalarla daha güçlü (hidrojen veya kovalent) bağlar oluşturabilir. Özellikle yüzeyi inert karakterde olan altıgen bor nitrür (hBN) gibi dolgu maddelerinde, silan veya polimer kaplama yöntemleriyle yüzey fonksiyonelleştirme yapılması, epoksiyle kimyasal etkileşim imkanını artırarak fonksiyonel özelliklerde arzu edilen iyileşmeyi mümkün kılar [48].

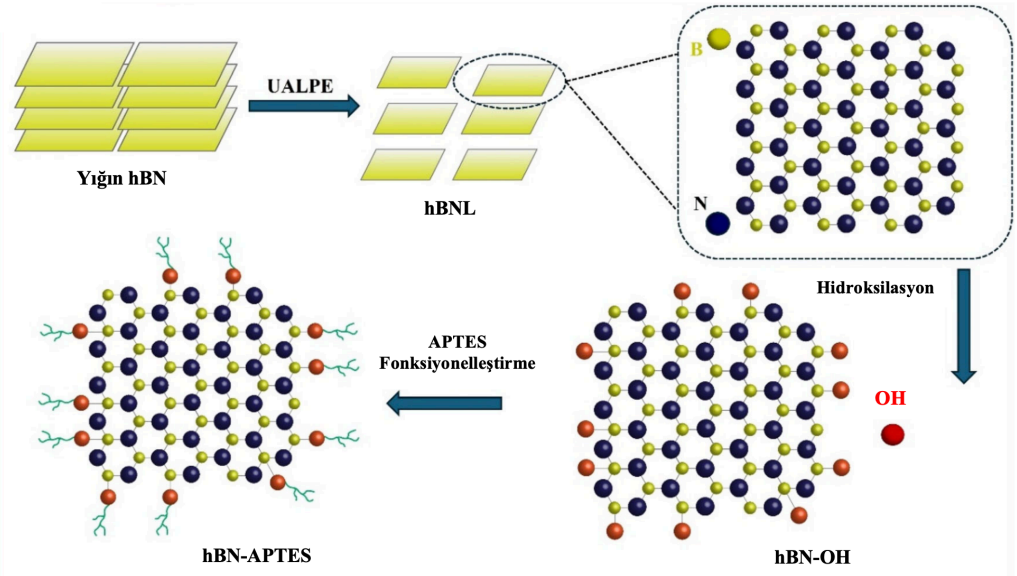
Yüzey fonksiyonlandırmanın etkinliğini belirlemek amacıyla Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR), X-Işını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS), Geçirimli Elektron Mikroskobu (TEM) ya da Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) gibi karakterizasyon yöntemlerine başvurulur. Bu yöntemler, fonksiyonlandırma sonrasında dolgu yüzeyinde yeni fonksiyonel grupların varlığını ortaya koyarak epoksiyle kurulan bağların niteliği hakkında bilgi verir [49].

Bor nitrür nano levhalarını (BNNS) (3-aminopropil)trietoksisilan (APTES) ile fonksiyonelleştirerek epoksi matris içinde daha iyi dağılım ve ara yüzey uyumluluğunun sağladığı gösterilmiştir (Şekil 2.4) [50].



Şekil 2.4 APTES kimyasal yapısı

Proses, ultrasonik eksfoliasyon ile BNNS yüzeyinde hidroksil (-OH) grupları oluşturulması, ardından hidrolize edilmiş APTES çözeltisi ile 80°C'de 6 saat reaksiyon gerçekleştirilerek Si–O–B bağlarının oluşturulması aşamalarını içermektedir (Şekil 2.5). Son olarak, BNNS'ler yıkama ve 100°C'de kurutma işlemlerinden geçirilmiştir.



Şekil 2.5 APTES fonksiyonelleştirme süreci [50]

Fonksiyonelleştirme işlemi, FTIR analizinde 1110 cm^{-1}'de Si–O bağı, XPS analizinde 102.6 eV'de Si–O–B sinyali ve TGA analizinde de %1.64 APTES içeriği tespit edilerek doğrulanmıştır. APTES, BNNS'lerin epoksi içinde homojen dağılmasını sağlamış, ara yüzey etkileşimini artırmış ve fonon saçılımını azaltarak ısı iletimini iyileştirdiği gözlemlenmiştir. Bunun sonucunda kompozitin ısıl iletkenliği 5.86 W/mK değerine ulaşmış ve çekme mukavemeti 51.3 MPa değerine yükselmiştir. Ayrıca, camsı geçiş sıcaklığı 100.9°C'den 114.3°C'ye çıkmıştır, bu da ısıl kararlılığının arttığını göstermektedir. Bu sonuçlar BBNS malzemesinin APTES ile modifiye edildiğinde epoksi reçine ile daha iyi oranda dağıldığını ve dolayısıyla etkileşim miktarını arttırdığını göstermiştir.

Altıgen bor nitrür (hBN) içeren epoksi nanokompozitlerin dağılımını iyileştirmek ve mekanik özelliklerini tahmin etmek için makine öğrenmesi ve derin öğrenme modellerini kullanan bir çalışma gerçekleştirilmiştir. hBN'nin dağılımını optimize etmek amacıyla izopropanol ve dimetil keton çözücüleri kullanılmış ve nanokompozitler döküm tekniğiyle üretilmiştir. Ağırlıkça %0.5 hBN içeren izopropanol ile dağıtılan numunelerde, çekme dayanımı %61, eğilme dayanımı %38.41 ve eğilme modülü %35.80 oranında artmıştır. Üç farklı üretim yöntemi karşılaştırılmış olup, izopropanol ile dağılımın en homojen takviye dağılımını sağladığı belirlenmiştir. FTIR analizleri, izopropanolün numunelerden ısıl işlemle tamamen uzaklaştırıldığını doğrulamıştır. FESEM görüntüleri, hBN'nin izopropanol içinde daha iyi dağıldığını ve aglomerasyonun azaldığını göstermiştir. TGA sonuçları, izopropanol ile dağıtılmış hBN/epoksi nanokompozitlerin ısıl kararlılığının 8°C daha yüksek olduğunu ortaya koymuştur [51].

2.1.3 Takviye Türüne Göre Sınıflandırma

Polimer nanokompozitlerin hedeflenen nihai özelliklerine ulaşılabilmesi için başlıca belirlenmesi gereken hususlardan biri de takviye elemanıdır. Nanotanecikler yüksek yüzey alanları, özgün fiziksel ve kimyasal özellikleri sayesinde polimer matrislerde performans artışı sağlamaktadır. Son yıllarda birçok teknoloji alanında özellikle hafiflik, yüksek mukavemet, ısıl ve elektriksel iletkenlik gibi çok yönlü fonksiyonel malzeme kullanım ihtiyaçları doğmuştur. Ancak istenen özelliklere ulaşılabilmesi için doğru nanotanecik seçimi ve seçilen nanotaneciğin matrise en uygun şekilde yüklenmesi kritik önem taşımaktadır. Bu

takviye edici nanotanecikler, organik, inorganik ve karbon bazlı olmak üzere üç ana kategori altında sınıflandırılmaktadır [52].

Organik nanotanecikler, polimerler, lipidler, peptitler ve nükleik asitler gibi organik bileşenlerden oluşur. Bu malzemeler, kimyasal buhar biriktirme (CVD), veya litografi gibi tekniklerle sentezlenerek, kontrollü morfoloji ve boyutlara sahip nanoyapılar hâline getirilebilmektedir. Lipozomlar, miseller ve siklodekstrinler yaygın örnekler arasında yer alırken, dendrimerler hedefe yönelik ilaç taşıma sistemlerinde özel kullanımlara sahiptir. Nanoselüloz ise ahşap, bitki ve bakterilerden elde edilen doğal bir nanomaddedir; mikrofibriller selüloz (MFC), nanokristalin selüloz (NCC) ve bakteriyel selüloz (BC) olarak alt gruplara ayrılmaktadır. MFC ve NCC, kompozitlerde takviye işlevi görürken; BC özellikle biyomedikal ve filtrasyon alanlarında kullanılmaktadır [52].

İnorganik nanotanecikler, metal bazlı (Ag, Cu, Au, Zn, Pb vb.) ve metal oksit bazlı (SiO_2, TiO_2, Fe_2O_3, $MgAl_2O_4$, ZnO vb.) olarak alt sınıflara ayrılmaktadır. Özellikle nanokil mineralleri (montmorillonit, kaolinit, halloysit) yüksek yüzey alanı, tabakalı yapıları ve çevresel uyumları sayesinde PNK'lerde sıklıkla kullanılmaktadır. Bu tür inorganik dolgu maddeleri, yüksek ısıl kararlılık, iyi optik özellikler ve geliştirilmiş bariyer performansı kazandırmak amacıyla polimer matrisine entegre edilir [53]. Nanoparçacıkların geometrik boyutları ile nihai kompozit özellikleri arasında güçlü bir ilişki bulunmaktadır. Örneğin, iki boyutlu (2D) nanokiller, polimer matris içerisinde gaz geçişine karşı dolambaçlı yollar oluşturarak bariyer özelliklerini artırırken; tek boyutlu (1D) karbon nanotüpler elektriksel iletkenliği iyileştirici etkiler göstermektedir [54].

Karbon bazlı nanotanecikler, üstün elektriksel iletkenlik, mekanik dayanım, biyouyumluluk ve kimyasal kararlılık gibi özellikleriyle dikkat çeker. Grafen, sp^2 hibritlenmiş karbon atomlarından oluşan tek katmanlı bir malzeme olup, yüksek yüzey alanı (2630 m^2/g), elastik modülü (1 TPa) ve ısıl iletkenliği (5000 W/mK) ile tanınır. Grafen oksit (GO), yüzeyinde hidroksil, karboksil ve epoksi gibi oksijenli fonksiyonel gruplar taşıyarak su gibi polar çözücülerde çözünürlüğünü ve işlevselleştirilebilirliğini artırır [55]. Karbon nanotüpler (CNT'ler), yuvarlanmış grafen levhalarından oluşan silindirik yapılardır ve yüksek dayanım, elastiklik ve iletkenlik sunarlar. CNT'ler, tek duvarlı (SWCNT) ve çok duvarlı (MWCNT) olarak sınıflandırılır [56]. Fullerenler (örn. C_{60}), genellikle ilaç taşıma sistemleri,

fotoısıl tedaviler ve süperiletkenlik gibi niş uygulama alanlarında değerlendirilir [57].

Nanoparçacık türüne göre PNK'lerin performans özelliklerinde önemli iyileşmeler sağlanmaktadır. Mekanik özelliklerdeki iyileşmeler, özellikle karbon nanotüplerin eklenmesiyle daha belirgin hâle gelmektedir. PEEK/cam elyaf laminatlara ağırlıkça %0.5 oranında CNT eklenmesiyle ILSS. eğilme mukavemeti ve modülünde sırasıyla %35.8. %25.4 ve %23.7 oranlarında artış sağlandığı bildirilmiştir [54]. Nanokiller ise düşük dolgu oranlarında bile matrisin sertliğini ve çekme modülünü artırabilmektedir [7, 12]. Bu katkıların etkisi, yüzey fonksiyonelleştirme derecesi ve dağılım homojenliği ile doğrudan ilişkilidir.

Termal özellikler bakımından, CNT'ler ve grafen katkıları ile ısıl kararlılık ve iletkenlik değerlerinde kayda değer artışlar elde edilmektedir. Örneğin, polisülfon matrisine %10 CNT takviyesi, ısıl iletkenliği %163 artırmıştır [54]. Benzer şekilde, PLA/MgO nanokompozitleri, saf PLA'ya göre daha yüksek bozunma sıcaklığı sergilemiştir [58]. Nanokillerin de ısı dayanımı ve alev geciktiricilik özelliklerini artırdığı gözlemlenmiştir [59].

Elektriksel özelliklerde, CNT ve grafen en etkili katkı malzemeleri olarak öne çıkmaktadır. CNT'ler ile PNK'lerin iletkenliği, sızma eşiğini geçtikten sonra yaklaşık 10 kat artabilmekte; %1.3–1.95 hacim oranında sızma eşiği gözlemlenmektedir [60]. Grafen katkısı ise ağırlıkça %0.1 gibi düşük oranlarda bile yalıtkandan iletkene geçişi sağlamaktadır [61]. Bu katkıların etkinliği, parçacıkların yönlenmesi, tabaka sayısı ve fonksiyonelleştirme düzeyine bağlıdır [62]. ZnO gibi metal oksitler ise PVDF matrisine %50 oranında eklendiğinde dielektrik geçirgenliği 4,2 kat artırmaktadır [63].

Optik özelliklerdeki iyileşmeler, özellikle TiO_2, ZnO ve SiO_2 gibi metal oksit nanotaneciklerinin katkısıyla elde edilmektedir. Bu katkılar, kırılma indisinde artış, enerji bant aralığında daralma gibi etkilerle optoelektronik uygulamalarda avantaj sağlamaktadır [63]. Altın nano ise, fotoısıl etkinliğin yanı sıra, ışığın polarizasyonuna veya dalga boyuna bağlı olarak farklı renklerde görünme özelliği olan dikroizm gibi özel optik davranışlar kazandırmaktadır [64].

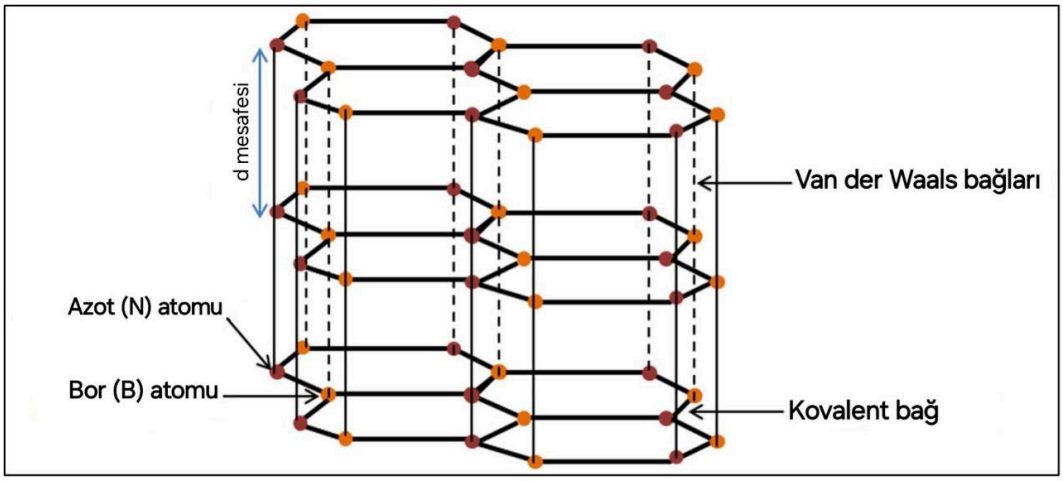
Bariyer özellikleri açısından, nanokillerin matris içerisinde dolambaçlı yollar oluşturması sayesinde gaz ve sıvı geçirgenliğinde düşüş sağlanmaktadır. Bu etki, özellikle gıda ambalajı uygulamalarında değerlidir [65]. Nanokil tabakalarının morfolojisi ve dağılım şekli (eksfoliasyon, interkalasyon) bu performansı belirleyici faktörlerdendir [66].

Son olarak, polimer nanokompozitlerin özel işlevsellikler kazanması da mümkündür. Fe_3O_4 gibi manyetik nanotanecikler sayesinde mikrodalga soğurma ve manyetik yanıt gibi özellikler kazandırılabilir [58]. Ayrıca, Ag, Cu, Zn ve Au gibi metal nanoparçacıkları antibakteriyel etki sunmakta; hücre zarlarını bozarak veya reaktif oksijen türleri üreterek bakteriyel faaliyetleri baskılamaktadır. Gümüş ve bakır iyonları hücre DNA'sına zarar verirken; ZnNP'ler fotokatalitik aktivite ve biyouyumluluk göstermektedir [67]. Altın nanoparçacıkları ise NIR ışık altında fotoısıl ajan olarak işlev görmekte ve özellikle biyomedikal alanlarda öne çıkmaktadır [68].

2.1.3.1 Altıgen Bor Nitrür (hBN)

Altıgen bor nitrür (hBN), bor ve azot atomlarının altıgen bir düzende bulunduğu, yapısının grafene oldukça benzemesi dolayısıyla endüstride "beyaz grafen" olarak adlandırılan ancak kimyasal ve fiziksel davranışları açısından farklı özelliklere sahip iki boyutlu bir nanomalzemedir. hBN'nin öne çıkan yapısal özellikleri, atomları arasındaki kovalent bağlar ve tabakaları arasında yer alan zayıf Van der Waals bağlarının dengesi sayesinde oluşur. Bu durum malzemenin hem kimyasal kararlılığını hem de fiziksel dayanıklılığını destekler [69].

Katmanlı yapıdaki zayıf Van der Waals bağları, hBN'nin düşük sürtünme katsayısına sahip olmasını sağlar ki bu özelliği tribolojik uygulamalarda tercih edilmesine yol açar [70]. hBN birçok sektörde kullanılan yağlayıcılar, sıvı katı kayganlaştırıcılar ve çok düşük aşınma oranları gerektiren yüzeyler için önemli bir nanomalzeme olarak kullanılır [71]. Dahası, hBN'nin ısıl ve elektriksel kararlılığı, zorlu şartlarda çalışan sistemlerde dayanıklılığı destekler [72] (Şekil 2.5).



Şekil 2.6 Altıgen bor nitrür (hBN) yapısı [71]

hBN, özellikle uzay ve havacılık teknolojilerinde kullanımıyla da dikkat çeker. hBN'nin inert yapısı ve çok yüksek erime sıcaklığı, çevresel etkenlerden etkilenmeden uzun vadeli kullanımı mümkün kılar [73]. Zorlayıcı çevresel koşullara dayanımı ve kimyasal kararlılığı sayesinde, bu malzeme uydu sistemlerinden roket motorlarına oldukça geniş bir uygulama yelpazesine hizmet eder.

Altıgen bor nitrür (hBN), tek katmanlı ve çok katmanlı yapılarıyla çeşitli uygulamalarda farklı avantajlar sunar. Tek katmanlı hBN, bir atom kalınlığında bor ve azot atomlarının düzenli bir altıgen kafes oluşturduğu bir yapıya sahiptir. Bu yapı, sunduğu yüksek yüzey alanı ve kimyasal aktiflik ile nanoelektronik cihazlarda, ince film kaplamalarda ve sensör uygulamalarında kullanım için ideal bir nanomalzeme haline gelir. Elektriksel yalıtım kapasitesi ve ısıl iletkenlik gibi özellikler bu ince yapıda çok daha belirgindir [74] (Tablo 2.2).

Çok katmanlı hBN ise, birden fazla atomik tabakanın Van der Waals kuvvetleriyle bir arada bulunduğu daha kalın bir yapıya sahiptir. Bu türü genellikle mekanik dayanıklılık ve uzun ömür gerektiren uygulamalarda tercih edilir. Çok katmanlı yapı, ısıl ve elektriksel özelliklerini koruyarak tribolojik kaplamalar, ısıl yönetim sistemleri gibi uygulama alanlarında da önemli bir rol oynar [75].

Her iki yapı da kimyasal kararlılık, çevresel dayanıklılık ve modifikasyona uygunluk gibi temel avantajları paylaşır. Tek katmanlı hBN, yüzey aktifliği ve esnekliği ile yenilikçi uygulamalarda tercih edilirken, çok katmanlı hBN, yapısal dayanım ve ısıl koruma gereksinimlerini karşılar. Bu iki farklı form, hBN'yi hem

mikro boyutta hem de makro boyutta kritik teknolojilerde çok yönlü hale getirir [11].

Tablo 2.2 Altıgen bor nitrür özellikleri [77]

hBN Çeşidi	Elektriksel Direnç (Ωcm)	Dielektrik Sabiti	Isıl İletkenlik (W/m.K)	Elastisite Modülü (GPa)	Çekme Mukavemeti (MPa)
Tek Katman	10^{12}–10^{14} II 10^{12}–10^{14} ⊥	4.97 II 2.89 ⊥	550 ± 75 II 3.5 ± 0.8 ⊥	810	130
Yığın	10^{12}–10^{14}	4.98 II 2.89 ⊥	3	46.9	143

hBN, sp^2 hibritleşmesiyle oluşan altıgen kafes yapısıyla dikkat çeker. Bu kafes, bor ve azot atomları arasındaki kovalent bağların sağladığı dayanıklılık ve homojenlikle öne çıkar. Bor ve azotun elektron konfigürasyonları, malzemenin kimyasal kararlılığını ve düşük reaktivitesini destekler. Bu özellikler, hBN'nin agresif kimyasal ortamlar ve yüksek sıcaklıklarda bile yapısal bütünlüğünü korumasını sağlar [76].

Kristal yapıdaki bu düzenlilik, hBN'nin havacılık ve uzay teknolojilerinde optoelektronik ve ince film kaplama uygulamalarında önemli bir rol oynamasına olanak tanır. Örneğin, uydu sistemlerinde kullanılan ısıl koruyucu kaplamalarda hBN'nin düşük ısıl genleşme katsayısı, ani sıcaklık değişimlerine karşı yapısal bütünlüğü korur. Ayrıca, yüksek yüzey enerjisi ve mekanik dayanım özellikleri sayesinde, roket motoru nozüllerinde ve uzay araçlarının dış koruyucu kaplamalarında hBN, malzeme ömrünü artırarak güvenilirlik sağlar. Bu özellikler, hBN'yi ileri düzey malzeme tasarımları için vazgeçilmez bir bileşen haline getirir.

hBN, 200-400 W/mK aralığında değişen olağanüstü ısıl iletkenlik özellikleri ile bilinir [77]. Bu yüksek iletkenlik, tabaka yapısındaki kovalent bağlardan ve kafes düzeninden kaynaklanır. İki boyutlu yapısı sayesinde hBN, ısı yayılımını optimize ederek elektronik cihazlarda oluşan aşırı ısının etkili bir şekilde dağılmasını sağlar.

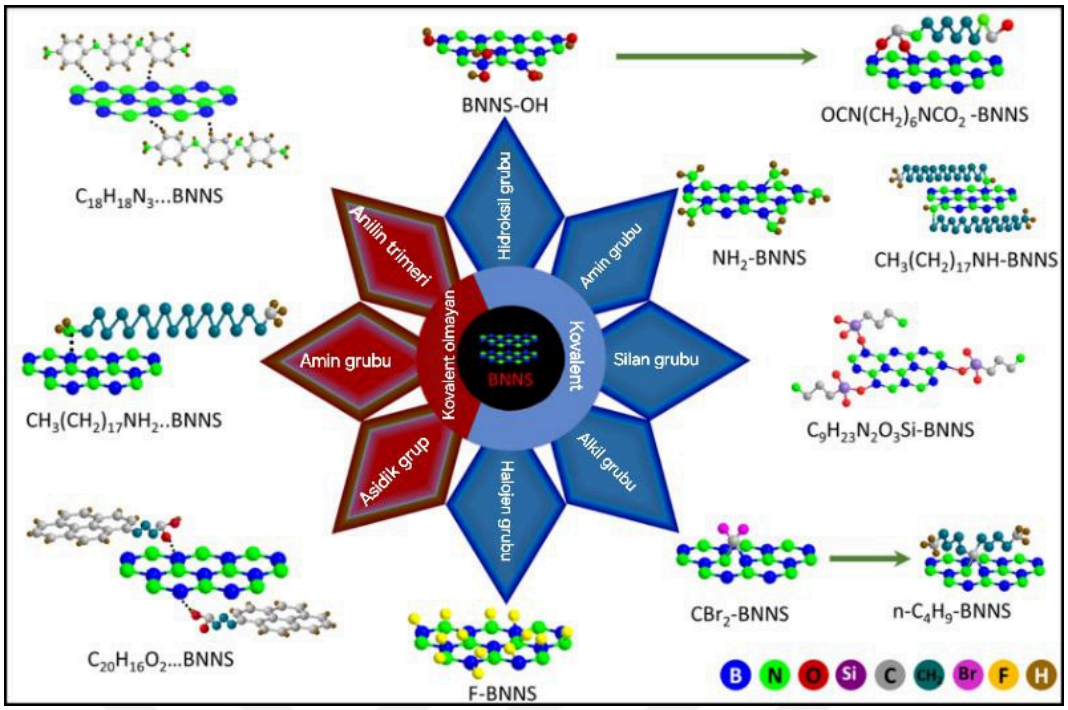
Yüksek ısıl iletkenliğinin yanı sıra düşük ısıl genleşme katsayısı, hBN'yi ısı yayıcı ve koruyucu katman olarak mikroelektronik uygulamalarda ideal bir malzeme yapar [78]. Polimer matrisli kompozitlerde kullanıldığında, ısıl iletkenliğini belirgin şekilde artırırken hafif yapıyı korur.

Yaklaşık 5.9 eV bant aralığı ile hBN, yüksek elektriksel yalıtım kapasitesine sahip bir malzeme olarak dikkat çeker [79]. Bu özelliği, kısa devre risklerini azaltarak telekomünikasyon, mikroelektronik ve enerji sistemleri gibi alanlarda genç nesil cihazlar için benzersiz bir seçenek sunar. Havacılık ve uzay teknolojilerinde, hBN tabanlı yalıtkan kaplamalar, yüksek gerilimli elektrik sistemlerinin güvenliğini artırarak kısa devre riskini minimize eder.

hBN'nin özgün elektriksel yalıtkanlığı, yüksek frekans uygulamalarında parazit engelleme kapasitesini artırır. Örneğin, uydu iletişim sistemlerinde, radyo frekansı (RF) cihazların sinyal bütünlüğünü korumak için hBN kaplamalar kullanılabilir. Ayrıca, uzay araçlarındaki elektronik bileşenlerin radyasyona karşı korunmasında da hBN'nin elektriksel yalıtkanlık özelliklerinden yararlanılmaktadır. Bu, ileri düzey elektronik sistemlerdeki kullanım potansiyelini önemli ölçüde genişletir [80].

hBN, inert yapısı sayesinde çok geniş bir kimyasal dayanım aralığı sunar. Asitlere, bazlara ve oksitleyici ortamlara karşı yüksek direnç göstermesi, mikroyapısındaki kovalent bağlar ve Van der Waals kuvvetlerinin etkili bir kombinasyonu ile açıklanabilir. Bor ve azot atomlarının altıgen kafes yapısı, kimyasal sızdırmazlık ve yüksek kararlılık sağlarken, tabakalar arasında bulunan zayıf bağlar, malzemenin yüzey enerji düşüklüğüne katkıda bulunur [76]. Bu mekanizmalar, uzay ve havacılık uygulamalarında, zorlu kimyasal ve fiziksel ortamlar altında malzemenin uzun vadeli performansını destekler.

hBN'nin yüzey kimyası kovalent ve kovalent olmayan fonksiyonlandırmalara açık bir yapıya sahiptir, bu durum malzemenin tabaka yapısındaki Van der Waals bağlarının zayıflığı ve atomlar aralığındaki kimyasal aktiflik ile ilişkilidir (Şekil 2.7). Bu zayıf bağlar ve kimyasal aktiflik, fonksiyonel grupların hBN yüzeyine kolayca tutunmasına olanak tanır. Yüzey fonksiyonlandırma için hidroksil (-OH), amino ($-NH_2$) ve karboksil (-COOH) gibi fonksiyonel gruplar yaygın olarak kullanılabilir [81].



Şekil 2.7 hBN nanolevhaların kovalent olmayan ve kovalent modifiyeleri [33]

Hidroksil grupları, hidrojen bağları oluşturarak polimerlerle kimyasal uyumu artırırken, amino grupları kovalent bağlar oluşturarak kimyasal tepkimelerde reaktiviteyi yüksek tutar. Karboksil grupları ise polarite kazandırarak malzemenin hidrofilik davranış göstermesini sağlar. Bu fonksiyonlandırmalar, hBN'nin kimyasal aktifliğini artırarak polimer matrislerle daha etkili bir etkileşim kurmasını sağlar [82].

Ayrıca, yüzeye eklenen fonksiyonel gruplar, hBN'nin homojen dağılımını kolaylaştırır ve nanokompozit malzemelerde daha stabil ve dayanıklı bir yapı oluşturur. Polimer matrisle moleküler düzeyde bağlantı oluşması, malzeme özelliklerinin optimize edilmesine ve farklı endüstriyel uygulamalara entegre edilmesine olanak tanır. Özellikle elektronik, enerji depolama ve biyomedikal alanlarda, bu özelleştirilmiş yüzey yapıları kritik rol oynar [11].

Fonksiyonel grupların yüzeye eklenmesi, malzemenin hidrofilik ya da hidrofobik davranışını kontrol ederek farklı uygulamalara uyum sağlamasını sağlar. Bu fonksiyonlandırmalar, polimerlerle moleküler düzeyde bağlantı oluşturarak daha karmaşık ve dayanıklı kompozit sistemlere entegrasyonunu kolaylaştırır. Özellikle nanokompozit uygulamalarında, modifiye edilmiş hBN'nin homojen dağılımı sağlanarak malzeme performansında belirgin iyileşmeler elde edilir [50].

Altıgen bor nitrür, elektriksel yalıtım direnci ve yüksek ısıl iletkenlik özelliklerini bir araya getirerek nanokompozit takviye malzemesi olarak kritik sektörlerde önemli bir konuma sahiptir. Elektronik paketleme uygulamalarında, ısı ve elektriksel yalıtım gereksinimlerini eşzamanlı olarak karşılama kapasitesi, hBN'yi mikroelektronik endüstrisinde vazgeçilmez kılar [83].

Havacılık ve uzay teknolojilerinde, hBN tabanlı malzemeler, uydu ve roket bileşenlerinde ısıl koruma ve elektriksel yalıtım sağlayarak uzun vadeli performansı destekler. Örneğin, uydu sistemlerinde kullanılan ısıl iletken kaplamalar, ani sıcaklık değişimlerine karşı yapısal dayanıklılığı korur [84].

Ayrıca, hBN'nin biyouyumlu yapısı, medikal cihazlar ve biyosensör uygulamalarında öne çıkar. Özellikle implant teknolojilerinde, kimyasal inertliği ve elektriksel yalıtım kapasitesi sayesinde biyouyumlu kaplama malzemesi olarak kullanılabilir. Bunun yanında, 3D yazıcı teknolojileri için geliştirilen filament malzemeleri olarak, özelleştirilmiş şekilde enerji depolama cihazlarında ve optoelektronik bileşenlerde çok yönlü kullanım alanı bulur [85].

Çevresel teknolojilerde ise, hBN'nin kimyasal dayanıklılığı ve yüzey fonksiyonlandırmaya açık yapısı, yenilikçi filtreleme sistemlerinde etkin bir bileşen olmasını sağlar. Bu örnekler, hBN'nin çeşitli kritik sektörlerde artan önemini ortaya koyar [86].

Grafite benzer tabakalı yapısı, yüksek ısıl iletkenlik ve elektriksel yalıtkanlık özelliklerini beraberinde getirir. Bu özelliği nedeniyle epoksi matris içerisinde hBN kullanımı, özellikle yüksek ısıl iletkenlik ve yüksek dielektrik direncin aynı anda istendiği uygulamalarda büyük avantaj sağlar [87]. Epoksinin doğal olarak zayıf olan ısıl iletkenliği, hBN tabakalarının kompozit içinde düzgün ve etkin bir şekilde dağılmasıyla önemli ölçüde iyileştirilebilir (Tablo 2.3). Burada hBN oranı, tane boyutu ve tabakaların oryantasyonu belirleyici rol oynar. Aynı zamanda hBN, elektriksel yalıtkanlığın korunması açısından da avantajlıdır; bu durum, elektrikli ve elektronik bileşenlerin enkapsülasyon işlemlerinde epoksi-hBN kompozitlerinin tercih edilmesine yol açar [88].

Tablo 2.3 Epoksi ve hBN fiziksel özellikleri karşılaştırması [89]

Özellikler	Birim	Değerler	
Hammaddeler	-	Epoksi	hBN
Yoğunluk	g/cm^3	1,20	2,17
Isıl İletkenlik	W/m·K	0,2	X-Y Düzlemi 400, Z 3-6
Elektriksel Yalıtkanlık	Ω·cm	$\sim 10^{15}$	$\sim 10^{15}$-10^{16}
Dielektrik Sabiti	-	4	4-5
Dielektrik Kayıp Faktörü	-	<0.02	0.0003

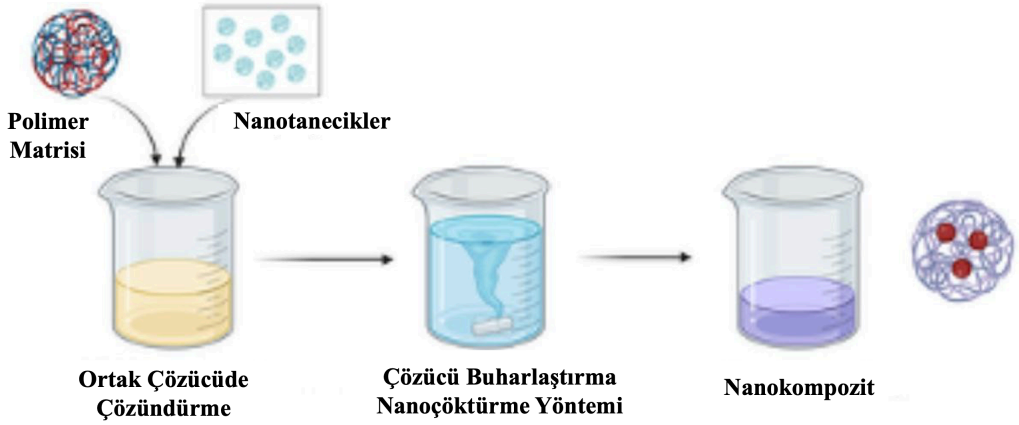
hBN yüzeyinin kimyasal olarak inert oluşu, epoksi reçinenin bu malzemeyle sıkı bir arayüz bağı kurmasını zorlaştırabilmektedir. Bu nedenle silan bazlı ajanlar veya diğer polimerik kaplama yöntemleri uygulanarak yüzey aktif hâle getirilir. Böylece hem mekanik performans yükselir hem de üretim sürecinde hBN tabakalarının homojen dağılması kolaylaşır. Proses parametrelerinin (karıştırma hızı, dağılma süresi, sıcaklık) çoklu etkisi, karmaşık etkileşim örüntüleri ortaya çıkarır. Yapay sinir ağları, bu karmaşık sürecin analiz edilmesi ve en uygun parametre setinin belirlenmesinde etkili bir araç olarak öne çıkar.

2.2 Üretim Yöntemleri

Polimer nanokompozitler, nanotaneciklerin polimer matris içerisinde homojen bir şekilde dağıtılması ve arayüz etkileşimlerinin optimize edilmesi amacıyla birden fazla üretim yöntemiyle hazırlanabilmektedir. Her bir yöntemin, uygulama koşullarına ve hedeflenen malzeme özelliklerine bağlı olarak değişen kendine özgü avantajları ve sınırlamaları bulunmaktadır. Literatürde, en yaygın olarak tercih edilen üretim yöntemleri arasında çözelti döküm yöntemi (solution casting), eriyik karıştırma yöntemi (melt mixing) ve yerinde polimerizasyon yöntemi (in situ polymerization) öne çıkmaktadır.

Çözelti döküm yöntemi, nanotaneciklerın bir çözünmüş polimer matrisi içeren organik bir çözeltide (örneğin aseton, dimetilfomaldehid, metiletilketon vb.) dağıtılmasının ardından çözücünün kademeli olarak ortamdan uzaklaştırılmasıyla ince film veya yığın halinde üretilmesi amacıyla kullanılır. Burada nanotanecikler ultransonikasyon, manyetik karıştırma veya mekanik karıştırma gibi temelde bir karıştırma işlemiyle çözücü içerisinde dağıtılır. Çözücünün uzaklaştırılmasının ardındansa uygun bir kalıba döküm işlemi gerçekleştirilmesinin ardından kürlenme aşamasıyla üretim süreci tamamlanır (Şekil 2.8). Uygun çözücü kullanımıyla hem

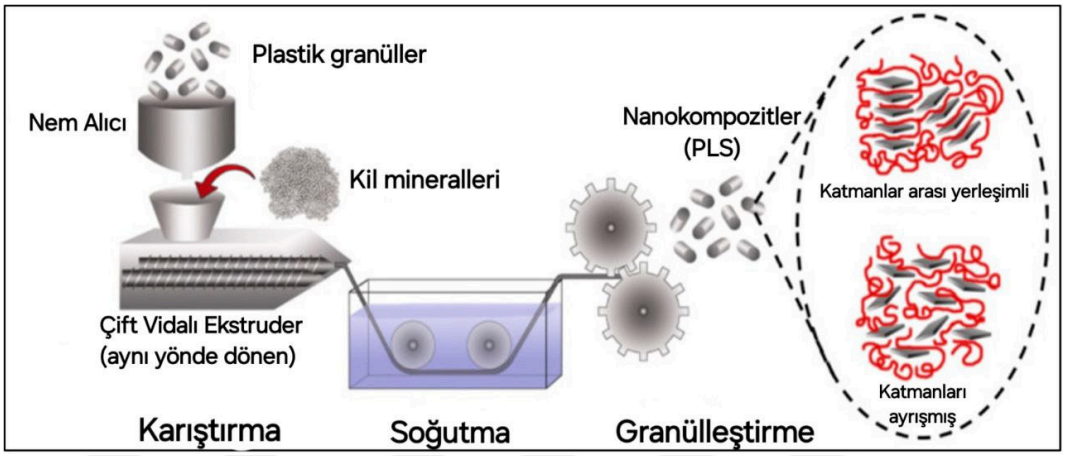
termoset hem de termoplastikler için tercih edilebilir bir yöntemdir. Genellikle oda sıcaklığında gerçekleştirilen bu işlem dolayısıyla kullanılan nanotanecik malzemelerin ısıl bozunuma uğrama riski azalır. Ayrıca sonikasyon işlemi ve çözücünün kademeli uzaklaştırılması göreceli olarak iyi bir seviyede homojen nanotanecik dağılımı sağlamaktadır ancak parametreler doğru seçilmezse çözücünün buharlaşması sırasında yeniden topaklanma durumu veya yetersiz buharlaşma dolayısıyla polimer matris yapısının bozunma ihtimali gibi dezavantajlar da mevcuttur [90].



Şekil 2.8 Çözelti döküm yöntemi ile nanokompozit üretimi [91]

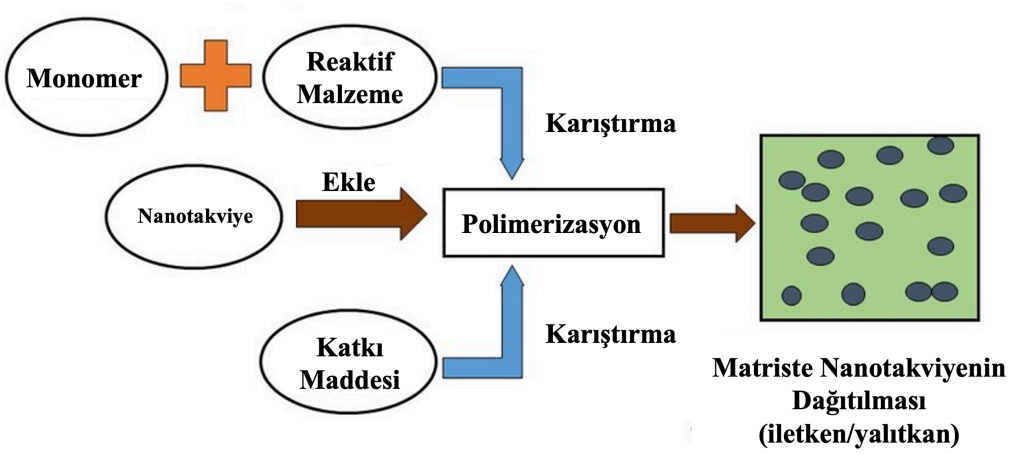
Eriyik karıştırma yöntemi, genellikle ekstrüzyon içerisinde nanotaneciklerın doğrudan eriyik polimer içerisinde yüksek kesme kuvvetleriyle karıştırılmasıdır. Bu yöntem termoplastik nanokompozitlerin üretilmesinde endüstride oldukça geniş kesimler tarafından tercih edilmektedir. Proses öncelikle polimer camsı geçiş sıcaklığı veya erime sıcaklığı üzerine ısıtılmasıyla başlar. Nanotanecikler bir besleme hunisi aracılığıyla polimer matrisine katılır. Çift vidalı ekstrüder veya benzeri yüksek kesme kuvvetleri oluşturan bir makine ile nanotanecikler homojen bir şekilde polimer içerisine dağıtılır. Ekstrüzyon sonunda nanokompozit ya peletler haline getirilir ya da doğrudan enjeksiyon kalıbına nihai ürünü şekillendirmek üzere yönlendirilir (Şekil 2.9). Bu yöntemde herhangi bir çözücü kullanılmaması çevresel etkilerin ve sağlık ile güvenlik tehlikelerinin azaltılmasını sağlar. Yüksek hacimli üretimlere imkân vermesi, geliştirilen nanokompozitlerin endüstriye hızlı bir şekilde uyarlanmasına olanak sağlar. Bu olumlu yönlerin yanı sıra proses sıcaklıklarının yüksek olması genellikle biyo-bazlı nanotanecikler gibi düşük ısıl bozunum değerlerine sahip ürünlerin kullanımını sınırlar [92]. Isıl

yönetim uygulamaları için kalınlık boyunca yüksek ısıl iletkenliğe sahip polietereterketon (PEEK) matrisli bir nanokompozitin, %60 oranında hBN ile takviyelendirilmesi ve 2.337 W/mK iletkenlik elde edilmesi bu yöntem ile mümkün olmuştur [93].



Şekil 2.9 Eriyik karıştırma yöntemi ile nanokompozit üretimi [86]

Yerinde polimerizasyon yöntemi, nanotanecikleın monomer veya oligomer öncülleri içerisinde polimerizasyon öncesinde dağıtılmasıyla ve daha sonra polimer matrisin nanotanecikler çevresinde oluşmaya başlaması dolayısıyla genellikle kuvvetli arayüzey ilişkisinin oluştuğu bir nanokompozit üretim yöntemidir. Proses, eğer ihtiyaç duyulursa nanotanecikleın yüzey fonksiyonlandırmalarıyla başlar. Modifiye edilmiş nanotanecikler, monomer içerisinde ultrasonikasyon veya mekanik bir karıştırma ile homojen dağıtılmasıyla devam eder. Isıl, UV veya kimyasal bir tetikleyicinin ortama dahil edilmesiyle monomerlerin polimerizasyonu başlar. Reaksiyona girmemiş kısımların kürlenebilmesi için son kür işlemi gerçekleştirilebilir (Şekil 2.10). Bu yöntemde, kuvvetli arayüzey etkileşimleri gözlemlenmesine karşın polimerizasyon prosesinin kontrollü gerçekleştirilmesinde polimer zincirlerinin ve nanotanecikleın yerleşimlerinin eş zamanlı olması dolayısıyla güçlük yaşanabilmektedir. Polimetilmetakrilat (PMMA) polimerinin Silisiyum Karbür (SiC) nanotanecikle birlikte yerinde polimerizasyonunda silan kaplanmış SiC nanotaneciklerin daha iyi dağıldığı SEM analizleriyle gözlemlenmiştir ancak nanotanecikleın polimerizasyon sırasında yapıda bulunması, polimerizasyonun tamamlanamadığı bölgelerin veya istenmeyen yan ürünlerin oluşmasına ve nihai ürünün özelliklerinin düşmesine sebep olduğu gözlemlenmiştir [94].



Şekil 2.10 Yerinde polimerizasyon yöntemi ile nanokompozit üretimi [95]

2.3 Uygulamaları

Polimer nanokompozitler, sahip oldukları üstün özellikler sayesinde pek çok farklı sektörde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu malzemeler, düşük yoğunluklarına rağmen yüksek mekanik dayanım, ısıl kararlılık, elektriksel iletkenlik ve gaz bariyer özellikleri gibi önemli avantajlar sunar. Ayrıca, üretim süreçlerine kolayca uyarlanabilmeleri ve fonksiyonel olarak özelleştirilebilmeleri, onları otomotivden havacılığa, biyomedikal uygulamalardan ambalaj sektörüne kadar geniş bir yelpazede tercih edilen bir malzeme haline getirmiştir. Bu çok yönlülük, polimer nanokompozitleri modern mühendislik uygulamaları için önemli ve stratejik bir çözüm aracı yapmaktadır.

2.3.1 Biyomedikal Endüstrisinde Uygulamaları

Polimer nanokompozitler, biyomedikal alanda ilaç dağıtımı, doku mühendisliği ve tıbbi cihazlar gibi çok çeşitli uygulamalarda devrim niteliğinde çözümler sunmaktadır. Bu malzemelerin cazibesi, üstün mekanik özellikleri, biyouyumlu yapıları ve biyobozunurluklarının istenen oranlarda ayarlanabilmesi gibi temel avantajlara dayanmaktadır [85]

Polimer Nanokompozitler (PNK), tedavi edici (terapötik) ajanların kontrollü ve hedeflenmiş şekilde salımını mümkün kılmaları nedeniyle ilaç taşıma sistemlerinde yaygın biçimde kullanılmaktadır. Glikolik asit, laktik asit ve ϵ-kaprolakton türevli homopolimerler ve kopolimerler gibi alifatik polyesterler, bozunabilir yapıları nedeniyle bu alandaki başlıca malzeme seçenekleri arasında yer almaktadır. Bu polimerler, genellikle hidrolitik bölünme ya da enzimatik aktiviteyle kontrollü olarak bozunur [96].

Poli(L-laktik asit) (PLLA), yaygın şekilde kullanılan bir alifatik polyesterdir ve ilaç dağıtım cihazlarında sıklıkla tercih edilmektedir. Bir diğer önemli aday olan Poli(ϵ-kaprolakton) (PCL), biyobozunur ve toksik olmayan yapısı sayesinde vücut sıcaklığında düşük moleküler türlerin difüzyonunu kolaylaştırır ve salım profili bakımından büyük avantajlar sağlar. Bu tür polimerlerin özellikleri, kopolimerizasyon veya nanotaneciklerin eklenmesiyle daha da geliştirilebilmektedir. İlaç taşıma alanında geliştirilen bir diğer sistem ise kısa peptitlerin (α-amino asitlerin birbirine bağlanmasıyla oluşan kısa polimerler) kendi kendine birleşerek oluşturduğu duyarlı hidrojellerdir. Bu sentetik peptitler, belirli koşullarda molekül içi katlanma göstererek supramoleküler ağlar oluşturmak üzere tasarlanmıştır [85]. Yüzeyi polietilen glikol (PEG) gibi hidrofilik polimerlerle fonksiyonelleştirilmiş polimerik nanotanecikler, sistemik dolaşım süresini uzatırken, tanıma ligandlarının eklenmesi sayesinde hedefe yönelik dağıtım imkânı sunmaktadır [97]. PNK'lerin bu bağlamdaki kullanımı, ilaç dağıtımında yüksek hassasiyet ve kontrolün sağlanması bakımından önemli bir ilerlemeyi temsil etmektedir. Sürekli, pulsatif veya isteğe bağlı olarak özelleştirilebilen salım profilleri ve hedefli dağıtım olanakları sayesinde sistemik yan etkiler en aza indirgenirken terapötik etki maksimum düzeye çıkarılabilmektedir.

Doğal hücre dışı matris yapısının biyomimetik biçimde taklit edilmesine olanak tanıyan PNK'ler, doku mühendisliğinde geniş bir uygulama alanı bulmaktadır. Bu malzemeler, hücre adezyonunu, çoğalmasını ve farklılaşmasını destekleyerek yeni doku oluşumunu teşvik eder. Özellikle hidroksiapatit (HAP) içeren polimer nanokompozitler, osteokondüktif özellikleri nedeniyle kemik onarımı ve implantasyonu için oldukça elverişli biyomateryaller olarak ön plana çıkmaktadır [98].

Kitosan'ın katyonik, esnek ve biyobozunur yapısından yararlanılarak geliştirilen kitosan-HAP nanokompozitleri, yüksek esneklik ve şekillendirilebilirlik özellikleri sayesinde çeşitli doku onarım gereksinimlerine yanıt verebilmektedir [99]. Jelatin-HAP nanokompozitleri ise, HAP'ın biyoaktivitesi ile jelatinin kollajen bazlı doğasını birleştirerek osteoblast hücrelerinin yapışması ve çoğalması için uygun bir ortam oluşturmaktadır. HAP'ın geleneksel agregasyon sorunları, apatit kristallerinin polimer çözeltileri içerisinde çökeltilmesi yoluyla aşılmış, bu sayede ideal gözenek yapısına sahip üç boyutlu iskeleler geliştirilmiştir [100].

Elektroeğirme (electrospinning) yöntemi, lif çapları 50 nm ile birkaç mikron arasında değişen gözenekli yapıların üretimini sağlayarak hem yumuşak hem sert doku mühendisliğinde biyomedikal uygulamalara olanak tanımaktadır [101]. Montmorillonit kil (MMT) katkılı PLLA çözeltilerinden elektroeğirme ile elde edilen yapılar, gelişmiş mekanik dayanım, biyobozunma özellikleri ve optimal gözenek boyutları ile dikkat çekmektedir [102]. Grafen bazlı nanomalzemeler de, yüzey esnekliği ve farklılaşma kabiliyetleriyle öne çıkmakta; kitosan ile kombine edilmiş grafen katkılı membranların 10 gün gibi kısa sürede cilt dokusunu tamamen iyileştirdiği gösterilmiştir [85]. Bunun yanında, çinko katkılı sentetik polimer nanokompozitler, osteojenik aktiviteyi artırarak kemik rejenerasyonunu hızlandırmaktadır [103]. Sonuç olarak, PNK'lerin doku mühendisliğindeki kullanımı, doğal dokuların yapısal ve biyokimyasal özelliklerini taklit etme ilkesi doğrultusunda, hücresel davranışları yönlendirme ve biyolojik iyileşmeyi teşvik etme kapasitesi açısından önemli fırsatlar sunmaktadır.

Polimer nanokompozitler, biyouyumluluk, mekanik dayanım ve fonksiyonel yüzey özelliklerini aynı anda sunabilme yetenekleri sayesinde çeşitli tıbbi cihazlar ve implantlarda giderek daha fazla tercih edilmektedir. Özellikle kemik içi fiksasyon (sabitleme) uygulamalarında kullanılan vidalar ve çubuklar, uzun süreli mekanik kararlılık sağlarken aynı zamanda biyolojik uyumu da muhafaza etmelidir [104]. Bu doğrultuda, implant malzemesinin elastik modülünün doğal kemiğe yakın olması, yük aktarımının etkinliği açısından kritik önemdedir.

PLLA, dikiş materyalleri, protezler, vasküler greftler ve geçici iç fiksasyon plakları gibi çeşitli uygulamalarda yaygın biçimde kullanılmakta olup, toksik olmayan bozunma ürünleri sayesinde klinik kabul görmektedir. Saf PLLA'nın mekanik performansı yetersiz olsa da, HAP, killer veya yönlendirilmiş liflerle takviye edilmesi, eğilme dayanımı ve modül değerlerini artırarak yüksek yük taşıma gerektiren implantlara uygun hale getirmektedir [105].

Dişçilik uygulamaları için termoset metakrilat bazlı kompozitler, yüksek kürlenme verimliliği ve üstün estetik özellikleri nedeniyle yaygın olarak diş dolgusu malzemesi olarak kullanılmaktadır. Bununla birlikte, elastik modül, serbest radikal polimerizasyon verimliliği, su emilimi, işlenebilirlik ve büzülme gibi alanlarda iyileştirmelere ihtiyaç duyulmaktadır. Takviye malzemelerinin seçici fonksiyonelleştirilmesi — örneğin, silika nanoparçacıklarının silanizasyonu —

sayesinde işlenebilirlik artmış, daha yüksek takviye yüklemeleri ile daha iyi elastik modül değerleri elde edilmiş ve polimerizasyon sırasında meydana gelen büzülme azaltılmıştır. [106].

2.3.2 Otomotiv Endüstrisinde Uygulamaları

Otomotiv endüstrisi, hafif araçlara yönelik artan talep ve CO_2 emisyonlarını azaltma gerekliliği doğrultusunda gelişmiş malzemelerin en büyük tüketicilerinden biri haline gelmiştir [107]. Polimer nanokompozitler (PNK'ler), olağanüstü mekanik, kimyasal, ısıl, elektriksel ve bariyer özellikleri ile birlikte yangın geciktirici özellik kazandırma potansiyelleri sayesinde mevcut otomotiv teknolojilerinde dönüşüm yaratma potansiyeline sahiptir. Ancak, bu sektörün havacılık gibi yüksek maliyetli üretim süreçlerine kıyasla çok daha düşük maliyetli, seri üretime uygun sistemler gerektirmesi; PNK'lerin üretim yöntemlerinin uygun maliyetli ve ölçeklenebilir olmasını zorunlu kılmaktadır [108].

PNK'ler, yüksek mukavemet/ağırlık oranları sayesinde otomotiv sektöründe hafifletme çözümleri sunarak yakıt verimliliğini artırmakta ve emisyonları azaltmaya katkı sağlamaktadır. Araştırmalar, araç ağırlığında %10 oranında bir azalmanın yakıt verimliliğinde %6 ila 8 oranında iyileşme sağlayabileceğini göstermektedir [109]. Karbon fiber takviyeli polimerler (CFRP'ler), örneğin gövde panelleri ve şasi gibi bileşenlerde kullanılarak mekanik bütünlükten ödün vermeksizin ciddi bir ağırlık azaltımı sağlar. PNK'lerin otomotivdeki ilk ticari uygulamalarından biri, General Motors'un 2002 yılında piyasaya sürdüğü %3 nanokil içeren poliolefin basamak yardımcısıdır; bu uygulama, dış yüzey parçalarında PNK kullanımına öncülük etmiştir [110].

Bunun yanında, sürdürülebilirlik hedefleri doğrultusunda biyokompozitlerin benimsenmesi de giderek artmaktadır. Doğal liflerle takviye edilmiş biyoplastikler (örneğin, keten/sisal matlı poliüretan kapılar veya muz lifi destekli alt zemin koruyucular) otomobil üreticileri tarafından yaygın olarak kullanılmaktadır. Ayrıca, cam yerine hafif polimerik levhaların kullanılması hem ağırlığın azaltılmasını hem de yakıt tüketiminin düşürülmesini desteklemektedir. Ancak, bu tür ileri malzemelerin yaygınlaşması, yüksek performansın düşük hacimli (%0.5–5 ağırlık) nanomalzeme yüklemesiyle elde edilebilmesi sayesinde, maliyet-etkin ve verimli üretim süreçlerinin geliştirilmesine bağlıdır [110].

PNK'ler, yalnızca ağırlık azaltımı değil, aynı zamanda otomotiv bileşenlerinin genel performansını ve dayanıklılığını artırma açısından da önemlidir. Örneğin, lastiklerde kullanılan nano-silika ve karbon nanotüpler aşınma direncini artırarak ürün ömrünü uzatmakta; bununla birlikte çekme ve kesme mukavemeti gibi özelliklerde belirgin iyileşmeler sağlamaktadır. Motor sistemlerinde nanokompozit kaplamalar (Ni-BN, Ni-Mo-MoS_2 vb.), sürtünmeyi azaltarak yakıt verimliliğini artırır. Ayrıca, çizilmeye dayanıklı ve UV korumalı yüzey kaplamaları, dış bileşenlerde estetik ve fonksiyonelliği bir arada sunar [111].

Polikarbonat gibi polimerik cam malzemeler, geleneksel camın yerini alarak darbe dayanımı ve kimyasal direnç yönünden avantajlar sağlar. Bu bileşenler, çizilmeye karşı alüminyum oksit veya nano silika içeren kaplamalarla desteklenmektedir. Gelişmiş otomotiv teknolojileri arasında yer alan elektrokromik akıllı cam sistemleri, güneş ışığını dinamik olarak kontrol ederek sürücü konforunu ve güvenliğini artırmaktadır [109].

Araç güvenliği, modern otomotiv tasarımının vazgeçilmez bir parçasıdır. PNK'ler, yüksek enerji absorpsiyon kapasiteleri ve mukavemet/ağırlık oranları sayesinde çarpışma anında yapısal bütünlüğü koruyarak yolcu güvenliğini artırmaktadır. Grafen takviyeli PNK'ler, üstün darbe ve çarpışma direnci ile ön plana çıkmaktadır [112] .

Gelişmekte olan bir diğer alan, kendi kendini iyileştirebilen nanokompozitlerin kullanımıdır. Bu malzemeler, yapısal hasarı onarma yetenekleri ile yalnızca darbe enerjisini absorbe etmekle kalmayıp, araç ömrü boyunca güvenliğin sürekliliğini sağlamayı amaçlamaktadır. Bu kapsamda MWCNT/TiO_2 gibi hibrit nanokompozit takviyelerinin kendini onarma kabiliyetlileriyle otomotiv güvenliğinde yalnızca pasif değil, aktif malzeme stratejileri de gündeme gelmektedir [113].

PNK'ler hem dış hem de iç otomotiv bileşenlerinde estetik, dayanıklılık ve işlevsellik açısından tercih edilmektedir. Dış bileşenlerde (kaput, tampon, bagaj kapağı vb.) kullanılan Levha/Yığın Kalıplama Bileşiği (SMC/BMC) veya Karbon Elyaf Takviyeli Polimer (CFRP) gibi kompozitlerin nanokompozit takviyeleriyle, darbe direnci ve hafiflemesi artış gösterir [114]. İç bileşenlerde ise, PNK'ler gösterge panellerinden koltuk kılıflarına kadar çok sayıda uygulama alanı bulur. Nanoparçacık katkısı ile kumaşlara antimikrobiyal, kendini temizleme ve alev

geciktiricilik gibi işlevsel özellikler kazandırılmaktadır. Böylelikle, iç mekan hem daha güvenli hem de daha hijyenik hale gelmektedir [115].

2.3.3 Havacılık Endüstrisinde Uygulamaları

Kompozit malzemeler uzun zamandır uçak yapımında tercih edilen seçenek olmuştur ve PNK'ler geleneksel malzemelere göre önemli iyileşmeler sunarak önemli bir ilerlemeyi temsil etmektedir. Bu iyileşmeler, nanotaneciklerin dikkate değer derecede düşük hacim ilaveleriyle, tipik olarak %1 ila %5 arasında değişen oranlarda bile elde edilir [116]. PNK'ler, gelişmiş bir elastik modül, üstün gaz bariyeri özellikleri, iyileştirilmiş ısıl performans, atomik oksijene karşı artırılmış direnç ve daha iyi ablatif performans sağlar. Bu malzemeler, uzayın zorlayıcı ortamında çalışan bileşenler için kritik olan yapısal uygulamalar, elektromanyetik girişim (EMI) kalkanı, hasar algılama yetenekleri ve kendi kendini onarma işlevleri için öne çıkmaktadır [117].

Havacılık endüstrisinin polimer nanokompozitlere olan ilgisinin temel bir nedeni, bu malzemelerin geleneksel metalik malzemelere kıyasla uçak ve uzay araçlarının ağırlığını önemli ölçüde azaltma potansiyelidir [118]. Havacılık araçlarının toplam kütlesini azaltmak, havacılık mühendisliğinde temel bir hedeftir çünkü bu, doğrudan yakıt verimliliğini artırır ve karbon emisyonlarını azaltır. Daha hafif uçaklar çalışmak için daha az yakıt gerektirir, bu da operasyonel ömürleri boyunca önemli maliyet tasarrufları sağlar ve çevresel ayak izini azaltır [119].

Araştırmalar, karbon nanotüplerin (CNT'ler) karbon fiber takviyeli polimerlere kıyasla %25'lik bir kütle azalımı ve uzay yapılarında alüminyuma kıyasla %50'ye varan bir azalma sağlayabilecek yüksek mukavemetli, hafif karbon ipliği oluşturmak için kullanıldığını göstermektedir [120]. Ayrıca, grafen nanokompozit malzemeler, havacılık uygulamaları için gerekli performans standartlarını karşılarken %20-30 oranında önemli bir ağırlık azalımı sergilemiştir [121]. Bu bulgular, söz konusu malzemelerin yakıt tüketimi ve operasyonel maliyetler üzerindeki önemli etkisini vurgulamaktadır. Havacılık sektörünün hafifletme konusundaki sürekli çabaları, polimer nanokompozit malzemelerle ilişkili derin ekonomik ve çevresel faydaları ortaya koymaktadır.

Ağırlık azaltmanın ötesinde, polimer nanokompozitler, hava araçlarının yapımında kullanılan malzemelerin mekanik özelliklerini önemli ölçüde geliştirme kapasitesi sunar. Nanotaneciklerın polimer matrislere eklenmesi, mukavemet, rijitlik ve

toklukta önemli iyileşmelere yol açabilir; bu özellikler genellikle geleneksel kompozit malzemelerin performansını aşar. Özellikle, düşük hacimli nanotanecik eklemeleri (genellikle %1-5) bile, geleneksel takviye maddelerinin çok daha yüksek yüklemeleriyle (%15-40) elde edilen özellik iyileşmelerine eşdeğer sonuçlar sağlayabilir [84]. Minimum takviye içeriğiyle önemli iyileşmeler elde etme yeteneği, nanokompozitlerin üstün performans sunarken önemli bir ağırlık eklemeden avantaj sağladığını gösterir. Ayrıca, polimer nanokompozitlerin hava aracı yapılarında kullanımı, yorulma ömrünü ve yapısal dayanıklılığı iyileştirerek uçağın genel güvenliğine ve uzun ömürlülüğüne katkıda bulunmuştur [122]. Yapılan çalışmalarda ağırlıkça %0.3 oranında CNT katkısıyla sürekli karbon elyaf takviyeli epoksi matrisli nanokompozitlerin çatlak ilerleme hızlarının %69 oranında azaldığını göstermiştir [123].

Havacılık malzemeleri, yüksek irtifa uçuşlarının soğuk koşullarından atmosferik yeniden giriş sırasında oluşan yoğun sıcağa kadar geniş bir aşırı sıcaklık yelpazesine maruz kalır. Polimer nanokompozitler, geleneksel polimerlere kıyasla önemli ölçüde artırılmış ısıl bozulmaya karşı geliştirilmiş direnç sunma potansiyeline sahiptir. Havacılık sistemleri, bu sıcaklık değişimlerine dayanabilen ve yüksek ısıl emisyon sergileyen malzemeler gerektirir. Polimer nanokompozitler, ısı dağılımını artıran ve aşırı sıcaklık koşullarında malzeme bozulmasını önleyen ısıl stabilizatörleri entegre edecek şekilde tasarlanabilir. Son zamanlarda yapılan bir çalışmada grafen ve hBN nanotaneciklerin hibrit olarak epoksi matrise ağırlıkça %0.5 oranlarında takviyelendirilmesiyle ısıl iletkenliğin %7 oranında, eğilme mukavemetinin ise %69 oranında arttığı gözlemlenmiştir [124]. Başka bir çalışmada ise epoksi-silan ile fonksiyonelleştirilmiş hBN nanotaneciğinin epoksi matrisine katılmasıyla oda sıcaklığındaki ısıl iletkenliğinde %142 oranında artışa ve camsı geçiş sıcaklığının 275ºC sıcaklıklara kadar yükseldiği ölçülmüştür [125]. Bu geliştirilmiş ısıl dayanım ve kararlılık, nanokompozitleri havacılık sektöründe daha geniş bir operasyonel ortam yelpazesi için uygun hale getirir.

Uçak ve uzay araçlarının karşılaştığı zorlu ortamlar, korozyona ve diğer çevresel bozulma türlerine karşı olağanüstü direnç gösteren malzemeler gerektirir. Polimer nanokompozitler, korozyona, uzayda bulunan atomik oksijene ve ultraviyole (UV) radyasyondan kaynaklanan bozulmaya karşı geliştirilmiş direnç sunabilir [126], [127]. Bu artırılmış direnç, zorlu koşullarda çalışan uçak ve uzay aracı sistemlerinin

uzun ömürlülüğünü ve yapısal bütünlüğünü sağlar. Nanotanecikler, havacılık bileşenlerini çevresel hasardan daha fazla koruyan etkili korozyon önleyici katmanlar geliştirmek için kaplamalara entegre edilebilir [128].

Modern havacılık araçlarındaki elektronik sistemlerin artan karmaşıklığı, etkili elektromanyetik girişim (EMI) korumasını daha önemli hale getirmiştir. Manyetik polimer nanokompozitler, hassas elektronik ekipmanları dış elektromanyetik alanlardan koruma yetenekleri nedeniyle bu uygulama için özellikle uygundur [129]. Bu, aviyonik ve diğer elektronik sistemlerin güvenilir çalışmasının güvenlik ve görev başarısı için kritik olduğu havacılık endüstrisinde çok önemlidir. Karbon nanotüp kompozitleri de aviyonik sistemler çevresinde kullanılan yapısal malzemelerde elektromanyetik girişimi etkili bir şekilde önleme yeteneğini göstermiştir. Son zamanlarda yapılan bir çalışmada karbon nanotüp/karbon polimer nanokompozit yapısının karbon matrisindeki mikro boşluklu yapısı ve karbon nanotüp içerisindeki nano boşluklu yapısı sayesinde elektromanyetik dalgaların çoklu yansıma yapmasına sebep olmuş ve saf CNT film ile elde edilen 36.5 dB şiddetine kıyasla 61.4 dB şiddetinde kalkanlama ile polimer nanokompozit yapıların tasarımının da performans üzerindekini etkisini ortaya koymuş ve elektromanyetik kalkanlama uygulamalarındaki etkisini göstermiştir [130].

Uzay tabanlı uygulamalar için, malzemelerin astronotları ve hassas ekipmanları zorlu uzay ortamından korumak için etkili radyasyon koruması sağlama yeteneği kritik öneme sahiptir. Polimer nanokompozitler, pasif radyasyon koruması için aktif bir şekilde araştırılmakta ve tasarlanmaktadır [131]. Hidrojen, bor ve azot gibi elementler içeren malzemeler, nötron radyasyonu koruma yetenekleri nedeniyle özellikle ilgi çekicidir; bor nitrür malzemeleri bu alanda umut verici performans göstermektedir. Yapılan bir çalışmada PI-hBN (Poliimid-Altıgen Bor Nitrür) nanokompozitleri bir nötron radyasyon kaynağına maruz bırakılmıştır. %2 ve %5 hBN katkılı PI doğrusal ve kütle soğurma katsayısı, saf PI'ye kıyasla sırasıyla 1.9 ve 2.2 kat oranında anlamlı bir şekilde arttığı gözlemlenmiştir [132]. Polimer nanokompozitler kullanılarak hafif ve etkili radyasyon korumasının geliştirilmesi, uzun süreli uzay görevlerini mümkün kılmak ve uzay yolcularının güvenliğini sağlamak için gereklidir.

Havacılık yapılarında sensörlerin doğrudan entegrasyonu, durumlarının gerçek zamanlı izlenmesi için giderek daha önemli hale gelmektedir. Manyetik polimer

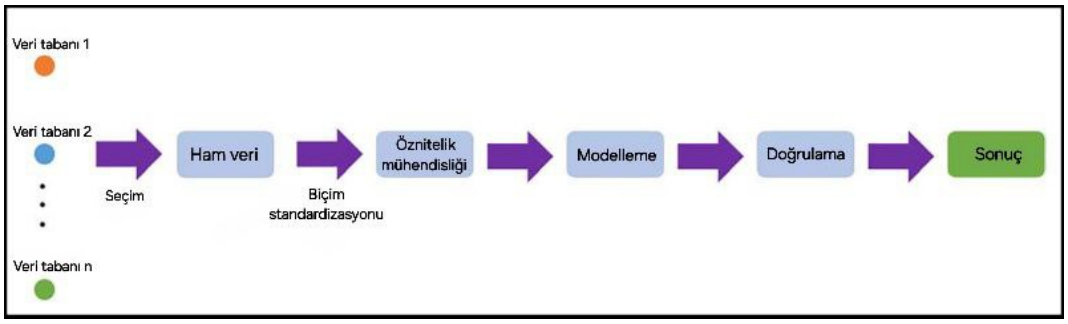
nanokompozitler, havacılık yapılarında gömülü sensörlerde kullanılarak stres, gerilim ve mikro hasar gelişimini sürekli olarak izler. Benzer şekilde, karbon nanotüp (CNT) tabanlı kendi kendine algılama yapısal sağlık izleme (SHM) kompozitleri, elektrik dirençlerindeki değişiklikleri izleyerek çatlak gibi hasarları tespit etmek için yerleşik sensörler olarak işlev görebilir. Grafen de uçak yapısı boyunca gerilim, sıcaklık ve nemi tespit etmek için son derece hassas sensörler oluşturmak için kullanılabilir. Bu sürekli yapısal sağlık izleme yeteneği, proaktif bakım, potansiyel arızaların erken tespiti ve nihayetinde havacılık operasyonlarında iyileştirilmiş güvenlik sağlar.

3
YAPAY SİNİR AĞLARI VE OPTİMİZASYON

Malzeme biliminde tarih boyunca dört paradigma dönüşümü gerçekleşmiştir. İlki deneme yanılma yöntemi ile malzeme geliştirmeleri, ikincisi fiziksel ve kimyasal yasalar ile destekli malzeme geliştirmeleri, üçüncüsü bilgisayar simülasyonlarıyla destekli malzeme geliştirmeleri ve nihai olarak dördüncüsü ise büyük verinin işlendiği makine öğrenimi tabanlı malzeme geliştirme çalışmalarıdır [133]. Bölüm boyunca öncelikle makine öğrenimi ile malzeme geliştirme çalışmalarının genel prensibi açıklanmış ve sonrasında makine öğrenimi yöntemlerine değinilmiştir. Genel kapsam açıklandıktan sonra makine öğrenimin bir alt konusu olan yapay sinir ağlarının genel yapısı, öğrenme mekanizmaları ve diğer makine öğrenmesi yöntemleriyle karşılaştırılması üzerinde durulmuştur. Ardından malzeme bilimi alanındaki uygulama örnekleri üzerinden, özellikle çok değişkenli ve karmaşık ilişkilerin var olduğu kompozit üretim süreçlerinde YSA'nın neden tercih edildiği açıklanmıştır. Son olarak, tez kapsamında gerçekleştirilecek optimizasyon çalışmalarının kuramsal çerçevesi ve olası veri işleme adımları ile hesaplama altyapısının gereklilikleri ele alınarak, çalışma bütünlüğü içerisinde YSA'nın nasıl konumlandığı incelenmiştir.

3.1 Makine Öğrenimi Yaklaşımlarına Genel Bakış

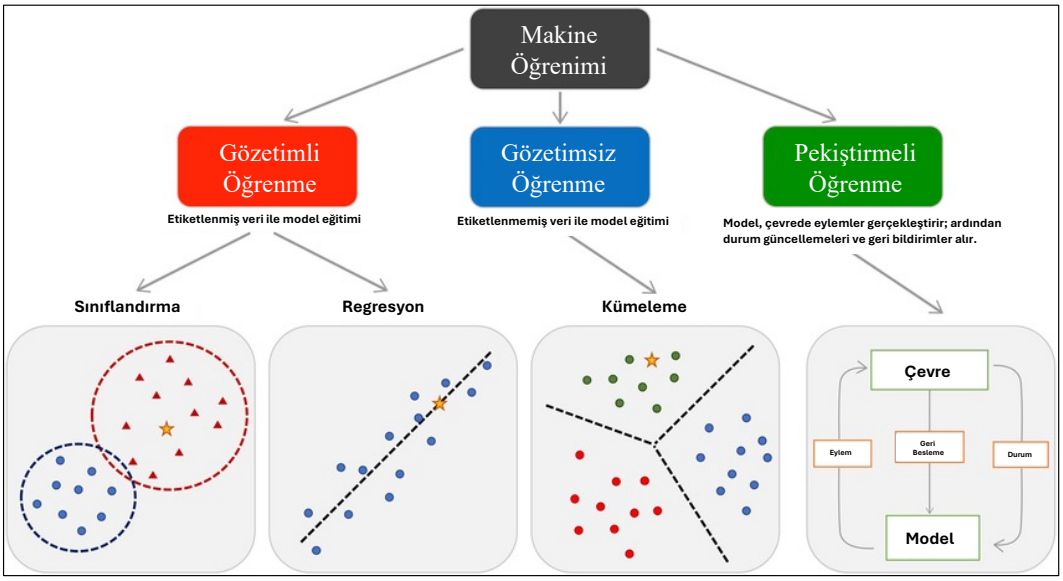
Makine öğrenimi, bilgisayarların doğrudan programlanmaksızın bir veri tabanı üzerinden hedeflenen bilgiyi öğrenmesini amaçlayan yapay zekâ (YZ) dalına verilen genel addır [134]. Temel yaklaşımı, gözlemlenen verilerle oluşturulan modeller aracılığıyla gelecekteki verileri veya olayları tahmin etmek, sınıflandırmak ya da süreçleri optimize etmektir. Günümüzde ML; sağlık, ekonomi, imalat, savunma ve daha pek çok sektörde yaygın şekilde kullanılmaktadır. Veri temelli çözümler sunarak girdi parametreleri arasında karmaşık ilişkilere sahip problemlerin üstesinden gelmeyi hedeflemektedir [134]. İleri bölümlerde detayları açıklanacak akış şeması ile makine öğrenimi yöntemiyle veri tabanları üzerinden hedeflenen sonuçlara ulaşılırken takip edilen temel yol paylaşılmıştır (Şekil 3.1).



Şekil 3.11 Makine öğrenimi iş akış şeması [133]

3.2 Makine Öğrenimi Yöntemleri

Makine öğrenimi yöntemleri, çeşitli problem tiplerine göre farklı kategorilere ayrılabilir. Genellikle gözetimli öğrenme (supervised learning), gözetimsiz öğrenme (unsupervised learning) ve pekiştirmeli öğrenme (reinforcement learning) olarak üç ana başlıkta incelenir. Gözetimli öğrenme, etiketli veri setleri üzerinde sınıflandırma veya tahmin yapmak üzere model eğitmeyi ifade eder. Gözetimsiz öğrenme ise etiketlenmemiş veri üzerinden veri içindeki doğal gruplamaları veya örüntüleri keşfetmeyi amaçlar. Pekiştirmeli öğrenme (RL) ise bir ajanın çevreyle etkileşime girerek en uygun eylemleri öğrenmesini sağlayan bir yaklaşım olup, kontrollü ortamlarda süreç optimizasyonu için sıklıkla tercih edilmektedir [135] (Şekil 3.2).



Şekil 3.2 Makine öğrenimi yöntemleri ana başlıkları [136]

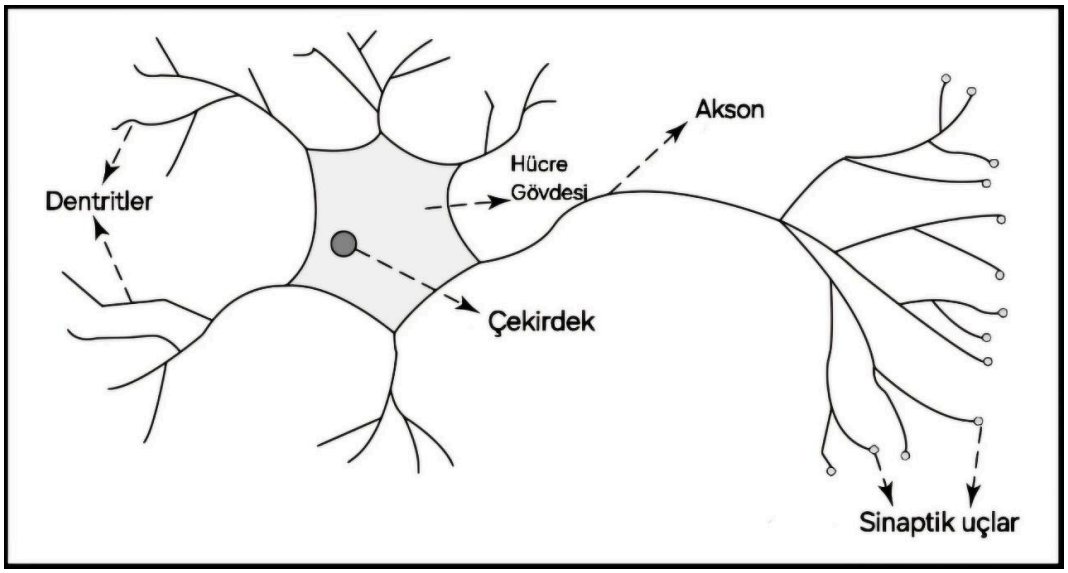
Bu temel yaklaşımların uygulanmasında pek çok yöntem kullanılmakla birlikte karar ağaçları (DT), destek vektör makineleri (SVM), ansamble yöntemleri

(Random Forest, Gradient Boosting vb.) ve yapay sinir ağları (YSA), yaygın olarak başvurulan algoritmalardan birkaçıdır. Her yöntem, modelin karmaşıklığı, veri boyutu, doğrusal veya doğrusal olmayan ilişkilere duyarlılık gibi yönlerden farklı avantajlar veya dezavantajlar barındırır. Yapay sinir ağları, özellikle yüksek boyutlu ve karmaşık veri ilişkilerinde sunduğu esnek modelleme kapasitesi ve öğrenebilme yetisiyle öne çıkar. Gerek çok katmanlı (Multi-Layer Perceptron, MLP) yapıları, gerekse daha derin öğrenme (deep learning) mimarileri (Convolutional Neural Networks, Recurrent Neural Networks, Transformers vb.) sayesinde, doğrusal olmayan fonksiyonları yüksek doğrulukla yakalayabildikleri için kapsamlı problem setlerinde tercih edilirler [137].

Bu tezde ele alınan problemde, farklı üretim ve malzeme parametrelerinin (dağıtma malzemesi, nanotanecik oranı, fonksiyonelleştirme durumu vb.) farklı malzeme özellikleri (camsı geçiş sıcaklığı, çekme mukavemeti vb.) üzerinde doğrusal olmayan ve çoklu etkileşen ilişkiler kurduğu gözlemlenmiştir. Böyle bir veri yapısında, geleneksel regresyon veya sınıflandırma yöntemleri bazen yetersiz kalabilmekte veya uzun deneme-yanılma süreçlerine ihtiyaç duyabilmektedir ki bu durum da yeni malzemelerin geliştirme sürelerini ve maliyetlerini arttırmaktadır. YSA modelleri ise söz konusu karmaşık ilişkileri yüksek doğrulukla öğrenerek, yeni üretim koşulları veya parametre değerlerinde malzemenin nasıl tepki vereceğini tahmin etme olanağı sunar [138].

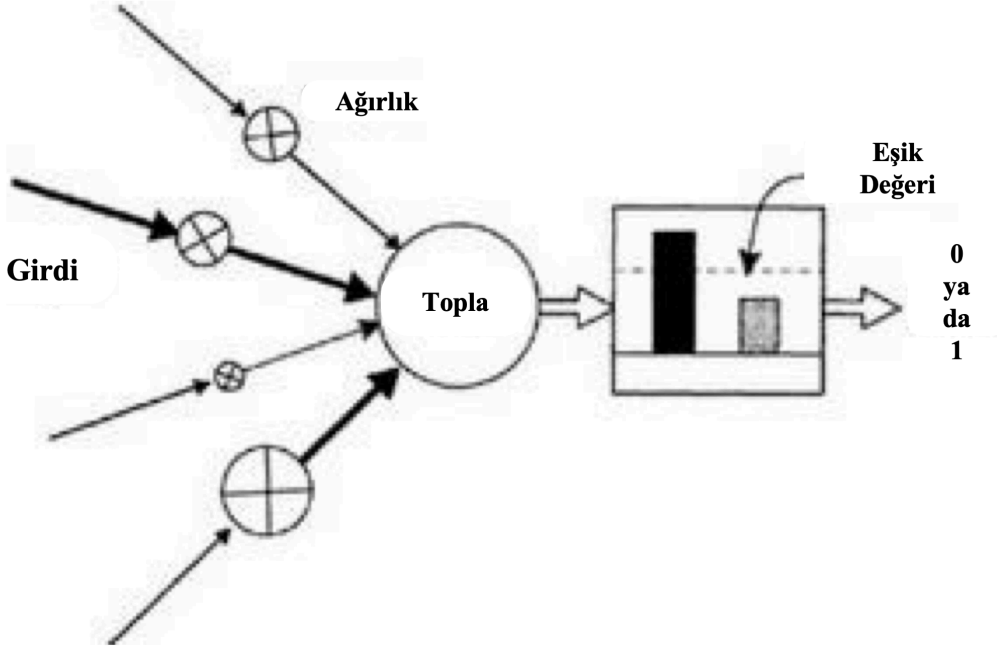
3.3 Yapay Sinir Ağlarının Temel Yapısı ve Öğrenme Mekanizmaları

Yapay sinir ağları, insan beyninin bilgi işleme yeteneğinden esinlenerek geliştirilmiş hesaplama modelleridir. İnsan beyni nöron isimli sinir hücrelerinden oluşur. Bu hücreler üç ana bölümden oluşur. Elektrokimyasal sinyalleri diğer hücrelerden alan “dentritler”, gelen sinyalleri birleştiren ve gerekli eşik değerini geçmesi durumunda bir aksiyon potansiyelini ateşleyen “soma” ve aksiyon potansiyelini diğer nöranlara ileten “axon” (Şekil 3.3) [137].



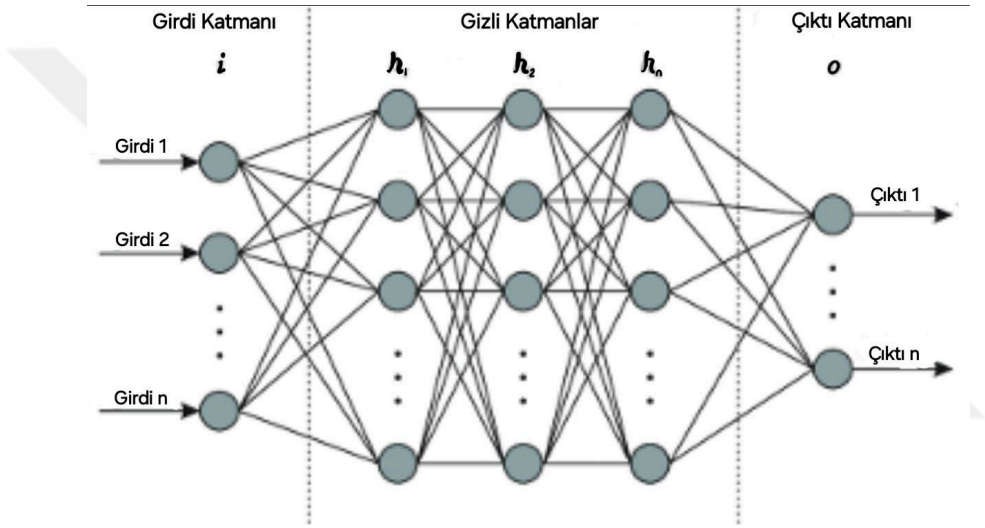
Şekil 3.3 Memeli sinir hücresi yapısı şematik gösterimi [139]

Bu sinir hücresi yapısından esinlenerek yapay sinir ağlarının temel yapıtaşı olan yapay nöronlar (düğüm) tasarlanmıştır. Düğüm dört ana bölümde incelenebilir; diğer düğümlerden gelen sayısal olarak ağırlıklandırılmış girdiler, (soma gibi) gelen girdileri birleştiren bir toplam fonksiyonu, toplam değerine lineer olmayan dönüşümleri gerçekleştiren aktivasyon fonksiyonu (ateşleme mekanizması), sonraki düğümlere iletilen çıktı değeri (axon'ların sinyali iletmesi) olarak incelenebilir [139] (Şekil 3.4).



Şekil 12 Yapay nöron yapısı şematik gösterimi [137]

Yapay sinir ağlarının (YSA) temelinde, veriyi aşamalı olarak işleyen katmanlar bulunur ve bu katmanlar giriş, gizli ve çıkış olarak üçe ayrılır (Şekil 3.5). Giriş katmanı, ham veya önceden işlenmiş veriyi ağın içine alarak ilk adımı oluşturur. Örneğin, hBN yükleme oranı ya da kür sıcaklığı gibi üretim parametreleri bu katmanda sayısal vektörler hâlinde temsile kavuşur. Gizli katmanlar, nöronlar aracılığıyla bu giriş verisini bir dizi doğrusal olmayan (nonlinear) dönüşümle işleyerek veriden daha soyut ve ileri düzeyde özellikler çıkarır. Böylelikle karmaşık örüntüleri yakalayabilen nöron düzeyinde hesaplamalar, çok katmanlı yapıya derinlik kazandırır. Son aşamada yer alan çıkış katmanı ise tahmin, sınıflandırma veya kontrol gibi görevlerde nihai sonuçları üretir.



Şekil 3.5 Temel YSA yapısı şematik gösterimi [140]

Çok sayıda düğüm ve katmandan oluşan bu modeller, veri içindeki örüntüleri öğrenme ve genelleme yapabilme kapasitesine sahiptir. Nöronlar arasındaki bağlantıların ağırlıkları, ağın eğitimi sırasında uyarlanarak giriş verisi ile beklenen çıktı arasındaki ilişki optimize edilmeye çalışılır. Bu sayede, eğitimde kullanılan örnekler üzerinden elde edilen bilgi, yeni veya görülmemiş verileri tahmin etmede veya sınıflandırmada kullanılabilir.

Bu katmanlar arasındaki bağlantıları anlamlandırmak için kullanılan aktivasyon fonksiyonları, YSA'nın doğrusal olmayan ilişkileri keşfetmesini mümkün kılar. ReLU (Rectified Linear Unit), negatif değerleri sıfıra eşitleyip pozitifleri olduğu gibi geçirerek hem basit bir hesaplama yapısına sahiptir hem de büyük ve derin ağlarda "gradyan kaybolması" sorununu hafifletir. Bazı durumlarda tanh veya sigmoid fonksiyonları kullanılarak verinin belirli aralıklara (−1 ile 1 veya 0 ile 1)

sıkıştırılması tercih edilebilir. Böylece, çıktının istatistiksel veya olasılıksal yorumlanmasında kolaylık sağlanır; ancak büyük derinliklerdeki gradyan sorunları bu fonksiyonlarda daha belirgin olabilir. En sık kullanılan aktivasyon fonksiyonları Tablo 3.1'de paylaşılmıştır.

Tablo 3.1 YSA'larda sık kullanılan aktivasyon fonksiyonları [141]

Fonksiyon Adı	Matematiksel Formül	Çıkış Aralığı	Kullanım Amacı
Doğrusal	$f(x) = x$	$(-\infty, \infty)$	Girdiyi değiştirmeden olduğu gibi çıktı olarak verir ve yapay sinir ağlarındaki en temel dönüşümü sağlar.
Doğrultulmuş Doğrusal Birim (RELU)	$f(x) = \max(0, x)$	$(0, \infty)$	Negatif girdileri sıfırlarken pozitif girdileri korur. Bu özelliği sayesinde oldukça hızlı ve etkili bir işlem sunar.
Sigmoid	$f(x) = 1/(1 + e^{-x})$	$(0, 1)$	Çıktıyı 0 ile 1 arasına sıkıştıran S şeklindeki eğrisiyle özellikle ikili sınıflandırma problemleri için idealdir.
Hiperbolik Tanjant	$f(x) = (e^{x} - e^{-x})/(e^{x} + e^{-x})$	$(-1, 1)$	Sigmoid'in daha gelişmiş bir versiyonu olarak çıktıyı -1 ile +1 arasına sıkıştırır.
Sızıntılı ReLU	$f(x) = \{0.01x, x<0; x, x\geq 0\}$	$(-\infty, \infty)$	ReLU'nun bir iyileştirmesi olup, negatif değerleri tamamen sıfırlamak yerine küçük bir eğimle korur.
Yumuşak Maksimum	$f(x_i) = e^{x}_i / \Sigma\, e^{x}_j$; $i = 1, ..., J$	$(0, 1)$	Çoklu sınıflandırma problemlerinde kullanılır ve tüm çıktıların toplamını 1'e eşitleyerek bunları birer olasılık olarak yorumlamayı sağlar.
Basamak (Ste)	$f(x) = \{-1, x<-1; x, -1\leq x<1; 1, x\geq 1\}$	$(-1, 1)$	Keskin geçişler yaparak çalışır ve daha çok eski tip yapay sinir ağlarında kullanılırdı.

Fonksiyon Adı	Matematiksel Formül	Çıkış Aralığı	Kullanım Amacı
İşaret (sign)	$f(x) = \{1, x>0; -1, x\leq 0\}$	(-1, 1)	Yalnızca girdinin pozitif veya negatif olma bilgisini döndürerek çok basit karar verme süreçlerinde rol oynar.
Sinüsoidal	$f(x) = \sin(x)$	(-1, 1)	Dalga şeklinde çıktılar ürettiği için periyodik verilere sahip uygulamalarda tercih edilebilir.
Gauss	$f(x) = e^{-x2}$	(0, 1)	Çan eğrisi şeklinde bir çıktı üretir ve genellikle radyal tabanlı fonksiyon (RBF) ağlarında kullan
Üstel	$f(x) = e^{-x}$	(0, ∞)	Hızlı azalan bir çıktı verir ve belirli özel durumlar veya uygulamalar için uygundur.
Mutlak Değer	$f(x) = \|x\|$	(0, ∞)	Negatif girdileri pozitif değerlere dönüştürerek basit bir doğrusal olmayan işlem sağlar.

YSA'larda eğitimin omurgasını ise geri yayılım (backpropagation) algoritması oluşturur. Öncelikle ileri besleme (forward pass) aşamasında, giriş katmanından itibaren her bir gizli katmanda verinin çıktıları hesaplanarak ağın tahmini veya sınıflandırması elde edilir. Ardından kayıp (loss) fonksiyonuyla gerçek değerle tahminin farkı ölçülür ve oluşan hata zincir kuralı yardımıyla katman katman geriye doğru taşınır. Bu süreçte, her bağlantının ağırlığının hatayı düşürecek yönde ne kadar ayarlanacağı saptanır. Eğitim veri setine ait her örnekte tekrarlanan bu döngü, ağırlıkları sistematik biçimde güncelleyerek zaman içinde daha düşük hatalara yakınsayan bir YSA modeli oluşturur. Öğrenme oranı (learning rate) veya ileri seviye optimizasyon yöntemleri (örneğin Adam, RMSProp) bu güncelleme adımını hızlandırıp kararlı hâle getirebilir [142].

Yeterli katman ve nöron sayısıyla tasarlanmış bir YSA, yüksek boyutlu veya doğrusal olmayan veriyi temsil etme gücüne sahip olsa da aşırı öğrenme

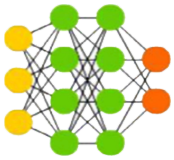
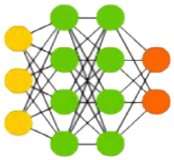
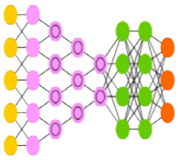
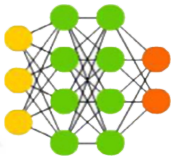
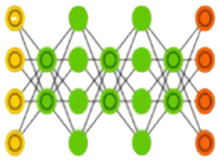
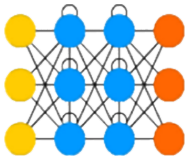
(overfitting) ve yetersiz öğrenme (underfitting) gibi riskleri beraberinde getirir. Çok katmanlı (derin) mimarilerde, eğitim verisini ezberleme eğilimi oluşabileceğinden "dropout", düzenlileştirme (L1/L2) ve erken durdurma gibi teknikler uygulanarak modelin yeni verilere genelleme kabiliyeti korunmalıdır [143]. Öte yandan, katman veya nöron sayısı çok az bir ağ, veri setinin karmaşıklığını yakalayamayıp yetersiz öğrenme sergiler. Bu sebeple YSA kurarken hem ağın derinliği hem de aktivasyon fonksiyonlarının seçimi dikkatle yapılmalı, modelin eğitim süreci ara metriklerle yakından izlenmelidir. Böylelikle, hem karmaşık malzeme sistemlerinin örüntülerine uygun bir temsil gücü kazanılır hem de eğitim ve hesaplama maliyetleri etkin bir dengeye oturtulur [144].

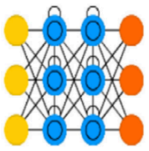
Ek olarak, derin öğrenme (deep learning) yaklaşımları son yıllarda özellikle görüntü işleme, metin analizi ve karmaşık veri setlerinin incelenmesi gibi alanlarda büyük başarılar elde etmiştir. Malzeme bilimi bağlamında ise mikroyapı görüntüleme ve yüksek boyutlu deneysel/simülasyon verileri üzerinde derin ağların kullanımı giderek yaygınlaşmaktadır [145].

3.4 Derin Yapay Sinir Ağı Mimarileri

Yapay sinir ağlarının hızlı gelişimi ve artan hesaplama imkânlarıyla birlikte, derin öğrenme (deep learning) uygulamalarında kullanılan mimariler de büyük bir çeşitlilik kazanmıştır. Bu kapsamda, farklı veri türlerini (metin, görüntü, zaman serisi vb.) işlemek amacıyla tasarlanan özel yapılar, klasik çok katmanlı algılayıcı (Multilayer Perceptron, MLP) modellerinin ötesine geçerek yüksek kapasitede temsil öğrenme (representation learning) olanağı sunmaktadır. Özellikle Evrişimsel Sinir Ağları (Convolutional Neural Networks, CNN) ve Yinelenen Sinir Ağları (Recurrent Neural Networks, RNN), malzeme bilimi ve kompozit malzeme geliştirme alanlarında önemli kullanım örneklerine sahip olan iki temel derin sinir ağı mimarisi olarak öne çıkmaktadır [145]. CNN'ler, görüntü veya mekânsal veri odaklı konularda yerel örüntüleri keşfetmede son derece başarılıyken; RNN'ler, zaman veya sıra bağımlı verilerdeki karmaşık ilişkileri yakalama kapasitesiyle dikkat çeker. Sık kullanılan YSA türleri Tablo 3.2'de paylaşılmıştır.

Tablo 3.2 Sık kullanılan YSA türleri [141]

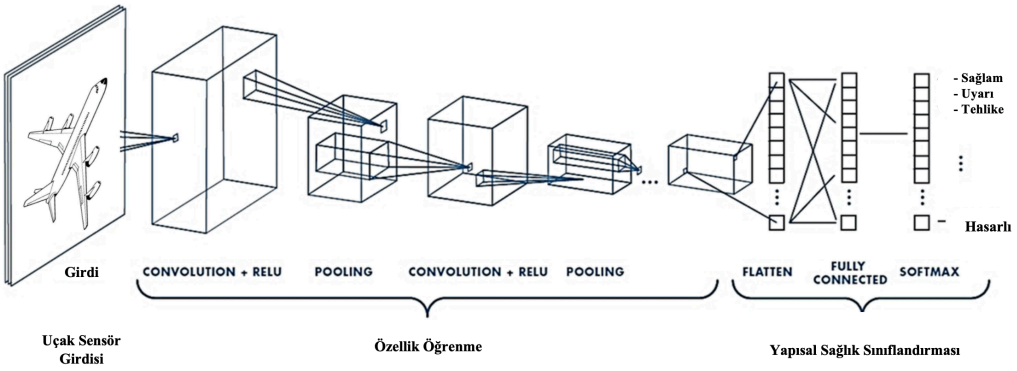
Yayılma Yönü	Ağ Adı (Türkçe)	Ağ Adı (İngilizce)	Bağlantı Tipi	Katman Sayısı (Ağ Yapısı)	Çoğunlukla Kullanılan Aktivasyon Fonksiyonu	Ağ Modeli Temsili
İleri Besleme	Geri Yayılım Sinir Ağı	(Backpropagation neural network - BPNN)	Tamamen Bağlı	Bir giriş katmanı, bir veya daha fazla gizli katman ve bir çıkış katmanı	Lojistik, hiperbolik tanjant, doğrusal, Gauss	
İleri Besleme	Çok Katmanlı Algılayıcı	(Multilayer perceptron network - MLP)	Tamamen Bağlı	İkiden fazla katman (bir giriş katmanı, bir veya daha fazla gizli katman ve bir çıkış katmanı)	Lojistik, hiperbolik tanjant, doğrusal	
İleri Besleme	Derin Evrişimsel Sinir Ağı	(Deep convolutional neural network - CNN)	Tamamen Bağlı Değil	Evrişimsel katman, alt örnekleme katmanı, tamamen bağlı katman	Lojistik, hiperbolik tanjant, ReLU, Leaky ReLU, softmax	
İleri Besleme	Derin İleri Beslemeli Sinir Ağı	(Deep feed-forward neural network - DFF)	Tamamen Bağlı	Bir giriş katmanı, bir veya daha fazla gizli katman ve bir çıkış katmanı	Lojistik, hiperbolik tanjant, ReLU, Leaky ReLU, softmax	
İleri Besleme	Derin İnanç Ağı	(Deep belief network - DBN)	Tamamen Bağlı	Kısıtlı Boltzmann makinesini içeren çoklu katmanlar; görünür katman ve bir gizli katman	Lojistik, hiperbolik tanjant, ReLU ve Leaky ReLU, Gauss	
İleri Besleme	Radyal Temelli Fonksiyon Sinir Ağı	(Radial basis function neural network - RBFNN)	Tamamen Bağlı	Üç katman (bir giriş katmanı, bir gizli katman ve bir çıkış katmanı)	Gauss	
Geri Besleme	Tekrarlayan Sinir Ağı	(Recurrent neural network - RNN)	Tamamen Bağlı	Bir giriş katmanı, bir veya daha fazla gizli katman ve bir çıkış katmanı	Hiperbolik tanjant, ReLU	
Geri Besleme	Hopfield Sinir Ağı	(Hopfield neural network)	Tamamen Bağlı	Tek bir katman (kendisiyle tekrar eden nöronlar içerir)	Lojistik, hiperbolik tanjant	

Geri Besleme	Uzun Kısa Süreli Bellek	(Long-short-term memory network - LSTM)	Tamamen Bağlı	Bir dizi giriş katmanı, bir LSTM katmanı, tamamen bağlı bir katman, bir softmax katman sınıflandırma çıkışı (sınıflandırma için) veya bir dizi LSTM katmanı, tamamen bağlı bir katman ve bir regresyon çıkışı (regresyon için)	Lojistik, hiperbolik tanjant	

3.4.1 Evrişimsel Sinir Ağları

Evrişimsel Sinir Ağları, özellikle iki ya da üç boyutlu görüntü verisinin işlenmesi ve mekânsal ilişkilerin keşfedilmesi amacıyla tasarlanmış özel katman yapıları içeren bir derin öğrenme mimarisidir. CNN'lerin temelinde, veri üzerinde kayan filtreler (kernel veya filtre olarak adlandırılan küçük boyutlu matrisler) kullanarak evrişim (convulation) işlemleri yapmak ve bu sayede bölgesel özelliklerin (kenar, doku, desen vb.) çıkarılmasını sağlamak yer alır [146].

CNN tabanlı ağlarda, ilk aşamalarda yer alan evrişim katmanları, ham veri (örneğin malzeme mikroyapısı görüntüsü) üzerinde gezinen filtrelerle pikseller arasındaki yerel örüntüleri yakalar. Bu örüntülerin belli bir seviye üzerinde birleştirilmesi (hierarchical feature extraction) sonucu, ağ derinleştikçe daha karmaşık doku veya desenleri tanımlayabilir. Havuzlama (pooling) katmanları, özellik haritası boyutunu azaltarak hem hesaplama yükünü düşürür hem de çeviri değişmezliği (translation invariance) kazandırır. Daha ileri katmanlarda yer alan tam bağlantılı (fully connected) katmanlar, elde edilen yüksek seviyeli özellikleri vektörel hâle getirerek çıktı katmanı için girdi oluşturur. Dropout, batch normalization gibi düzenlileştirme (regularization) yöntemleri de aşırı öğrenmeyi (overfitting) engelleyip ağın genelleme yeteneğini güçlendirir (Şekil 3.6).



Şekil 3.3 Evrişimsel sinir ağı yapısı [147]

Malzeme geliştirme süreçlerinde, CNN'lerin mikroyapı analizi ve hasar tespiti gibi alanlarda önemli avantajlar sunduğu görülmektedir. Örneğin, kompozit hava aracı parçalarının yapısal sağlık izlemesi geleneksel tahribatsız muayene yöntemleriyle masraflı ve erişimi olmayan bölgeler için mümkün olmayan bir husustur. Yapı içerisine yerleştirilen piezoelektrik sensörleriyle, yapının darbe aldığı zaman yapı içerisinde oluşan ultrasonik dalgaların iki boyutlu bir görüntüye dönüştürülmesiyle evrişimsel sinir ağı mimarisi kullanılarak hasar tespiti, konumlandırması ve sınıflandırması %94 oranından yüksek seviyede başarılı bir şekilde gerçekleştiği gözlemlenmiştir [147].

Başka bir örnekse, bir kompozit malzemenin SEM (Taramalı Elektron Mikroskobu) veya XCT (X-ışını Tomografisi) görüntüleri üzerinde fiber yönelimi, gözenek dağılımı ya da tanecik homojenliği gibi yapısal parametreler otomatik olarak çıkarılabilir [148]. Bu yaklaşım, insan faktörüne dayalı geleneksel incelemelerde sık karşılaşılan subjektif hataları en aza indirger ve malzeme mikroyapısına dair daha zengin verilerle araştırmacılara rehberlik eder. Benzer şekilde, fiber takviyeli polimer veya metal matrisli kompozitlerde çatlak, delaminasyon veya iç hasarın CNN tabanlı modellerce otomatik tespit edilmesi, kalite kontrol süreçlerine hız ve standartlaşma kazandırır. Üretim sonrası elde edilen yüzey veya iç yapı görüntülerinde mikroyapı değişimlerini ölçerek farklı takviye oranları, kürleme sıcaklığı veya katkı maddesi yükleme oranı gibi parametrelerin malzemeye etkisini değerlendirmek de mümkün olur.

Böylesi bir örnek epoksi/hBN kompozitlerde, hBN parçacıklarının homojen dağılımını incelemek üzere SEM veya optik mikroskop görüntülerinin CNN tabanlı bir sisteme girdi olarak verilmesi halinde, ağ tanecik sınırlarını otomatik olarak

saptayabilir, boyut ve şekil analizi yaparak kullanıcıya ayrıntılı istatistikler sunabilir [149].

3.4.2 Yineleyen Sinir Ağları

Recurrent Neural Networks (RNN), zaman serisi veya ardışık verilerin işlendiği problemlerde öne çıkan bir diğer derin öğrenme mimarisidir. RNN'lerin öne çıkan özelliği, önceki adımlardan gelen bilginin "geri besleme" mekanizmasıyla ağın gizli durumu (hidden state) içinde saklanması ve böylece sonraki adımlara aktarılabilmesidir. Bu şekilde zaman bağımlı örüntüler veya süreç içindeki dinamik değişimler modellenerek, ileriye dönük tahminler veya anlık kontrol kararları verilebilir [150].

RNN'lerin temel versiyonu (basit RNN) uzun sekanslarda "gradyan patlaması" veya "gradyan kaybolması" (exploding/vanishing gradient) problemleri yaşayabildiğinden, LSTM (Long Short-Term Memory) ve GRU (Gated Recurrent Unit) gibi gelişmiş yapılar geliştirilmiştir. Bu yapılar, kapı (gate) mekanizmaları aracılığıyla, hangi bilginin saklanıp hangi bilginin atılacağına karar vererek uzun süreli bağımlılıkları daha etkin bir şekilde öğrenebilir [151]. Sürekli bir hat üzerinde malzeme üretiminde, reaktör sıcaklığı, basınç, viskozite veya pH gibi parametrelerin zamana bağlı sürekli ölçüldüğü durumlarda, LSTM/GRU tabanlı ağlar ardışık veri içindeki uzun vadeli ilişkileri yakalayıp ileriye dönük tahminler üretebilmektedir [152].

Malzeme bilimi süreçlerinde RNN kullanımı, özellikle üretim hattındaki sensörlerden gelen anlık verileri işleyerek anomali tespiti ya da gerçek zamanlı kontrol senaryolarını mümkün kılar. Örneğin, bir epoksi reçinenin kürleme aşamasında, sıcaklık ve viskozitenin dakikalar veya saniyeler ölçeğinde değiştiği sürekli bir akış durumu söz konusudur. RNN tabanlı bir model bu ardışık veriyi kullanarak, kür reaksiyonunun beklenenden hızlı ilerlediğini veya yavaş kaldığını öngörebilir ve parametrelerde (örneğin basınç, sıcaklık ayarı) dinamik değişiklikler önererek nihai ürünün mekanik özelliklerini optimize edebilir. Bu yaklaşımla üretim süresinde ve enerji kullanımında tasarruf sağlanmasının yanı sıra, ürün kalitesinin de tutarlı biçimde korunması mümkün olur [153].

3.5 Veri Hazırlama, Karakterizasyon Teknikleri ve Model Performansı

Yapay sinir ağlarının malzeme bilimi uygulamalarındaki başarısı, veri setinin doğruluğu, güvenilirliği ve kapsamlılığına bağlıdır. Malzeme karakterizasyonunda deneysel olarak elde edilen veriler, birçok değişkene bağlı olarak hata içerebilir veya eksik olabilir. Ayrıca, kullanılan ölçüm teknikleri belirli bir hassasiyet limitine sahiptir ve bu limitler ölçüm sonuçlarında sapmalara veya gürültülere neden olabilir. Bu nedenle, verilerin dikkatli bir şekilde toplanması, temizlenmesi ve işlenmesi, YSA'nın genel performansını doğrudan etkileyen kritik faktörler arasında yer alır. Veri hazırlama aşamasında, ölçüm hatalarının en aza indirilmesi, eksik verilerin uygun yöntemlerle tamamlanması ve anormal değerlerin belirlenerek uygun şekilde işlenmesi gerekmektedir. Ayrıca, deney tasarımının uygun şekilde gerçekleştirilmesi, veri setinin tüm değişken kombinasyonlarını yeterince temsil edip etmediğini kontrol etmek açısından büyük önem taşır. Deneysel veriler, ölçüm hataları, eksik veriler veya cihaz hassasiyet limitleri nedeniyle sapmalar içerebilir. Bu nedenle, veri hazırlama sürecinde eksik ve hatalı verilerin düzeltilmesi, uygun ölçeklendirme ve normalizasyon yöntemlerinin uygulanması büyük önem taşır [154].

Ayrıca, YSA'nın genelleme yeteneğini artırmak için aşırı öğrenmenin önlenmesi gerekmektedir. Çapraz doğrulama, erken durdurma ve düzenlileştirme gibi teknikler modelin daha kararlı olmasını sağlar. Veri setinin yetersiz olduğu durumlarda veri çoğaltma ve sentetik veri üretimi gibi yöntemler kullanılabilir; ancak bu tekniklerin malzeme davranışını doğru şekilde yansıtması dikkatle değerlendirilmelidir.

3.6 Malzeme Bilimi Uygulamalarında Veri Toplama Süreci

Malzeme bilimi uygulamalarında veri toplama süreci, laboratuvar ortamındaki farklılıklar, kullanılan cihazların kalibrasyonu ve deneysel koşulların değişkenliği gibi faktörlerden etkilenebilir. Bu nedenle, deney sonuçlarının kayıt altına alınması sırasında belirli standart prosedürlerin uygulanması gerekmektedir. Ölçüm cihazlarının hassasiyet sınırları göz önünde bulundurularak, belirlenen parametrelerin istatistiksel analizi yapılmalı ve olası sapmalar tespit edilmelidir. Örneğin, çekme testi veya sertlik ölçümleri gibi mekanik testlerde, operatör etkisi ve cihaz kaynaklı hatalar, sonuçların güvenilirliğini etkileyebilir. Benzer şekilde,

ısıl analizler sırasında ısıtma hızı veya atmosfer koşulları gibi değişkenler, ölçüm sonuçlarını değiştirebilir. Dolayısıyla, elde edilen verilerin malzeme davranışını doğru şekilde yansıttığından emin olmak için verilerin doğrulanması ve gerektiğinde filtrelenmesi gerekmektedir.

3.7 Eksik ve Aykırı Verilerin Yönetimi

Deneysel verilerin işlenmesi aşamasında, eksik verilerin uygun yöntemlerle tamamlanması gerekmektedir. Eksik veriler, doğrudan silinirse veri setinin bütünlüğü bozulabilir ve modelin doğruluk oranı düşebilir. Bunun yerine, eksik verilerin ortalama veya medyan değeri ile doldurulması, regresyon teknikleriyle tahmin edilmesi ya da istatistiksel benzetim (multiple imputation) yöntemleri ile tamamlanması önerilmektedir. Ayrıca, uç (aykırı) değerlerin tespiti, modelin sağlıklı bir şekilde öğrenmesini sağlamak için büyük önem taşır. Aykırı değerler, ölçüm hatalarından kaynaklanıyor olabilir veya malzemenin beklenmeyen bir özelliğini yansıtabilir. Bu yüzden, standart sapma analizi, interkuartil aralık (IQR) veya izolasyon ormanları gibi istatistiksel yöntemler kullanılarak aykırı değerlerin belirlenmesi ve gerekirse veri setinden çıkarılması gereklidir [155].

3.8 Veri Ön İşleme ve Normalizasyon Süreçleri

Veri ön işleme aşamalarından biri de özellik ölçeklendirme veya normalizasyon süreçleridir. Malzeme bilimi uygulamalarında, ölçülen değişkenler genellikle farklı büyüklük aralıklarında olabilir. Örneğin, sıcaklık değişkeni 0–200 °C arasında ifade edilirken, dolgu oranı yüzde cinsinden belirtilmektedir. Bu tür farklı ölçeklerdeki değişkenlerin doğrudan YSA modeline girdi olarak verilmesi, öğrenme sürecini zorlaştırabilir ve modelin ağırlık güncelleme sürecini etkileyerek hatalı tahminler üretmesine neden olabilir. Bu yüzden, verilerin belirli bir ortak aralıkta normalize edilmesi veya standartlaştırılması gerekmektedir. Min-max ölçeklendirme veya Z-puanı dönüşümü gibi yöntemler kullanılarak veriler aynı ölçek düzlemine getirilmelidir. Bu işlem, modelin daha hızlı ve kararlı bir şekilde öğrenmesini sağlayarak eğitim sürecini iyileştirmektedir [156].

3.9 Aşırı Öğrenme (Overfitting) Problemi ve Çözüm Yöntemleri

Yapay sinir ağlarının öğrenme sürecinde dikkat edilmesi gereken en önemli konulardan biri aşırı öğrenme (overfitting) problemidir. Aşırı öğrenme, modelin eğitim veri setine gereğinden fazla uyum sağlaması ve yeni veri setlerine genelleme yapamaması durumudur. Bu, modelin eğitim aşamasında yüksek doğruluk oranı gösterirken, gerçek dünya verileri üzerinde başarısız olmasına neden olabilir. Aşırı öğrenmeyi önlemek için çapraz doğrulama (cross-validation), erken durdurma (early stopping), düzenlileştirme (L1 ve L2 normları) veya "dropout" gibi yöntemler uygulanmalıdır. Çapraz doğrulama, veri setini farklı eğitim ve test gruplarına ayırarak modelin farklı veri setleri üzerinde doğruluk oranını test etmesini sağlar. Erken durdurma yöntemi, modelin belirli bir iterasyon sonrası hata oranı düşmediğinde eğitimi durdurarak aşırı öğrenmeyi engeller. L1 ve L2 düzenlileştirme yöntemleri, modelin ağırlıklarını sınırlandırarak fazla karmaşık hale gelmesini önler ve daha dengeli bir öğrenme süreci sunar. Dropout tekniği ise eğitim sırasında bazı nöronların rastgele devre dışı bırakılmasıyla modelin belirli ağırlıklara bağımlı hale gelmesini önleyerek genelleme yeteneğini artırır [157].

Çapraz doğrulamanın temel amacı, modelin eğitim verisi üzerindeki hatası ile yeni veriler üzerindeki hatası arasındaki farkı minimize etmektir. Bu fark, genellikle eğitim hatası (in-sample error) ve genelleme hatası (out-of-sample error) olarak adlandırılır. Eğitim hatası, modelin eğitim verisi üzerindeki performansını ölçerken, genelleme hatası modelin yeni veriler üzerindeki performansını değerlendirir.

Örneğin, doğrusal regresyon modelini ele alalım. Bu modelde, gerçek yanıt değerleri ve $(y_1, y_2, \dots, y_n)$ her biri p boyutlu vektör olan bağımsız değişkenler $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ bulunmaktadır. Eğitim seti üzerinde en küçük kareler yöntemiyle bir hiper düzlem $(\hat{y} = a + \beta^T x)$ elde edilir. Eğitim seti için ortalama kare hata (Mean Squared Error- MSE) (1) numaralı denklem ile hesaplanır.

$$\text{MSE}_{\text{eğitim}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - \beta^T x_i)^2 \qquad (1)$$

Eğer model doğru bir şekilde yapılandırılmışsa, bazı varsayımlar altında, eğitim seti için hesaplanan MSE'nin beklenen değeri, doğrulama seti için MSE'nin beklenen değerinin yaklaşık olarak $(\frac{n-p-1}{n+p+1})$ katıdır. Bu oran 1'den küçük olduğundan, eğitim

seti üzerindeki MSE, modelin bağımsız bir veri seti üzerindeki performansını iyimser bir şekilde değerlendirir. Bu yanlı tahmine "in-sample" tahmini denir; çapraz doğrulama ise "out-of-sample" tahmini sağlar [158].

3.9.1 k-Katlı Çapraz Doğrulama (k-Fold Cross-Validation)

En yaygın çapraz doğrulama yöntemlerinden biri olan k-katlı çapraz doğrulamada, veri seti yaklaşık olarak eşit büyüklükte k alt kümeye (fold) bölünür. Her bir alt küme sırayla doğrulama seti olarak kullanılırken, kalan k-1 alt küme eğitim için kullanılır. Bu süreç k kez tekrarlanır ve her bir iterasyonda doğrulama seti üzerindeki hata hesaplanır. Son olarak, k iterasyonun ortalama hatası alınarak modelin genel performansı değerlendirilir.

Matematiksel olarak, her bir iterasyon için doğrulama hatası (MSE_i) (2) numaralı denklem ile hesaplanır.

$$\mathrm{MSE}_i = \frac{1}{|V_i|} \sum_{j \in V_i} \left(y_j - \hat{y}_j\right)^2 \tag{2}$$

Burada (V_i), i'inci doğrulama setini, ($|V_i|$) ise bu setin eleman sayısını ifade eder. Tüm k iterasyonun ortalaması alınarak çapraz doğrulama hatası (3) numaralı denklem ile elde edilir:

$$\mathrm{MSE}_{\mathrm{CV}} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \mathrm{MSE}_i \tag{3}$$

Bu yöntem, modelin farklı veri alt kümeleri üzerindeki performansını ölçerek aşırı öğrenmeyi tespit etmeye ve modelin genelleme yeteneğini artırmaya yardımcı olur. Ayrıca, veri setinin boyutu küçük olduğunda, çapraz doğrulama model değerlendirmesi için daha güvenilir bir yöntem sunar.

3.9.2 Veri Setinin Yetersiz Olduğu Durumlarda Alternatif Yaklaşımlar

Veri setinin sınırlı olduğu durumlarda, veri çoğaltma (data augmentation) veya sentetik veri üretme yöntemleri devreye girebilir. Özellikle malzeme mikroyapısının görüntü tabanlı analizlerinde, veri setini genişletmek için döndürme, ölçeklendirme veya gürültü ekleme gibi teknikler uygulanabilir [159]. Ancak, malzeme bilimi uygulamalarında bu tür yöntemlerin dikkatli bir şekilde kullanılması gerekmektedir, çünkü sentetik verilerin gerçek deneysel sonuçları ne derece temsil ettiği konusunda kesin bir güvence bulunmamaktadır. Bu nedenle,

sentetik verilerin model performansına olan etkisi dikkatlice incelenmeli ve gerektiğinde sadece yardımcı veri olarak kullanılmalıdır.

Sonuç olarak, yapay sinir ağlarının malzeme bilimi uygulamalarında başarılı bir şekilde kullanılabilmesi için veri hazırlama, karakterizasyon tekniklerinin doğruluğu ve modelin performansını artırmaya yönelik yöntemlerin dikkatlice uygulanması gerekmektedir. Veri setinin temiz, eksiksiz ve güvenilir olması, uygun deney tasarımı ile oluşturulması ve aşırı öğrenmenin önlenmesi, modelin genelleme kabiliyetini artırarak daha güvenilir tahminler yapılmasını sağlar.

3.10 YSA Yöntemlerinin Malzeme Bilimindeki Uygulama Örnekleri

Yapay sinir ağları, malzeme biliminde çeşitli uygulama alanlarına sahiptir ve kompozit üretimi bu alanlardan sadece biridir. Örneğin, metallerin ve alaşımların mekanik özelliklerinin tahmin edilmesi, seramik malzemelerin kırılamazlık veya tokluk özelliklerinin belirlenmesi, çok katmanlı kompozitlerde tabakalar arasındaki bağ kuvvetinin öngörülmesi gibi konularda da YSA'nın başarılı sonuçlar verdiği bildirilmektedir. Özellikle malzeme karakterizasyonunun hızlı şekilde gerçekleştirilmesi ve yeni formülasyonların denenmesinde deneysel maliyetin azaltılması, bu alanda YSA kullanımının yaygınlaşmasına katkı sunmaktadır.

Epoksi matrisli kompozit sistemlerde, grafen, nano-kil, karbon nanotüpler ve metal oksit nanotanecikler gibi çeşitli takviye maddeleri ile gerçekleştirilen çok sayıda çalışma literatürde yer almaktadır. Bu takviye maddelerinin epoksi matrisin mekanik, ısıl ve elektriksel özellikleri üzerindeki etkilerini değerlendirmek amacıyla yapay sinir ağı (YSA) temelli modelleme yaklaşımlarının kullanıldığı çalışmalar, mevcut bilgi birikimini genişletmektedir. Bu tez kapsamında, altıgen bor nitrür (hBN) takviyesine odaklanılmakta olup, benzer modelleme yöntemlerinin grafen-hBN hibrit sistemleri gibi daha karmaşık yapılandırmalara uyarlanabilirliği mümkündür. Literatürde yer alan çalışmaların model parametrizasyonu (örneğin, katman sayısı, nöron sayısı), örneklem büyüklüğü ve deneysel tasarım stratejileri açısından incelenmesi, bu tezde kullanılan yöntemsel yaklaşımın değerlendirilmesine olanak sağlamaktadır.

Yapay sinir ağlarının, kürleme reaksiyonunun kinetiği, viskozite değişimi ve mikro yapı evrimi gibi süreç parametrelerinin eş zamanlı izlenmesine yönelik gerçek zamanlı kontrol sistemlerinde kullanıldığı örnekler de bulunmaktadır. Bu tür

uygulamalarda, süreç parametrelerinin çevrim içi olarak optimize edilmesiyle üretim süresi ve maliyetin azaltılması hedeflenmektedir. Söz konusu uygulama örnekleri, gerçek zamanlı optimizasyon yaklaşımlarına ilişkin kapsamlı bir perspektif sunmaktadır.

Varughese ve Sreekanth [51], altıgen bor nitrür (hBN) içeren epoksi nanokompozitlerinde tanecik dağılımını iyileştirmek ve mekanik özelliklerini tahmin etmek amacıyla makine öğrenmesi ve derin öğrenme modellerini kullanarak bir çalışma gerçekleştirmiştir. Çalışmada, hBN'nin epoksi matris içindeki dağılımını optimize etmek için izopropanol ve dimetil keton çözücüleri kullanılmış ve bu yöntemlerin nanokompozitin mekanik performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ağırlıkça %0.5 hBN içeren izopropanol içeren numunelerde çekme dayanımı %61, eğilme dayanımı %38.41 ve eğilme modülü %35.80 oranında artış göstermiştir.

Mekanik özelliklerin tahmini için doğrusal regresyon (LR), rastgele orman regresyonu (RFR), destek vektör regresyonu (SVR) ve derin sinir ağı (DNN) modelleri kullanılmıştır. DNN modeli, en düşük tahmin hatası (MAPE) ve en yüksek R^2 (0.99468–0.99966) değerleri ile en başarılı model olarak belirlenmiştir, çünkü çok katmanlı yapısı, doğrusal olmayan ilişkileri daha iyi öğrenmesine ve nanokompozit sistemlerdeki karmaşık etkileşimleri modellemesine olanak sağlamıştır. Adam optimizasyon algoritması ve MAPE kayıp fonksiyonu, modelin doğruluğunu artırmış, scatter plot analizleri ise tahmin edilen ve gerçek değerlerin mükemmele yakın örtüştüğünü göstermiştir. Sonuç olarak, Varughese ve Sreekanth'in çalışması, DNN'nin nanokompozitlerin mekanik özelliklerini yüksek doğrulukla tahmin etmede en etkili yöntem olduğunu kanıtlamaktadır.

4
MALZEMELER VE YÖNTEMLER

4.1 Kullanılan Kimyasal Maddeler

Bu çalışmada, yüksek mekanik dayanım, kimyasal direnç ve ısıl kararlılık özellikleri nedeni ile havacılık sektöründe yaygın olarak tercih edilen, epoksi reçine ve amin esaslı sertleştiriciden oluşan bir polimer matris sistemi kullanılmıştır. Epoksi reçine (EP), 25 °C'de 1.17 g/mL yoğunluğa ve 850 mPa.s viskozite değerine sahip olup Biresin® CR122 ticari adı ile Sika Ltd., Türkiye firmasından temin edilmiştir. Epoksi reçine sertleştiricisi olarak ise Biresin® CH122-5 ticari adı ile yine aynı firmadan temin edilen 25 °C'deki yoğunluğu 0.93 g/mL ve viskozite değeri 15 mPa.s olan amin esaslı sertleştirici CH122-5 kullanılmıştır. Ortalama tanecik boyutu 110 nm olan hekzagonal bor nitrür (hBN-110) Bortek Bor Teknolojileri ve Mekatronik San. ve Tic. A.Ş. ve ortalama tanecik boyutu 40 nm olan hekzagonal bor nitrür (hBN-40) ise Nanokar Kimyevi Maddeler San. ve Tic. Ltd. Şti. firmalarının ürünleridir. Aseton (ASE, %99.5), izopropil alkol (IPA, ≥%99.5) ve etanol (ETH, %99.9) Tekkim Kimya San. Ltd. Şti. firmasından temin edilmiştir. Sigma-Aldrich firmasından sağlanan (3-aminopropil) trietoksisilan (APTES, ≥%98) hBN nanotaneciklerinin epoksi matris ile arayüz etkileşimini arttırmak amacı ile yüzey fonksiyonelleştirme ajanı olarak kullanılmıştır.

4.2 hBN-110 Nanotaneciklerinin Fonksiyonelleştirilmesi

hBN-110 nanotaneciklerinin fonksiyonelleştirilmesi iki temel aşamada gerçekleştirilmiştir. İlk aşama, yüzey aktivasyonudur. Bu kapsamda, yüzeylerinde hidroksil (–OH) gruplarının oluşumu sağlamak amacı ile hBN-110 nanotanecikleri 1100 °C sıcaklıkta ve oksijen atmosferi altında 1 saat süreyle ısıtılmıştır.

İkinci aşamada ise; ilk aşamada elde edilen hidroksillenmiş hBN nanotaneciklerinden (hBN-110–OH) 0.5 g alınarak 100 mL etanol içinde 30 dakika süreyle manyetik karıştırıcı kullanılarak dağıtılmıştır. Ardından, taneciklerin homojen dağılımını sağlamak amacıyla karışım buz banyosunda 40 dakika boyunca ultrasonik işleme tabi tutulmuştur.

Ultrasonikasyonun ardından, elde edilen dağılmış çözelti 250 mL'lik cam bir balona alınarak geri soğutucu düzeneğine bağlanmış ve inert atmosfer sağlamak üzere argon gazı akışı eşliğinde 78 °C'ye kadar ısıtılmıştır. Bu sıcaklıkta 15 dk. boyunca manyetik olarak karıştırıldıktan sonra, argon atmosferi korunarak sisteme 2 mL APTES ilave edilmiştir. Bu işlemin ardından, reaksiyonu 78 °C'de, argon atmosferi ve manyetik karıştırma altında 5 saat boyunca sürdürülmüştür.

Reaksiyonun tamamlanmasının ardından, elde edilen fonksiyonelleştirilmiş hBN nanotanecikleri (hBN-110-APTES) reaksiyon ortamından uzaklaştırılmış ve sırasıyla su ve etanol ile yıkandıktan sonra kurutulmuştur.

4.3 hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Üretimi

hBN-100 nanotaneciklerinin aseton, etanol ve izopropil alkol olmak üzere farklı çözücülerde dağıtıldığı, APTES ile fonksiyonlaştırılmış (hBN-110-APTES) ve fonksiyonelleştirme yapılmamış (hBN-100) nanotaneciklerin kullanıldığı ve iki farklı ortalama tanecik boyutuna sahip nanotaneciklerin (hBN-110 ve hBN-40) çeşitli oranlarda katkılandırıldığı olmak üzere farklı koşullarda ve malzeme bileşiminde epoksi (EP) esaslı nanokompozitler hazırlanmıştır. Tüm nanokompozitlerde epoksi reçine/sertleştirici oranı sabit olup ağırlıkça 100/30 olarak alınmıştır. Nanotaneciklerin matris sistemi içerisindeki oranları ise epoksi reçine ve amin esaslı sertleştiriciden oluşan karışımın toplam ağırlığına göre belirlenmiştir.

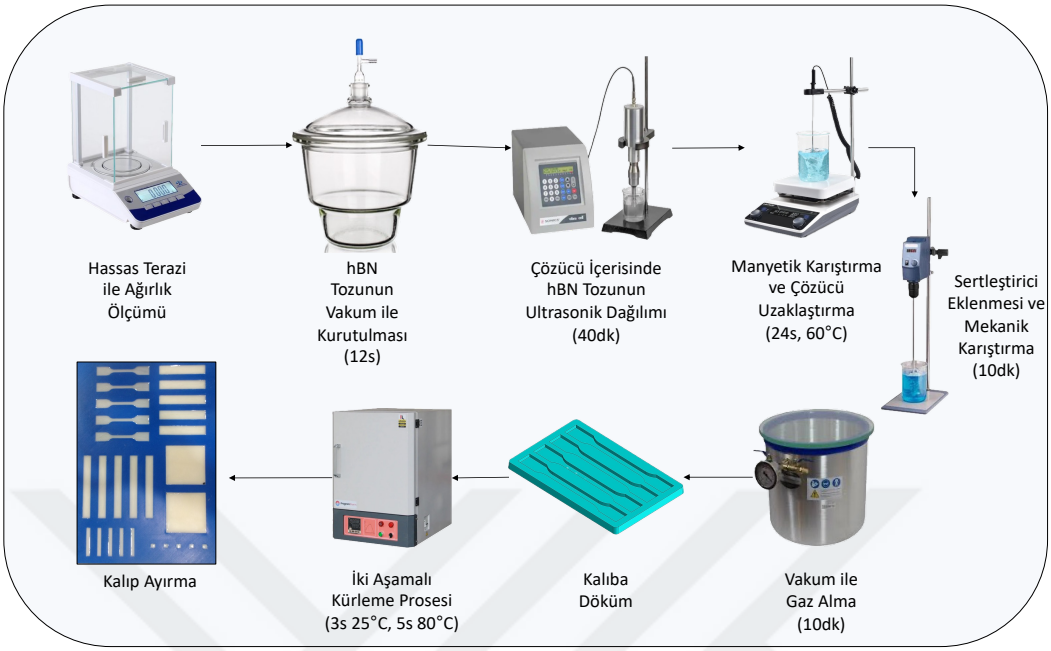
hBN/epoksi nanokompozitlerin üretimi Şekil 4.1'de şematik olarak gösterilen sekiz aşamadan oluşan bir işlem ile gerçekleştirilmiştir:

- İlk iki aşamada, hBN-100 nanotanecikleri 12 saat vakumlu desikatörde kurutularak nem ve olası uçucu kalıntılardan arındırılmış ve belirlenen miktarda (toplam matris karışımının ağırlıkça %0.1'i kadar) virgülden sonra dört basamak hassasiyetle tartım yapabilen analitik terazide tartılmıştır.
- Üçüncü aşamada, hBN-100 nanotaneciklerinin polimer matris içerisinde homojen dağılımı üzerine çözücünün etkisini belirlemek için üç farklı çözücü (aseton, etanol veya izopropil alkol) içerisinde ve her birinde hBN-100 oranı %0.1 (ağırlık/hacim) olacak şekilde Sonics marka Vibra Cell

model ultrasonikasyon cihazı kullanılarak 40 dk. boyunca buz banyosunda nanotanecikleri dağıtma işlemi gerçekleştirilmiştir.

- Ultrasonik işlem görmüş hBN-100, manyetik karıştırıcı altında karıştırılmakta olan epoksi reçinesine damla damla ilave edilmiştir. Bu karışım, çözücünün uzaklaştırılabilmesi amacı ile 60 °C'de 24 sa. boyunca manyetik karıştırma işlemine tabi tutulmuştur. Çözücünün tamamen buharlaşmasının ardından sistem oda sıcaklığına getirilmiştir.
- Beşinci aşamada, ağırlıkça reçine/sertleştirici oranı 100/30 olacak şekilde hazırlanan nanotanecik katkılandırılmış reçine içerisine amin esaslı sertleştirici ilave edilmiş ve bu karışım mekanik karıştırıcı kullanılarak 600 rpm sabit karıştırma hızında 15 dakika süreyle homojen hale getirilmiştir.
- Altıncı aşamada, reçine karışımı içerisindeki hapsolmuş hava kabarcıklarının ortamdan uzaklaştırılabilmesi için 10 dakika süreyle vakum kabı içerisinde gaz alma işlemine tabi tutulmuştur.
- Yedinci aşamada, gaz alma işlemi tamamlanan karışım, aseton yardımıyla temizlenmiş ve yüzeylerine kalıp ayırıcı uygulanarak üretime hazır hale getirilmiş çekme numunesi üretiminde kullanılacak kalıplara mümkün olduğunca yakın mesafeden ve dikkatli bir şekilde dökülerek reçine içerisine yeniden hava kabarcığı oluşumu önlenmiştir.
- Son aşamada ise numuneler, döküm sonrası 3 saat boyunca oda sıcaklığında bekletilerek ön kürleme işlemine tabi tutulduktan sonra 80 °C'de 5 saat boyunca fırında tutulmuştur. Kürleme işlemi tamamlanan numuneler oda

sıcaklığına soğutulduktan sonra kalıptan çıkarılarak kenar fazlalıkları temizlenmiş ve testlere hazırlanmıştır.



Şekil 4.1 hBN epoksi nanokompozit üretim prosesi akış şeması

Bu sekiz aşamalı işlem sonrası, hBN-100 nanotaneciklerinin aseton, etanol ve izopropil alkol içerisinde dağıtılarak hazırlanmış üç farklı nanokompozit (EP/ASE-hBN-110, EP/ETH-hBN-110nm ve EP/IPA-hBN-110) elde edilmiştir. Ayrıca, hBN-110 nanotaneciklerinin toplam matris karışımının ağırlıkça %0.5'i olacak şekilde ve bu üç farklı çözücü içerisinde dağıtılmasıyla elde edilmiş nanokompozitler de hazırlanmıştır.

hBN-110 nanotaneciklerin polimer matris ile etkileşimini arttırmak amacı ile APTES ile fonksiyonelleştirilmiş hBN'nin (hBN-110-APTES) kullanıldığı nanokompozitin üretiminde sekiz aşamalı işlem yukarıda verildiği şekilde uygulanmıştır. EP/ASE-hBN-110-APTES nanokompoziti, hBN-110-APTES nanotaneciklerinin toplam matris karışımının ağırlıkça %0.1 ve %0.5'i olacak şekilde ve aseton içerisinde dağıtılmasıyla iki farklı bileşimde hazırlanmıştır.

Nanotanecik olarak ortalama tanecik boyutu 40 nm olan fonksiyonelleştirme uygulanmamış hBN'nin (hBN-40) kullanıldığı nanokompozitlerin üretiminde de sekiz aşamalı işlem yukarıda verildiği şekliyle aynen uygulanmıştır. EP/ETH-hBN 40 nanokompoziti, hBN-40 nanotaneciklerinin toplam matris karışımının ağırlıkça

%0.1, %0.25 ve %0.5'i olacak şekilde ve etanol içerisinde dağıtılmasıyla üç farklı bileşimde hazırlanmıştır.

Ayrıca, katkılandırma yapılmamış saf epoksi termoset malzeme herhangi bir çözücü kullanılmaksızın nanokompozit üretim işleminin beşinci aşamasından başlanarak sırasıyla yukarıda verildiği şekilde hazırlanmıştır.

Tablo 4.1'de nanokompozitlerin numune kodları ve bu kodlara ait kompozit hazırlama koşullarındaki farklılıklar ve malzeme bileşimleri verilmiştir.

Tablo 4.1 Nanokompozit bileşimleri ve numune kodları

Numune Kodu	Dağıtıcı Çözücü	hBN Boyutu (nm)	Fonksiyonelleştirme
EP	-	-	-
EP/ASE-hBN-110	Aseton	110	-
EP/ETH-hBN-110	Etanol	110	-
EP/IPA-hBN-110	İzopropil alkol	110	-
EP/ASE-hBN-110-APTES	Aseton	110	APTES
EP/ETH-hBN-40	Etanol	40	-

4.4 hBN/Epoksi Nanokompozitlerin Karakterizasyonu

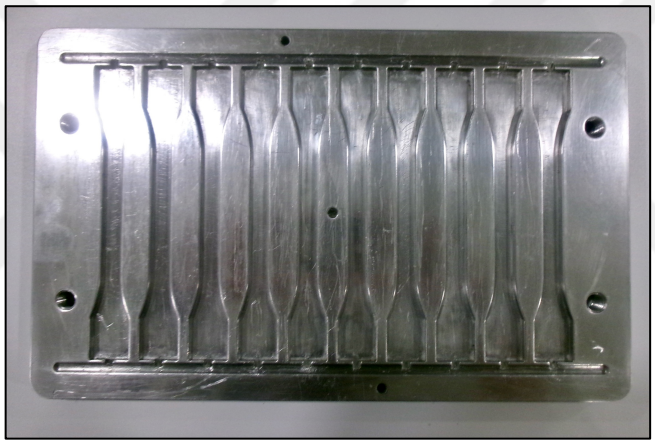
Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR) analizi, APTES ile fonksiyonelleştirilmesi öncesi ve sonrasındaki hBN nanotaneciklerinin kimyasal yapısının belirlenmesi amacıyla kullanılmıştır. FTIR analizi yüksek performanslı Thermo Fischer Scientific marka Nicolet iS50 model spektrometresi ile ATR (Attenuated Total Reflectance) modunda 600-4000 cm^{-1} dalga boyu aralığında gerçekleştirilmiştir.

Temin edilen iki farklı boyuttaki hBN nanotaneciklerinin boyutunu ve morfolojisini doğrulamak ve hazırlanan nanokompozitlerde epoksi matris içerisindeki nanotanecik dağılımını belirlemek için yüksek çözünürlüklü görüntüleme sağlayan Hitachi marka SU3900 model taramalı elektron mikroskobu (Scanning Electron Microscope, SEM) kullanılmıştır. Numuneler elektriksel iletkenliği artırmak amacıyla altın (Au) ile yaklaşık 10 nm kalınlığında kaplandıktan sonra, 5–15 kV ivmelenme voltajı aralığında SEM analizi gerçekleştirilmiştir. Nanokompozitlerin

SEM görüntüleri numunelerin çekme testi sonrası kırılma yüzeylerinden elde edilmiştir.

hBN nanotaneciklerinin epoksi matrisin ısıl davranışı üzerine etkisini belirlemek amacı ile diferansiyel taramalı kalorimetri (Differential Scanning Calorimetry, DSC) analizi uygulanmıştır. Analizler, TA Instruments marka DSC25 model cihaz ile 10 ºC/dk. ısıtma hızında 25-250ºC sıcaklık aralığında gerçekleştirilmiştir.

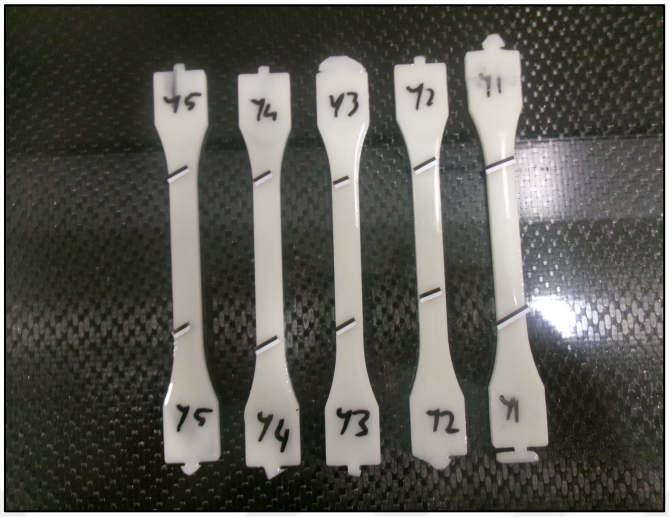
Nanokompozitlerin mekanik çekme testleri ZwickRoell marka Z250kN model mekanik test cihazı ile ISO 527-1:2019 standardına göre gerçekleştirilmiştir. Çekme testi uygulanacak numuneler, ISO 527 standardına uygun olarak ve bir metal kalıp (Şekil 4.2) kullanılarak homojen kesit alanına sahip şekilde hazırlanmıştır.



Şekil 4.2 ISO 527 çekme testi numune hazırlama kalıbı

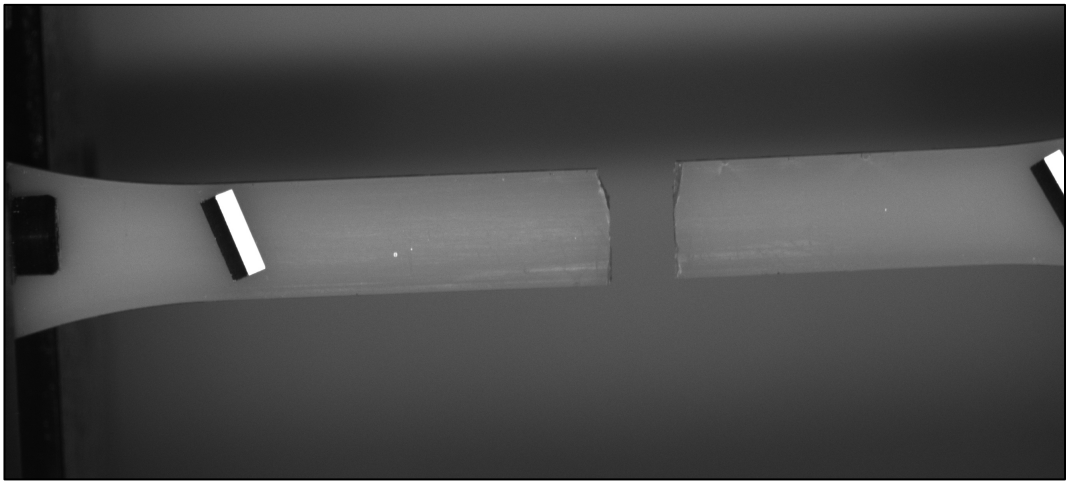
Mekanik çekme testi uygulamasında, doğru verilerin elde edilebilmesi için numunenin tutuculardan kaymaması kritik öneme sahip olduğundan numuneler oda sıcaklığındaki testler için 35 bar ve yüksek sıcaklık ortamındaki testler için 55 bar basıncında hidrolik çeneler vasıtasıyla tutturulmuştur. Ayrıca, numuneler yerleştirilirken hizalama aparatları kullanılmış ve gerinim ölçümlerinin yapıldığı videoekstasometre cihazının oluşturduğu görüntüler ile hizalanma kontrol edilmiştir. Videoekstansometre ile hassas gerinim ölçümleri gerçekleştirmek amacıyla, her test numunesine siyah-beyaz kontrast çizgiler içeren iki adet referans etiketi uygulanmıştır (Şekil 4.3). Ölçüm verileri yalnızca bu iki etiket arasındaki mesafede meydana gelen uzama dikkate alınarak elde edilmiştir. Bu yöntem sayesinde, dış etkenlerden kaynaklı kaymaların veya tutucu bölgelerin etkisinin

dışlandığı ve yalnızca malzemenin saf geriniminin ölçüldüğü garanti altına alınmıştır.



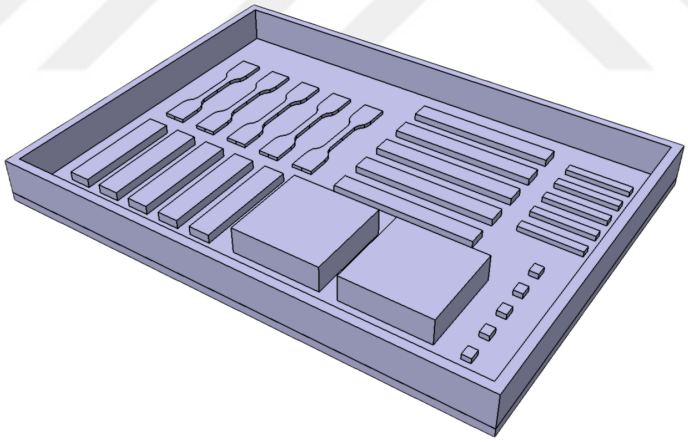
Şekil 4.3 Videoekstansometre ölçümleri için etiketlenen test numuneleri

Mekanik çekme testleri, oda sıcaklığı (~25 °C) ve yüksek sıcaklık (80 °C) olmak üzere iki farklı sıcaklık koşulunda, her bir polimerik malzeme için beşer numune kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Her bir numune tekil olarak test edilmiş olup, elde edilen çekme dayanımı ve elastisite modülü değerleri üzerinden istatistiksel değerlendirme yapılmış; aritmetik ortalama ve standart sapma değerleri hesaplanarak raporlanmıştır. Test süresince yalnızca geçerli kırılma modları dikkate alınmış; çene bölgesine yakın ya da tutucu etkisiyle oluşan geçersiz kırılmalar değerlendirme dışı bırakılmıştır. Şekil 4.4'teki gibi, yalnızca gerinimin ölçüldüğü aktif deformasyon bölgesinde kırılma meydana gelen numuneler geçerli kabul edilerek analizlere dahil edilmiştir.



Şekil 4.4 Çekme testi numunesine ait geçerli kırılma görüntüsü

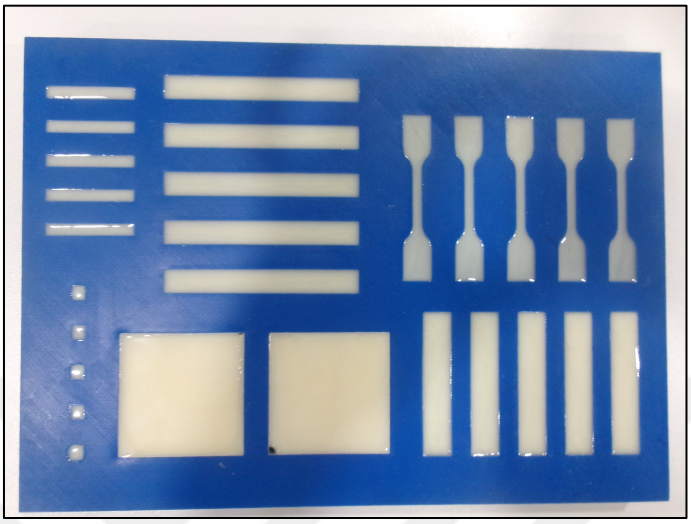
Artan malzeme tüketim miktarının deneysel süreçler üzerindeki ekonomik ve lojistik etkileri göz önünde bulundurularak, mekanik testler için daha az malzeme kullanımına olanak sağlayan kompakt boyutlarda bir kalıp tasarımı yapılması uygun görülmüştür. Bu amaç doğrultusunda; farklı mekanik özellikleri standartlarına uygun şekilde belirleyebilmek için, CATIA V5 bilgisayar destekli tasarım (CAD) yazılımı kullanılarak küçük boyutlu numunelerin eldesini sağlayacak bir kalıp modeli geliştirilmiştir (Şekil 4.5). Tasarım sürecinde; mekanik basma, eğilme ve çekme özelliklerinin tayini için sırasıyla ISO 604:2002, ISO 178:2019 ve ISO 527-1:2019 standartlarında tanımlanan numune geometrileri ve boyutları esas alınmıştır. Model üretiminde, 3 boyutlu yazıcı teknolojisinden yararlanılmış olup Zaxe Z3S model 3 boyutlu filament baskı cihazı kullanılmıştır. Baskı işleminde; yüksek darbe dayanımı ve ısıl kararlılığa sahip, uygun yüzey kalitesi gösteren ve bir mühendislik termoplastiği olan Zaxe marka ABS (akrilonitril-bütadien-stiren) filament kullanılarak, tasarlanan geometrilere uygun ve boyutsal doğruluk korunarak parça üretimi gerçekleştirilmiştir.



Şekil 4.5 Test numuneleri model tasarımı

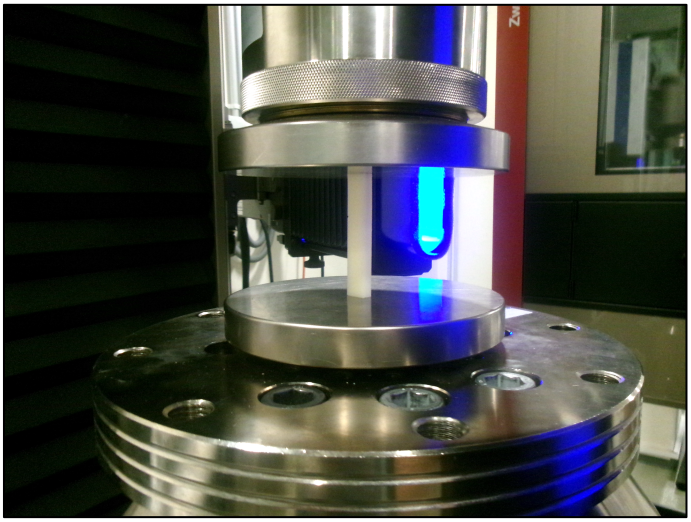
Epoksi nanokompozit numunelerin üretiminde kullanılacak kalıpların hazırlanması için, Şekil 4.5'de gösterilen önceden oluşturulmuş erkek model üzerine Airtech firmasına ait Aircast 3700 RTV silikon malzemesi kullanılarak döküm işlemi gerçekleştirilmiş ve böylece, esnek yapıya sahip bir silikon kalıp (Şekil 4.6) elde edilmiştir. Bu özel RTV (Room Temperature Vulcanizing) silikon, yüksek detay aktarımı, şekil kararlılığı ve kalıp ömrü açısından avantaj sağlamış ve 232 °C'ye kadar olan yüksek sıcaklık dayanımı sayesinde epoksi bazlı nanokompozit sistemin

kürleme işlemleri sırasında yapısal bütünlüğünü koruyarak deformasyona uğramadan güvenle kullanılabilmiştir. Ayrıca, epoksi sistemlerle kimyasal olarak reaksiyona girmeyerek kalıpların yeniden kullanılabilirliğine ve üretim sürecinin tekrarlanabilirliğine katkı sağlamıştır.

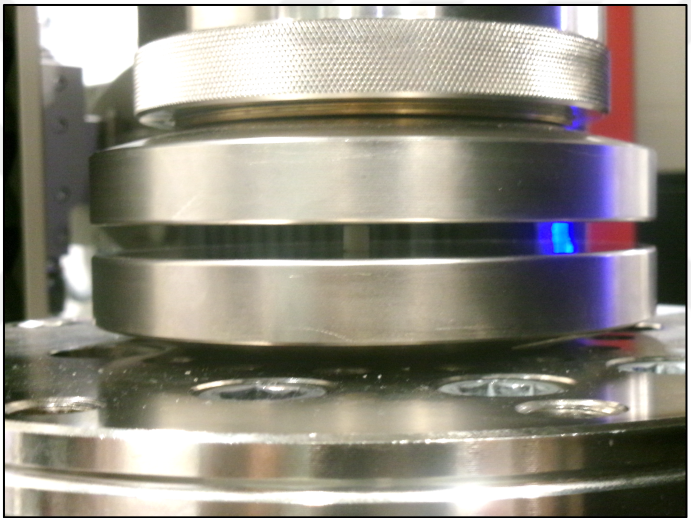


Şekil 4.6 Test numuneleri silikon kalıbı

Nanokompozitlerin mekanik basma testleri ISO 604 standardına uygun olarak gerçekleştirilmiştir. Basma deneylerinde her bir numune düzlemsel yüzeyleri test gerekliliklerine uygun şekilde hazırlanmış iki adet sertleştirilmiş çelik plaka arasına dikkatlice yerleştirildikten sonra, numuneye dik doğrultuda ve sabit 2 mm/dk. deplasman hızında yük uygulanmıştır. Standartta belirtildiği gibi; Şekil 4.7 ve 4.8'de görülen iki farklı şekilde üretilmiş numuneler kullanılarak gerçekleştirilen testler sonucunda, gerilme-gerinim eğrileri elde edilerek basma mukavemeti ve elastik modülü değerleri doğru ve hassas bir şekilde belirlenmiştir. Her bir numune tipi için beş test tekrarı yapılmış olup, elde edilen sonuçlar üzerinden ortalama değerler ve standart sapmalar hesaplanmıştır.

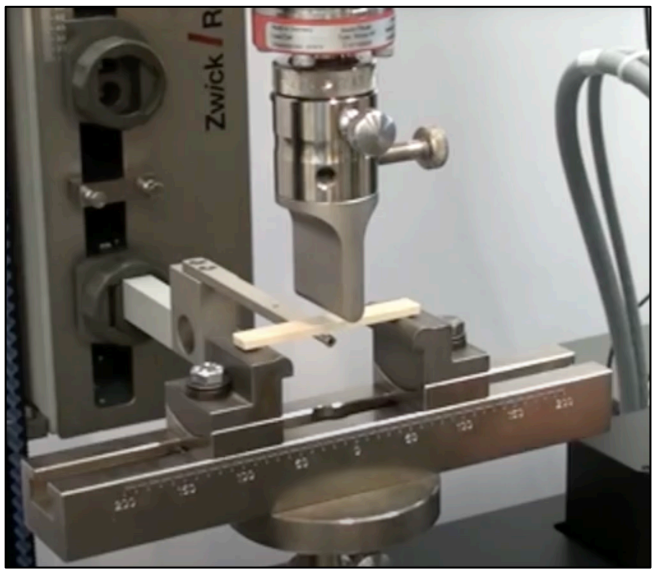


Şekil 4.7 ISO 604 basma testi modül ölçümü



Şekil 4.8 ISO 604 basma testi mukavemet ölçümü

Üç nokta eğilme testi ISO 178 standardına uygun olarak gerçekleştirilmiştir. Test numuneleri, üç nokta eğilme testi için özel olarak tasarlanmış ve Şekil 4.9'da gösterilen test fikstürüne dikkatlice yerleştirildikten sonra, numunenin ortasına, testin basma yönünde ve 2 mm/dk. sabit deplasman hızında yük uygulanmıştır. Eş zamanlı olarak, numune üzerinde meydana gelen deformasyonun hassas şekilde izlenebilmesi amacıyla, yüksek çözünürlüklü bir videoekstansometre kullanılarak gerinim verileri toplanmış ve gerilme-gerinim eğrileri elde edilerek eğilme mukavemeti ve elastik modülü değerleri belirlenmiştir.



Şekil 4.9 ISO 178 üç nokta eğilme testi

Mekanik testlerin belirlenen sıcaklık koşullarında kontrollü olarak gerçekleştirilebilmesi için ZwickRoell marka mekanik test cihazına entegre ısı kabini kullanılmıştır (Şekil 4.10).



Şekil 4.10 ZwickRoell mekanik test cihazı ısı kabini

4.5 Yapay Sinir Ağı Modelinin Geliştirilmesi

Bu tez çalışmasında geliştirilen kod altyapısı, hekzagonal bor nitrür katkılı epoksi matrisli nanokompozitlerin deneysel olarak ölçülen farklı mekanik, ısıl ve fiziksel özelliklerinin yapay sinir ağları kullanılarak yüksek doğrulukta tahmin edilmesi ve optimize edilmesi amacıyla tasarlanmıştır. Özellikle polimer matrisli nanokompozitlerde malzeme özelliklerinin; dağıtıcı çözücü türü, ortalama tanecik boyutu, yüzey fonksiyonelleştirme durumu ve hBN katkı oranı gibi çoklu

parametrelerden kompleks biçimde etkilenmesi, geleneksel deneysel yaklaşımların hem zaman hem de maliyet açısından sınırlı kalmasına neden olmuştur. Bu çalışmada uygulanan kod mimarisi, deneysel verinin azlığı, veri tiplerinin çeşitliliği ve modelin açıklanabilirliği gibi çok boyutlu zorlukları bilimsel bütünlük içinde ele alacak şekilde tasarlanmıştır.

Çalışmada, Python ekosisteminin veri işleme ve makine öğrenmesi alanında en çok tercih edilen kütüphaneleri kullanılmıştır. NumPy, bilimsel hesaplama ve çok boyutlu dizi işlemleri için temel fonksiyonlar sunmaktadır. Pandas, veri işleme ve analizi için tablo tabanlı yapılar ile esnek veri manipülasyonu sağlamaktadır. Matplotlib ise veri görselleştirme ve istatistiksel grafikler üretmek amacıyla kullanılmış, eğitim ve doğrulama süreçlerinin akademik olarak sunulmasına olanak tanımıştır. TensorFlow ve Keras, derin öğrenme modellerinin tanımlanması, eğitimi ve değerlendirilmesi için modern ve yaygın bir altyapı sunmakta olup; Keras ise yapay sinir ağlarının daha hızlı prototiplenmesine olanak tanımıştır. Keras Tuner ise Keras tabanlı modellerin hiperparametre optimizasyonu için kullanılmış, farklı optimizasyon stratejileri (Random Search, Bayesian Optimization vb.) ile en uygun mimari ve parametrelerin belirlenmesini sağlamıştır. Scikit-learn, veri ön işleme, model seçimi ve değerlendirme gibi makine öğrenmesi aşamalarında çapraz doğrulama, ölçeklendirme ve hata analizi gibi kritik fonksiyonlar sunmaktadır. Son olarak SHAP (Shapley Additive Explanations), makine öğrenmesi modellerinin açıklanabilirliği ve karar süreçlerinin şeffaflaştırılması için kullanılmıştır.

Kodun önemli bir özelliği, model mimarisinin ve hiperparametrelerinin otomatik olarak optimize edilmesidir. Modelleme sürecinde, veriler ilk olarak deneysel veri tabanı dosyasından okunmakta ve otomatik olarak girdiler (input) ve çıktılar (output) şeklinde ayrılmaktadır. Girdi sütunları, malzeme sentezinde doğrudan rol oynayan ve model çıktısı üzerinde etkili olabilecek deneysel parametreleri kapsamaktadır: dağıtıcı çözücü türleri (Aseton, Etanol, İzopropil alkol), hBN tanecik boyutları (40 nm, 110 nm), yüzey fonksiyonelleştirme ajanı (APTES) ve katkı oranı (ağırlıkça % hBN). Çıktı sütunları ise, deneysel olarak ölçülmüş olan çekme modülü, eğme modülü, camsı geçiş sıcaklığı gibi çeşitli ısıl ve mekanik özelliklerdir. Burada kritik bir nokta olarak, her bir çıktı özelliği için bağımsız bir YSA modeli oluşturulmakta ve eğitilmektedir. Her çıktı için girdiler ve model mimarisi optimize edilerek, çıktının kendine özgü veri dağılımına ve öğrenme

ihtiyaçlarına göre en uygun model otomatik olarak seçilmektedir. Bu yaklaşım, farklı malzeme özelliklerinin birbirinden farklı girdilere ve yapısal faktörlere duyarlılığı nedeniyle, model doğruluğunu ve genellenebilirliğini artırmıştır.

Veri işleme aşamasında, ham verilerin model eğitimi sürecinde aşırı etkili veya önemsiz hale gelmemesi için tüm veri sütunları Min-Max ölçekleme yöntemi ile [0,1] aralığına normalize edilmiştir. Bu normalizasyon sayesinde, farklı birimlere ve dağılımlara sahip girdiler model eğitimi sırasında adil şekilde ağırlık kazanmıştır. Eğitim, doğrulama ve test veri setleri ise, %64 eğitim, %16 doğrulama ve %20 test oranında, sabit bir rastgelelik ile ayrılmıştır; bu, hem modelin genelleme başarısını test etmek için hem de tekrarlanabilir sonuçlar elde edebilmek için zorunlu bir adımdır. Yeterli gözleme sahip olmayan özellikler (20'den az veri içerenler), modelin istatistiksel geçerliliğini ve güvenilirliğini tehlikeye atmamak için otomatik olarak analiz dışı bırakılmıştır.

Modelin ana eğitim aşaması, hiperparametre optimizasyonuna dayanmaktadır. Hiperparametreler, modelin yapısını ve öğrenme davranışını belirleyen ve model eğitimi başlamadan önce kullanıcı tarafından belirlenen sabit ayarlardır. Bunlar arasında, ağın karmaşıklığını doğrudan etkileyen katman sayısı (gizli katman adedi) ve her katmandaki nöron sayısı (her bir ara katmanda yer alan işlem birimi sayısı) yer almaktadır. Ayrıca, sinir ağındaki nöronların çıktısına doğrusal olmayan özellik kazandıran aktivasyon fonksiyonları (örneğin, relu, tanh, elu ve swish gibi matematiksel dönüşümler), eğitim sırasında bazı nöronların rastgele devre dışı bırakılmasını sağlayarak modelin genellenebilirliğini artıran dropout oranları, eğitimde aktivasyonların istatistiksel olarak normalize edilmesini sağlayan batch normalization (küme normalizasyonu) kullanımı ve aşırı öğrenmeyi (overfitting) önlemek amacıyla uygulanan regularizasyon tipi ile gücü (L1, L2 veya her ikisinin birleşimi olan L1_L2 ceza yöntemleri) bulunmaktadır. Modelin öğrenme sürecindeki adım büyüklüğünü belirleyen öğrenme hızı, ağırlık güncellemelerini kontrol eden optimizer (örneğin Adam veya RMSprop algoritmaları), bir seferde modele sunulan veri örneği adedini ifade eden batch boyutu ve tüm eğitim verisinin modele kaç kez gösterileceğini belirten epoch sayısı da hiperparametreler arasındadır. Kodda bu parametrelerin geniş aralıkları tanımlanmış ve "RandomSearch" (rastgele arama) yöntemiyle bu aralıklarda onlarca, hatta gerekirse yüzlerce farklı kombinasyon denenmiştir. Bu parametre aralıklarının ve

denenen yapıların ayrıntılı biçimde raporlanması, modelin hangi koşullar altında eğitildiğinin bilimsel olarak şeffaf ve tekrarlanabilir olmasını sağlamaktadır. Ayrıca, her bir çıktı özelliği için en uygun model mimarisi ve hiperparametreler ayrı ayrı optimize edilmiş ve raporlanmıştır (Tablo 4.2). Böylece çekme modülü ile camsı geçiş sıcaklığı gibi farklı özellikler için, veri setinin ihtiyaçlarına uygun özelleşmiş modeller elde edilmiştir.

Model eğitimi tamamlandığında, modelin başarısı yalnızca eğitim ve test setlerinde elde edilen klasik hata metrikleriyle (örneğin, ortalama mutlak hata, ortalama kare hata ve belirleme katsayısı gibi) sınırlı kalmaksızın, aynı zamanda çapraz doğrulama (K-Fold Cross Validation) yöntemiyle de kapsamlı bir biçimde değerlendirilmiştir. Bu yöntemde, veri seti rastgele ve eşit büyüklükte birkaç alt kümeye ayrılmakta; her bir alt küme sırasıyla bir kez doğrulama, kalanlar ise eğitim amacıyla kullanılmaktadır. Böylece model, veri setinin farklı alt bölümleri üzerinde bağımsız olarak test edilmekte ve modelin genellenebilirliği, yani farklı ve daha önce görmediği veri kümeleri üzerindeki başarısı analiz edilmektedir. Her bir kat için hesaplanan performans metriklerinin ortalaması ve standart sapması alınarak, modelin farklı veri alt kümelerinde gösterdiği performans tutarlılığı ve kararlılığı objektif biçimde ölçülmüştür. Bu yaklaşım sayesinde, özellikle küçük veya dengesiz veri setlerinde modelin aşırı öğrenme (overfitting) eğilimi gösterip göstermediği güvenilir şekilde tespit edilmiş, modelin pratik uygulamalardaki geçerliliği bilimsel standartlara uygun olarak test edilmiştir.

Tablo 4.2 Hiperparametre özellikleri

Hiperparametre	Tür	Aralık	Açıklama
num_hidden_layers	Tam sayı (int)	[1, 5]	Gizli katman sayısı
hidden_i_units	Tam sayı (int)	[4, 32]	Her gizli katmandaki nöron sayısı (i: katman numarası)
hidden_i_activation	Seçim (str)	relu / tanh / elu	Gizli katman aktivasyon fonksiyonu
hidden_i_regularization	Mantıksal (bool)	True / False	Gizli katmanlarda regularization kullanımı
hidden_i_reg_type	Seçim (str)	l1 / l2 / elastic_net	Gizli katman regularization türü
hidden_i_reg_strength	Ondalıklı (float)	1e-7 - 1e-1 (log)	Gizli katman regularization katsayısı
hidden_i_l1_ratio	Ondalıklı (float)	[0.1, 0.9]	ElasticNet için L1 oranı
hidden_i_batch_norm	Mantıksal (bool)	True / False	Gizli katmanlarda Batch Normalization
hidden_i_dropout	Mantıksal (bool)	True / False	Gizli katmanlarda Dropout uygulaması
hidden_i_dropout_rate	Ondalıklı (float)	[0.1, 0.6]	Gizli katman Dropout oranı
optimizer	Seçim (str)	adam / rmsprop	Optimizasyon algoritması
learning_rate	Ondalıklı (float)	1e-6 - 1e-1 (log)	Öğrenme oranı
adam_beta_1	Ondalıklı (float)	[0.8, 0.95]	Adam optimizer için beta1
adam_beta_2	Ondalıklı (float)	[0.9, 0.999]	Adam optimizer için beta2
rmsprop_rho	Ondalıklı (float)	[0.8, 0.95]	RMSprop için rho değeri
batch_size	Seçim (int)	[2, 64]	Batch (mini yığın) boyutu
epochs	Tam sayı (int)	[60, 300]	Toplam eğitim turu (epoch)
early_stopping_patience	Tam sayı (int)	[10, 30]	Early stopping sabrı
lr_reduce_factor	Ondalıklı (float)	[0.3, 0.7]	Öğrenme oranı azaltma faktörü
lr_reduce_patience	Tam sayı (int)	[3, 10]	Öğrenme oranı azaltma sabrı

Modelin tahmin mekanizmasının bilimsel olarak anlaşılabilir ve şeffaf hale getirilmesi amacıyla, açıklanabilirlik temelli bir yöntem olan SHAP (Shapley Additive Explanations) analizi uygulanmıştır. SHAP yöntemi, modelin her bir giriş değişkeninin nihai çıktı üzerindeki etkisini hem nicel hem de görsel olarak detaylı

biçimde ortaya koymakta; böylece, her bir girdinin modele yaptığı katkının büyüklüğünü ve etkisinin yönünü kapsamlı şekilde analiz etmeye olanak tanımaktadır. Kod kapsamında elde edilen SHAP özet grafikleri ve bar grafikleri aracılığıyla, modelde kullanılan değişkenlerin malzeme özellikleri üzerindeki görece ağırlıkları açıkça gösterilmiş ve böylece derin öğrenme tabanlı modelin "kara kutu" niteliği önemli ölçüde aşılmıştır. Buna ek olarak, klasik özellik önemlilik analizleri de gerçekleştirilmiş ve her bir giriş parametresinin model başarısına olan katkısı kantitatif olarak değerlendirilmiştir. Bu bütüncül yaklaşım sayesinde, modelin yalnızca yüksek doğrulukta tahminler üretmesi değil, aynı zamanda karar süreçlerinin de bilimsel olarak izlenebilir ve gerekçelendirilebilir olması sağlanmıştır.

Tüm bu süreçlerin sonunda, model mimarileri, hiperparametre aralıkları, eğitim ve test performans metrikleri, adaptif eğitim adımları ve açıklanabilirlik analizleri gibi tüm çıktılar detaylı şekilde tablo ve grafikler halinde verilmiştir.

5
BULGULAR VE TARTIŞMA

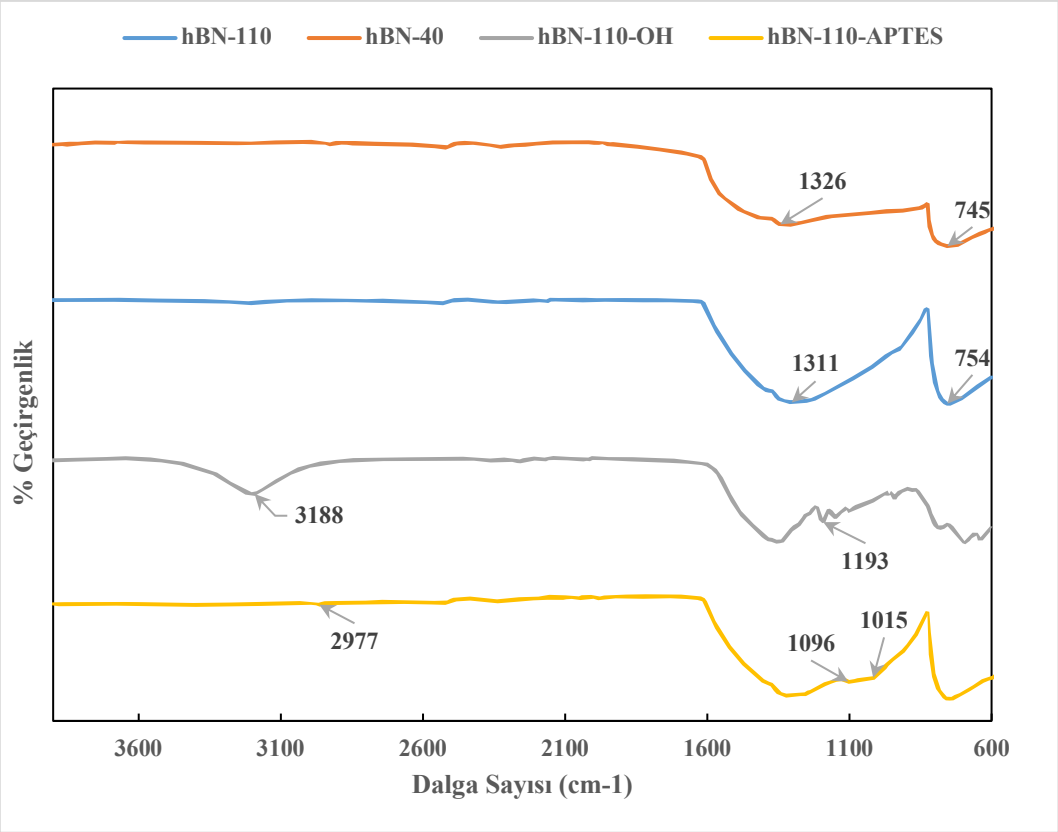
Bu tez çalışmasında, hBN ile katkılandırılmış epoksi matrisli nanokompozitlerin özellikleri üzerine nanotaneciklerin dağıtıldığı çözücü türünün, hBN tanecik boyutunun ve matris içerisindeki hBN oranının etkisi incelenmiştir. Bu kapsamda, ortalama tanecik boyutu 110 ve 40 nm olan iki tür hBN farklı oranlarda kullanılmıştır. Bunun yansıra, 110 nm boyutundaki hBN'nin matris içerisindeki dağılımına etkisini belirlemek amacıyla hBN-110'un aseton, etanol ve izopropil alkol olmak üzere farklı çözücüde dağıtıldığı nanokompozitler hazırlanmıştır. Yine hBN-110 nanotaneciklerinin polimer matris ile ara yüzey etkileşimini artırabilmek için tanecik yüzeylerinin APTES ile fonksiyonelleştirildiği hBN-110-APTES nanotanecikleri hazırlanmış ve epoksi nanokompozit üretiminde kullanılmıştır. Bu farklı koşul ve bileşimlerin hBN/epoksi nanokompozitlerin morfolojik, ısıl ve mekanik özellikleri üzerine etkisi ayrıntılı olarak incelenmiştir.

DSC ve mekanik analizlerden elde edilen deneysel veriler kullanılarak model eğitimi için bir veri seti oluşturulmuş ve bu veri seti ile yapay sinir ağı (YSA) tabanlı bir makine öğrenmesi modeli eğitilmiştir. Model aracılığıyla, üretim parametrelerine bağlı olarak nanokompozitlerin mekanik ve ısıl özelliklerinin tahmini gerçekleştirilmiştir.

5.1 FTIR Analizi

Şekil 5.1 hBN-110 ve hBN-40 nanotaneciklerinin, hBN-110'nun APTES ile fonksiyonelleştirilmesi sırasında elde edilen ara ürün olan hidroksillenmiş yapının (hBN-110-OH) ve nihai ürün hBN-110-APTES fonksiyonlu yapısının FTIR spektrumlarını göstermektedir. Herhangi bir fonksiyonelleştirme işlemine tabi tutulmamış hBN-110 spektrumunda ortaya çıkan 1311 cm^{-1} merkezli geniş band hekzagonal bor nitrür kristal yapısında yer alan düzlem içi B–N gerilme titreşimlerine karşılık gelmektedir. hBN yapısı için bu karakteristik titreşim bandı hBN-40 numunesinin FTIR spektrumunda ise 1326 cm^{-1}'de görülmüştür. Bu titreşim bandı, bor ve azot atomları arasında oluşan sp^2 hibritleşmiş kovalent bağların karakteristik bir göstergesi olup her iki numunenin de yapısal olarak hekzagonal bor nitrür formunda olduğunu doğrulamaktadır. hBN-110 ve hBN-40

için sırasıyla 754 ve 745 cm^{-1}'de gözlenen absorpsiyon bantları düzlem dışı B–N–B bükülme titreşimlerine karşılık gelmekte olup hBN'nin tabakalı ve üç boyutlu örgüsel yapısını desteklemektedir [158]. Farklı tanecik boyutuna sahip iki hBN örneği için de elde edilen bu karakteristik titreşim bantları, her iki nanotaneciğin farklı üreticilere ait olmalarına rağmen aynı kimyasal yapıya sahip olduklarını göstermiştir. Piklerin tepe noktası değerlerinde belirlenen küçük farklılıklar ise üretim süreçleri, tanecik boyutu, kristallik derecesi ve numune hazırlama koşulları gibi değişkenlere bağlı olarak ortaya çıkabilmektedir [159].



Şekil 5.1 hBN nanotaneciklerinin FTIR spektrumları

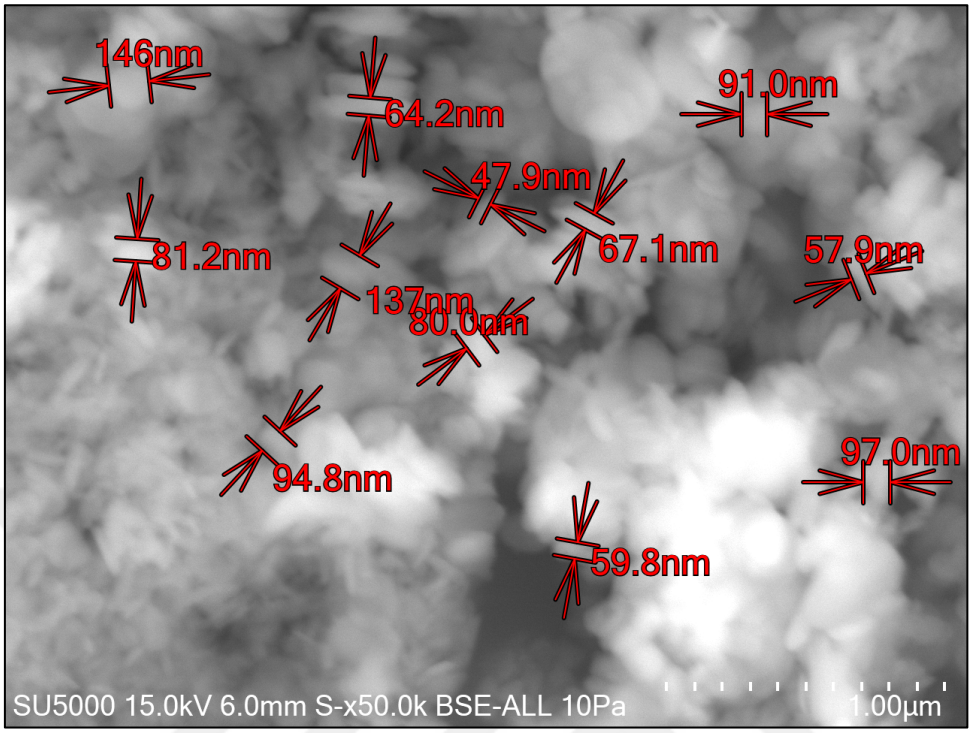
hBN-110 nanotaneciklerinin APTES ile fonksiyonelleştirme işleminin ilk aşamasında elde edilen hidroksillenmiş yapının (hBN-110-OH) FTIR spektrumu işlem görmemiş saf hBN-110 spektrumu ile karşılaştırıldığında; hidroksilasyon işlemi sonrasında 3188 cm^{-1} merkezli geniş ve belirgin absorpsiyon bandı ortaya çıkmıştır. Bu band, B–OH gruplarına ait O-H gerilme titreşimlerine karşılık gelmektedir [160]. Ayrıca, 1250-850 cm^{-1} bölgesinde bir değişim gözlenmiştir. Bu bölgede tespit edilen yeni, zayıf bandlar B-O gerilme ve bükülme titreşimlerine aittir [161]. Bununla birlikte, hidroksilasyon sonrası hBN'ye ait karakteristik

bandların şiddetlerinde, tepe noktası değerlerinde ve genişliklerinde de belirgin bir değişim görülmüştür. Tespit edilen bu değişimler, hBN yüzeyine –OH gruplarının kimyasal olarak bağlandığını ve hidroksilasyon işleminin etkili bir şekilde gerçekleştiğini güçlü biçimde kanıtlamaktadır [50]. İkinci aşamada hBN-110-OH yapısının APTES ile fonksiyonelleştirilmesinden sonra, 3188 cm^{-1}'deki O-H gerilme titreşim bandı kaybolmuştur. 2977 cm^{-1}'de ortaya çıkan zayıf ancak tanımlanabilir absorpsiyon bandı APTES'in propil zincirinde bulunan metilen (–CH_2–) gruplarının C-H gerilme titreşimlerine karşılık gelmektedir [162]. 1270-1070 cm^{-1} bölgesindeki zayıf bandlar kaybolup 1100-900 cm^{-1} bölgesinde 1096 cm^{-1} ve 1015 cm^{-1}'de zayıf tepe noktalarına sahip yeni, geniş bir bandın ortaya çıktığı tespit edilmiştir. Bu değişim, yapıya APTES bağlanması sonucu muhtemel Si–O–Si ve Si–O–B gerilme titreşim bandlarının varlığına atfedilebilir [163]. hBN-110-APTES spektrumunda gözlenen bu değişimler, APTES'in hBN-110-OH taneciklerinin yüzeyine -OH grupları üzerinden kovalent bağ ile bağlandığını ve başarılı bir silanizasyon reaksiyonunun gerçekleştiğini doğrulamaktadır [164].

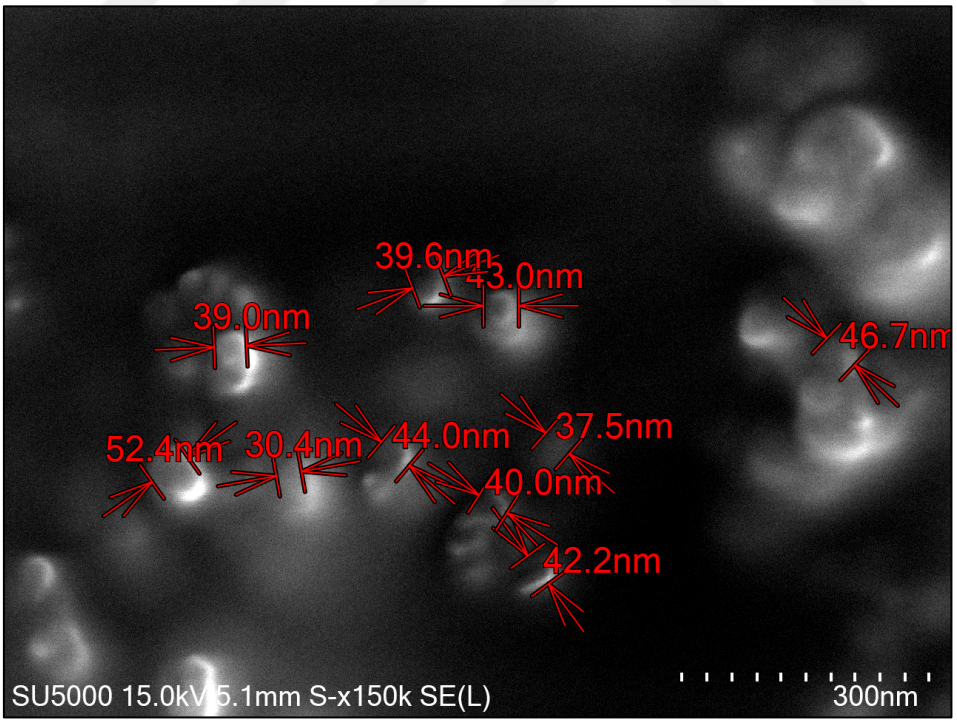
5.2 SEM Analizi

Şekil 5.2 ve Şekil 5.3 kuru ve toz halindeki hBN-110 ve hBN-40 nanotaneciklerinin SEM görüntülerini göstermektedir. Her iki hBN türü için de kuru halde taneciklerin aglomere olduğu tespit edilmiştir. hBN-110 taneciklerinin 50-150 nm aralığında görece daha geniş bir tanecik boyutu dağılımına sahip olduğu görülürken hBN-40 30-55 nm aralığında çok daha dar bir tanecik boyutu dağılımındadır. Her iki hBN örneğinde de tanecikler yassı plakalar şeklinde olup düzgün yüzey yapısı ve belirgin kenar geometrileri sergilemektedirler. hBN-110 ve hBN-40 için tespit edilen bu

morfolojik özellikler literatürde hBN'ye atfedilen tipik yapısal karakteristikler ile uyumludur [165].



Şekil 5.2 hBN-110 taneciklerinin SEM görüntüsü (x50000)

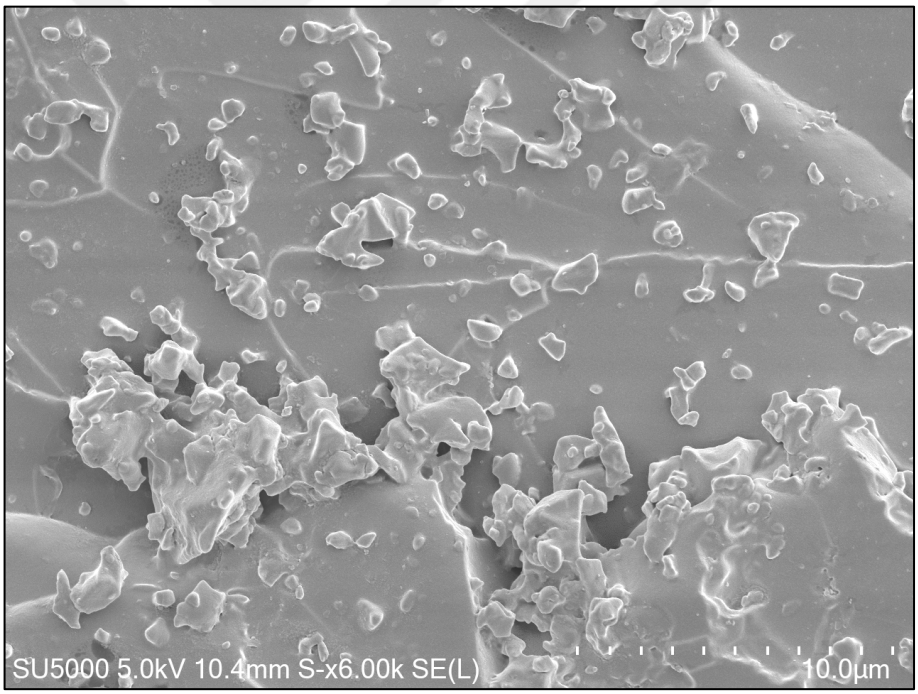


Şekil 5.3 hBN-40 taneciklerinin SEM görüntüsü (x150000)

Şekil 5.4-5.6'da hBN-110, hBN-40 ve hBN-110-APTES taneciklerinin farklı oranda katkılandırılması ile hazırlanan epoksi nanokompozitlerin SEM görüntüleri verilmiştir. SEM görüntüleri, hBN'nin matris içerisindeki dağılımı, tanecik

morfolojisi, tanecik boyutu ve aglomerasyon yoğunluğu gibi mikroyapısal parametrelerin detaylı analizini ve mikroyapı ile mekanik özellikler arasında ilişki kurabilmeyi mümkün kılmaktadır. Homojen ve iyi dağılmış tanecikler, yük transferinin verimli gerçekleşmesini sağlayarak nanokompozitin mekanik ve ısıl özelliklerini iyileştirirken; kümelenmeler gerilim birikimine neden olmakta ve yapının özellikle eğilme ve çekme dayanımı üzerinde olumsuz etki yaratmaktadır [166].

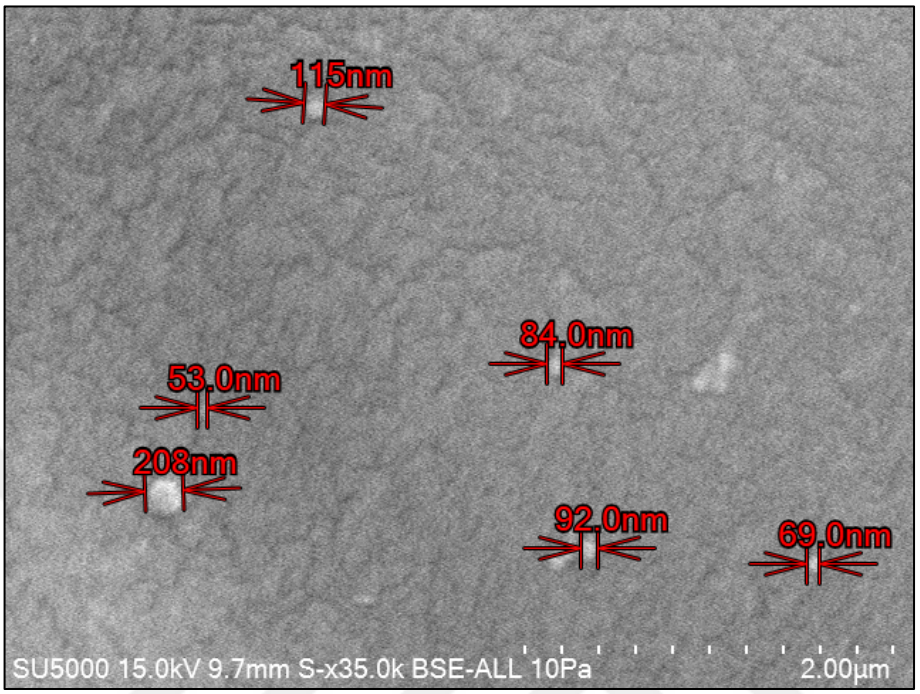
Şekil 5.4'deki ağırlıkça %0.5 oranında hBN-110 katkılandırılmış epoksi nanokompozitin SEM görüntüsü incelendiğinde, taneciklerin matris içinde homojen dağılmadığı, taneciklerin aglomerasyona uğradığı ve yer yer büyük tanecik kümelerinin varlığı tespit edilmiştir. Bu durum, fiziksel karıştırma ile sağlanan dağılımın yetersizliğine ve matris ile tanecikler arasındaki zayıf ara yüzey etkileşimlerine işaret etmektedir [167].



Şekil 5.4 %0.5-hBN-110/Epoksi nanokompozit SEM görüntüsü (x6000)

Ağırlıkça %0.1 oranında hBN-110-APTES ile katkılandırılmış epoksi nanokompozitin SEM görüntüsü Şekil 5.5'te verilmiştir. Düşük oranda fonksiyonelleştirilmiş hBN-110 kullanımında aglomere tanecik kümelerinin oluşmadığı ve irili ufaklı küçük taneciklerin matris içinde gelişigüzel dağıldığı görülmüştür. Yüzeyi modifiye edilmemiş taneciklerin epoksi ile yeterli kimyasal bağ oluşturamaması sonucu mikroyapısal sürekliliği ve performans kazanımını

sınırlandırmasına karşın, Şekil 5.5'deki görüntü yüzey fonksiyonelleştirme işleminin tanecik-matris etkileşimlerini güçlendirerek daha kararlı bir dağılım sağlamada etkili bir yaklaşım olduğu sonucunu desteklemektedir [168].

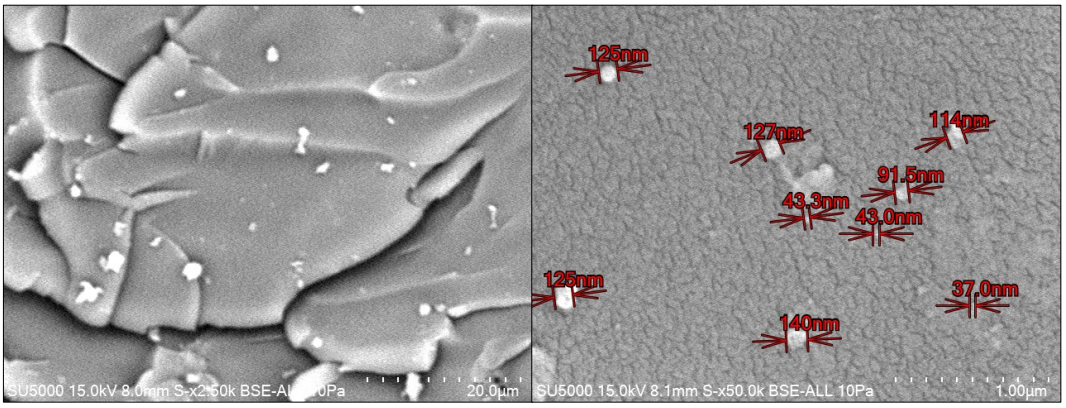


Şekil 5.5 %0.1-hBN-110-APTES/Epoksi nanokompoziti SEM görüntüsü (x35000)

Ayrıca, katkılandırılan tanecik boyutunun küçülmesiyle yüzey alanı/hacim oranı artmakta ve böylece ara yüzey etkileşimleri daha etkin hale gelmektedir. Hem matris içinde tanecik dağılımının homojenliğini arttırması hem de nihai kompozit özelliklerini olumlu yönde etkilemesinden dolayı daha küçük boyutlu nanotaneciklerin kullanımı tercih edilmektedir [169]. Şekil 5.6 Ağırlıkça %0.1 oranında hBN-40 ile katkılandırılmış epoksi nanokompozitin SEM görüntülerini göstermektedir. Genel olarak 2-3 taneciğin bir araya gelmesiyle oluşan taneciklerin matris içerisinde görece homojen dağıldığı bir kompozit yapının oluştuğu tespit edilmiştir.

Sonuç olarak; gerçekleştirilen SEM analizi, kullanılan farklı türdeki hBN nanotaneciklerinin morfolojik uygunluğunu ve epoksi matrisi içindeki dağılım davranışlarını detaylı olarak ortaya koymuştur. Elde edilen bulgular, yüzey kimyası

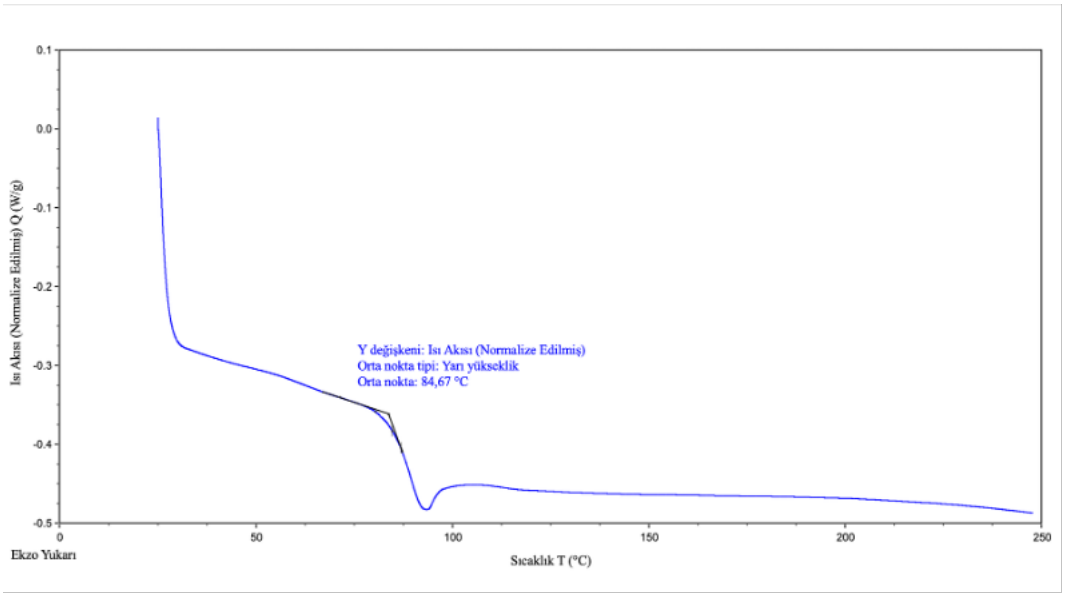
ve tanecik boyutu kontrolünün nanokompozitlerin morfolojisini etkileyen kritik parametreler olduğunu göstermiştir.



Şekil 5.6 %0.1-hBN-40/Epoksi nanokompozitinin (x2500) ve (x50000)'deki SEM görüntüleri

5.3 DSC Analizi

Katkılandırılmamış saf epoksi ve farklı türde ve oranda hBN ile katkılandırılmış epoksi matrisli nanokompozitlerin camsı geçiş sıcaklıkları (T_g) 25-250ºC sıcaklık aralığında ve 10ºC/dk. ısıtma hızı ile gerçekleştirilen DSC analizi ile tayin edilmiştir. Şekil 5.7, hBN nanotanecik katkısı olmaksızın amin esaslı bir sertleştirici ile kürleştirilmiş saf epoksi termoset malzemesinin (EP) DSC termogramını göstermektedir. EP'nin T_g değeri 84.67 ºC olarak bulunmuştur. hBN-110, hBN-40 ve hBN-110-APTES nanotaneciklerinin çeşitli oranlarda katkılandırılması ile elde edilen nanokompozitlerin T_g değerleri karşılaştırıldığında ise nanotanecik türü ve miktarının bu değer üzerinde önemli bir rol oynadığı belirlenmiştir. Şekil 5.8, hBN türü ve miktarı ile EP nanokompozitlerinin camsı geçiş sıcaklıkları arasındaki ilişkiyi göstermektedir.



Şekil 5.7 Katkılandırılmamış saf epoksi DSC termogramı

hBN-40 nanotaneciğinin üç farklı ağırlıkça oranda katkılandırılması ile elde edilen nanokompozitlerin T_g değerleri incelendiğinde, ağırlıkça %0.1 gibi düşük katkı oranında hBN-40'ın epoksi matrisin T_g değerini önemli derecede arttığı görülmüştür. Bu numune için T_g değeri 89.25 °C olarak ölçülmüştür. Bu artış, nanotaneciklerin epoksi matris içerisinde homojen şekilde dağılması ve yüksek yüzey alanı sayesinde polimer zincirleri ile güçlü arayüzey etkileşimleri oluşturması ile ilişkilendirilmektedir. Polimer zincirlerinin nanotanecik yüzeyine adsorbe olması, zincir hareketliliğini sınırlayarak camsı geçişin daha yüksek sıcaklıklarda gerçekleşmesine neden olmaktadır. Bu katkı düzeyinde, zincir hareketliliğindeki kısıtlamalar ve serbest hacimdeki azalma T_g artışını destekleyen başlıca mekanizmalar arasında yer almaktadır. Buna göre; arayüzeyde oluşan "hareketsizleşmiş" polimer tabakasının, T_g artışının temel kaynağı olduğu söylenebilir [170].

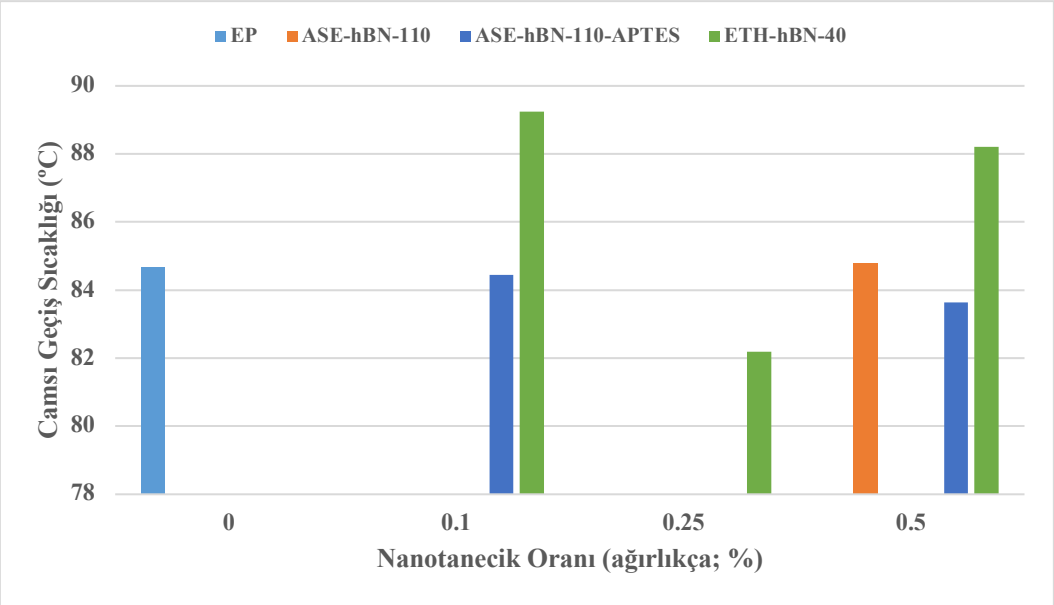
Matris içerisinde hBN-40 ağırlıkça oranının %0.25 olması EP'nin T_g değerinde belirgin bir azalmaya neden olmuştur. Bu durum, artan katkı miktarı ile birlikte nanotaneciklerin aglomerasyon eğiliminin artması ve matriste homojen dağılımın zorlaşmasından kaynaklanmaktadır [171]. Aglomerasyon sonucunda oluşan mikroyapısal düzensizlikler nanotaneciklerin etkin yüzey alanını azaltarak arayüzey etkileşimlerini zayıflatmaktadır. Bu durumda tanecik-tanecik etkileşimleri polimer-tanecik etkileşimlerine baskın hale gelmekte ve polimerce yetersiz ıslatılmış aglomerat yüzeylerinde serbest hacimler oluşmaktadır. Polimer

zincirleri yoğun tanecik kümelerine penetrasyon sağlayamadığından çapraz bağlanma verimi de düşmektedir. Bu koşullar altında polimer zincirlerinin hareketliliğinin artması T_g'de azalmaya neden olmaktadır [172].

Ağırlıkça %0.50 gibi daha yüksek katkı oranlarında hBN-40'ın kullanılması ile T_g değerinde yeniden bir artış gözlenmiştir. Kompozit sistem perkolasyon eşiğini aşarak nanotanecikler birbirleri ile sürekli bir ağ yapısı meydana getirmekte ve polimer zincirleri bu ağ yapısındaki tanecikler arasında fiziksel olarak sıkışmaktadır. Mekânsal kısıtlama baskın etki haline gelmekte ve sürekli takviye ağı yapısal sertlik sağlamaktadır. Bu durumda polimer zincirleri nanotanecik ağı tarafından fiziksel olarak hapsedilmekte ve hareket kabiliyetleri sınırlanmaktadır. Bu durum, sadece fiziksel olarak nanotaneciklerle temas eden zincirleri değil, aynı zamanda sistemdeki serbest zincirleri de etkileyerek camsı geçişin yeniden daha yüksek sıcaklıklarda gerçekleşmesine neden olmaktadır. Bu durum, nano boyuttaki arayüzey etkileşimlerinin mikro ölçekli yapısal ağ oluşumlarına evrildiği bir geçiş süreci olarak değerlendirilmektedir [173].

Diğer taraftan, APTES ile yüzeyi fonksiyonelleştirilmiş ve herhangi bir fonksiyonelleştirme yapılmamış ortalama tanecik boyutu 110 nm olan hBN'nin ağırlıkça %0.5 oranında katkılandırılması ile elde edilen nanokompozitlerin T_g değerinde aynı oranda hBN-40 içeren nanokompozit ile kıyaslandığında önemli bir düşüş meydana gelmiştir. Ayrıca, düşük oranda hBN-110-APTES kullanıldığında da anlamlı bir artış gözlenmemiştir. APTES matris ile arayüz etkileşimini iyileştirme potansiyeline sahip olsa da daha büyük tanecik boyutunun düşük özgül yüzey alanı nedeniyle bu etkileşim yeterince gerçekleşememiştir. Bu nedenle, fonksiyonel grupların epoksi zincirleri ile etkili bağlanma olasılığı sınırlı kalmış, dolayısıyla T_g üzerinde kayda değer bir iyileşme sağlanamamıştır. Bu durum, yüzey fonksiyonelleştirmenin etkili olabilmesi için nanotanecik boyutunun kritik bir parametre olduğunu göstermektedir [174].

Sonuç olarak; DSC analizi, epoksi termoset malzemesinin T_g değerindeki değişimlerin hBN nanotaneciklerinin ortalama boyutu ve miktarından önemli derecede etkilenirken yüzey fonksiyonelleştirme, matris içinde tanecik dağılımı davranışı, muhtemel çözücü kalıntısı ve kürlenme davranışında değişim gibi çoklu etkenlerin de göz önüne bulundurulması gerektiğini ortaya koymuştur.



Şekil 5.8 Nanokompozitlerin camsı geçiş sıcaklığı değerleri

5.4 Mekanik Çekme Testi

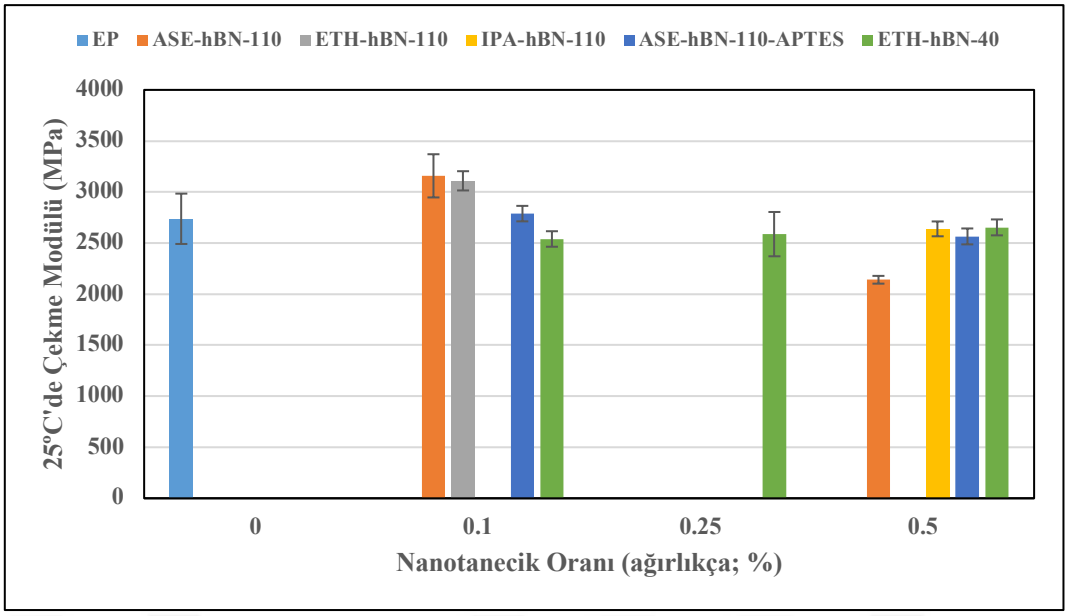
Şekil 5.9 ve Şekil 5.10 sırasıyla olarak epoksi matrisli nanokompozitlerin 25°C'deki çekme testi elastik modül ve mukavemet değerlerinin hBN nanotaneciklerinin tanecik boyutu ve miktarına, yüzeyinin fonksiyonelleştirmesine ve dağıtıldığı çözücü türüne bağlı olarak değişimini göstermektedir. 25°C'de gerçekleştirilen mekanik çekme testinde, saf epoksi termoset numunenin elastik modülü 2737.60 MPa bulunmuştur. hBN-110 nanotaneciklerinin asetonda dağıtılarak ağırlıkça %0.1 oranında katkılandırılması ile elde edilen nanokompozit (EP/ASE-hBN-110) için 3158.30 MPa ile en yüksek çekme modülü değerine ulaşılmış ve saf epoksiye kıyasla %15.4'lük bir artış meydana gelmiştir. Aynı orandaki hBN-110'un etanolde dağıtılmasıyla hazırlanan nanokompozit (EP/ETH-hBN-110) 3109.34 MPa çekme modülü değeri göstermiş ve saf epoksiye göre %13.6'lık bir artış sağlamıştır.

hBN-40 nanotaneciklerinin etanolde dağıtılmasıyla hazırlanan nanokompozitlerin çekme modülü değerleri nanotanecik konsantrasyonundan ve dağıtılan çözücü türünden bağımsız olarak hBN-110 nanotanecikleri içeren nanokompozitlerin ve katkısız saf epoksi malzemenin çekme modülü değerlerinin altında kalmıştır. Bu düşüş özellikle düşük nanotanecik katkılandırılmasında belirgin bir şekilde gözlenirken konsantrasyon arttıkça modül değeri hafifçe artmış ve ağırlıkça %0.5 gibi daha yüksek nanotanecik konsantrasyonunda ise hemen hemen tüm nanokompozitlerin çekme modülü değerleri birbirine yakın değerlerde bulunmuştur. 2140 MPa ile en düşük çekme modülü değeri matris içinde aglomere

taneciklerin büyük kümeler halinde bulunduğu (Şekil 5.7) EP/ASE-hBn-110 nanokompoziti için gözlenmiştir.

Ağırlıkça %0.1 ve %0.5 oranında asetonda dağıtılarak hazırlanan hBN-110-APTES/EP nanokompozitlerinin çekme modülü değerleri aynı çözücüde dağıtılarak hazırlanmış fonksiyonelleştirme yapılmamış hBN-110 nanotaneciklerinin kullanıldığı kompozitlerin değerleri ile kıyaslandığında; düşük konsantrasyonda daha düşük çekme modülü değeri elde edilirken yüksek konsantrasyonda APTES fonksiyonalitesi modül değerini arttırmıştır. Bu durum, yüzey fonksiyonlandırmanın optimize edilmesi gerektiğini ve her uygulama için spesifik fonksiyonelleştirme stratejilerinin geliştirilmesi gerektiğini ortaya koymaktadır[174].

Şekil 5.9'daki grafikten de görüldüğü üzere, kullanılan hBN'nin ortalama tanecik boyutunun, konsantrasyonunun, yüzey fonksiyonelleştirmesinin ve kompozit hazırlamada dağıtıldığı çözücü türünün EP termoset malzemesinin çekme modülü üzerinde önemli bir rol oynadığı ve bu parametrelerdeki değişime bağlı olarak modülün çeşitli değerler aldığı görülmüştür. Daha iyi nanotanecik dağılımının ve daha yüksek T_g değerlerinin gözlendiği nanokompozitler de dahi daha düşük bir çekme modülü değeri tespit edilmiştir. Bu sonuçlar, tanecik boyutu ve konsantrasyonu ile polimer-tanecik etkileşim mekanizmalarının karmaşık bir ilişki içinde olduğunu ve optimum performans için iyi bir tanecik dağılımı ve ara yüzey etkileşimlerinin yanı sıra yük transfer etkinliğinin sağlanabilmesinin kritik öneme sahip olduğunu göstermektedir [175], [176].

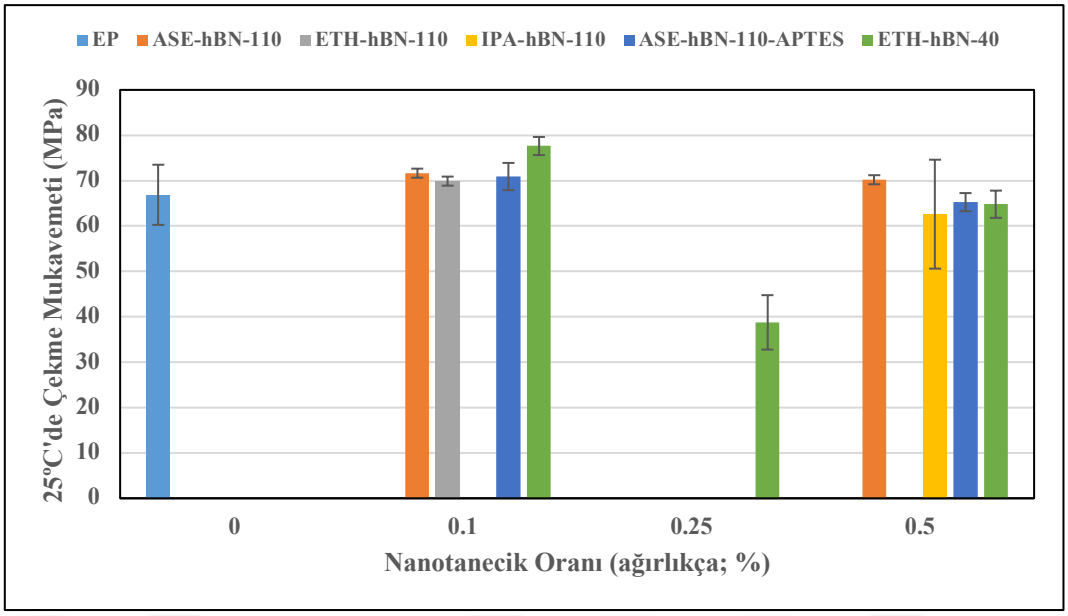


Şekil 5.9 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C'de çekme modülü değerleri

Çekme testlerinde, tanecik boyutunun mukavemet üzerindeki etkisi çekme modülünden farklı bir davranış sergilemiştir. 25°C'de saf epoksi numunenin 66.88 MPa çekme mukavemeti göstermesine karşın, EP/ETH-hBN 40nm kompozitinin ağırlıkça %0.1 oranında 77.63 MPa ile en yüksek değeri sergilemesi, küçük tanecik boyutunun mukavemet açısından kritik avantaj sağladığını ortaya koymaktadır (Şekil 5.10). Bu %16.1'lik artış, nano boyuttaki taneciklerin yüksek yüzey alanı sayesinde matris ile daha etkin etkileşim kurabildiğini ve çatlak yayılımını daha etkili şekilde engelleyebildiğini göstermektedir [177].

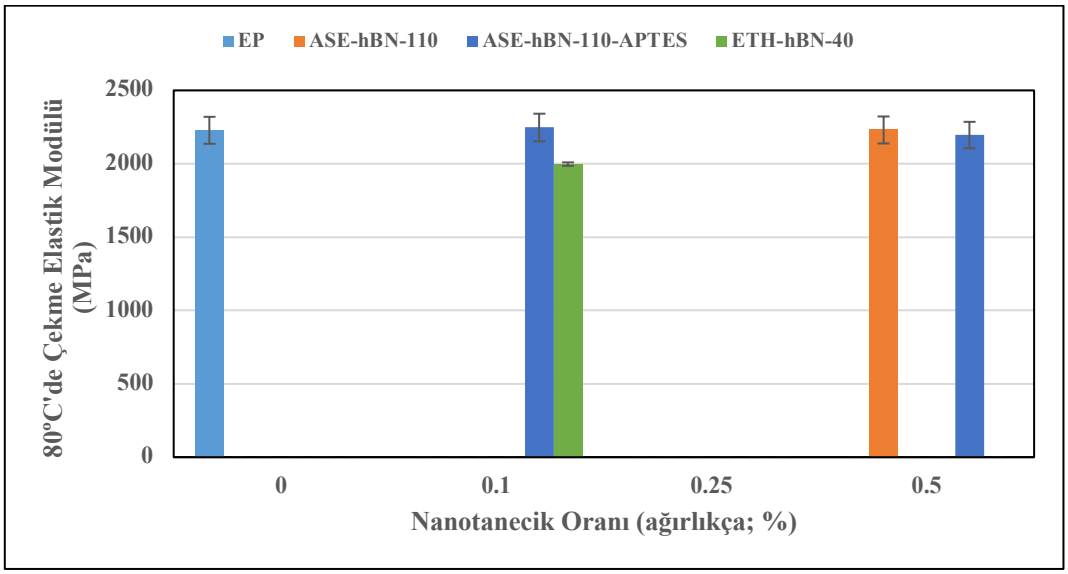
110nm boyutundaki hBN taneciklerinin çekme mukavemeti üzerindeki etkisi daha sınırlı kalmış, EP/ASE-hBN 110nm kompozitinin ağırlıkça %0.1 oranında 71.64 MPa değerini sergilemesi, tanecik boyutu küçüldükçe mukavemet artışının daha belirgin hale geldiğini doğrulamaktadır. APTES ile yüzey fonksiyonelleştirilmiş EP/ASE-hBN 110nm-APTES kompozitinin 70.91 MPa değeri göstermesi, yüzey fonksiyonlandırmanın çekme mukavemeti açısından sınırlı katkı sağladığını ortaya koymaktadır.

Konsantrasyon artışının çekme mukavemeti üzerindeki dramatik olumsuz etkisi, özellikle EP/ETH-hBN 40nm kompozitinin ağırlıkça %0.25 oranında 38.76 MPa'ya düşmesi ile net şekilde görülmektedir. Bu %42'lik düşüş, artan nanokompozit konsantrasyonuyla oluşan aglomerasyonların gerilme konsantrasyonu yaratarak çatlak başlangıç noktaları oluşturduğunu ve böylece mukavemeti ciddi şekilde azalttığını göstermektedir [178].



Şekil 5.10 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C çekme mukavemeti değerleri

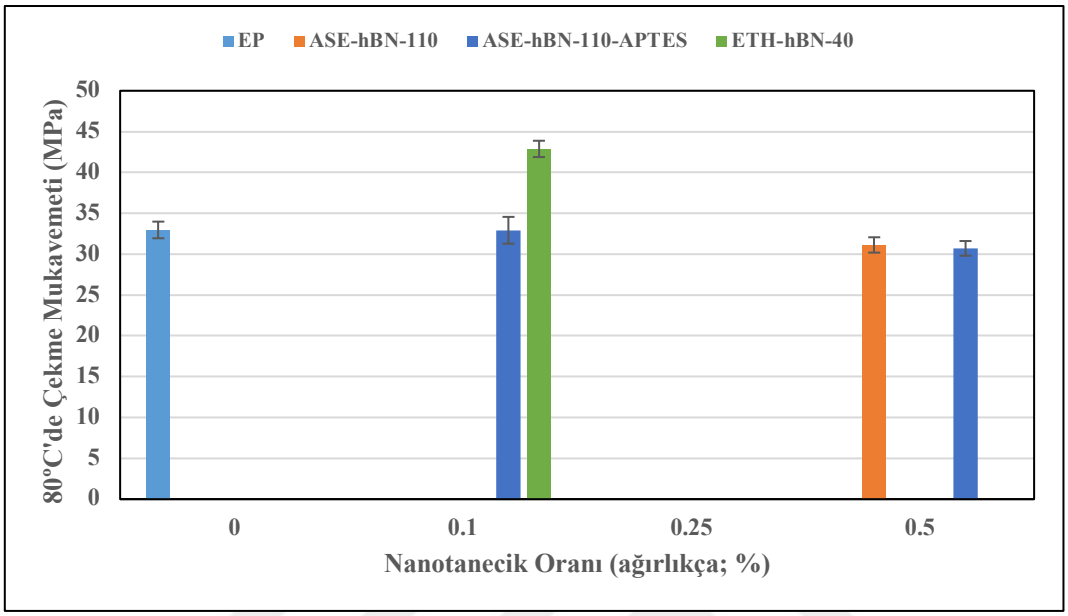
80°C'de gerçekleştirilen çekme testleri, yüksek sıcaklık koşullarında çekme modülü özelliklerinde dramatik düşüşler olduğunu ortaya koymuştur (Şekil 5.11). Saf epoksi numunenin çekme modülünün 2737.60 MPa'dan 2228.01 MPa'ya düşmesi (%18.6 azalma), epoksi matrisin cam geçiş sıcaklığına yaklaşması nedeniyle polimer zincir hareketliliğinin artması ve bunun sonucunda rijitlik kaybı yaşanması ile açıklanabilir. Nanokompozitlerin benzer oranlarda düşüş göstermesi, yüksek sıcaklıkta matris özelliklerinin baskın hale geldiğini göstermektedir.



Şekil 5.11 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 80°C çekme modülü değerleri

Çekme mukavemetindeki sıcaklık etkisi daha dramatik olmuş, saf epoksi 66.88 MPa'dan 32.96 MPa'ya düşerken, EP/ETH-hBN 40nm kompoziti 42.88 MPa

değerini korumuştur (Şekil 5.12). Bu sonuç, hBN nanotaneciklerinin yüksek sıcaklık koşullarında bile belirli ölçüde ısıl kararlılık sağladığını göstermektedir. hBN'nin yüksek ısıl iletkenliği ve ısıl kararlılığı, kompozitin yüksek sıcaklık performansına olumlu katkı sağlamaktadır [89].

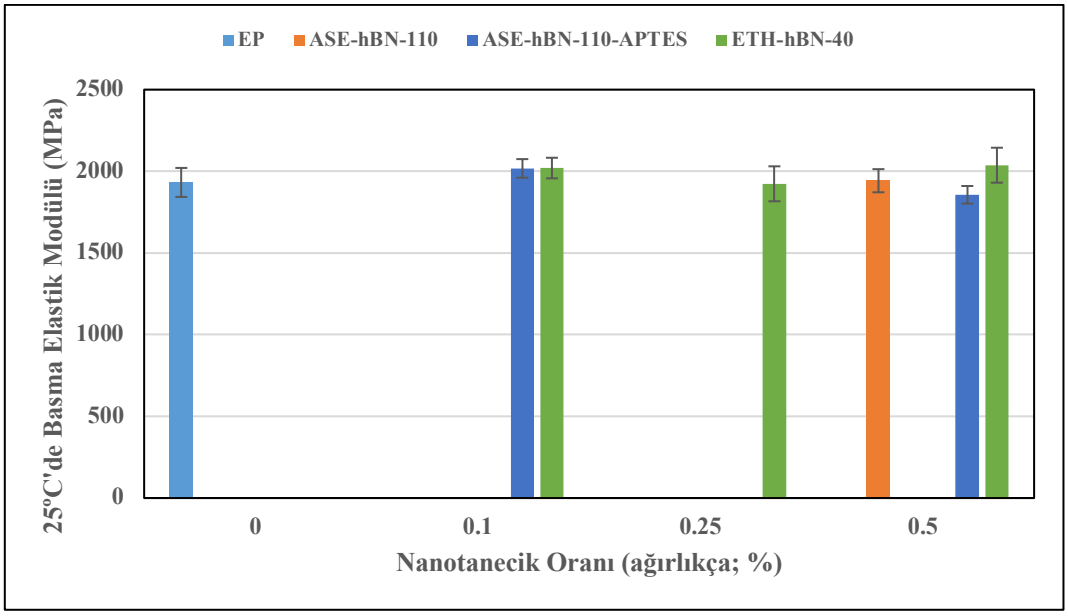


Şekil 5.12 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 80°C çekme mukavemeti değerleri

5.5 Mekanik Basma Testi

Basma testlerinde, nanokompozitlerin basma modülü değerlerinin hBN nanotaneciklerinin tanecik boyutu, konsantrasyonu, yüzey fonksiyonelleştirme durumu ve dağıtıldığı çözücü türüne bağlı olarak değişim gösterdiği belirlenmiştir (Şekil 5.13). 25°C'de gerçekleştirilen basma testinde, saf epoksi termoset numunenin basma modülü 1932 MPa olarak ölçülmüştür. hBN-40 nanotaneciklerinin etanol içerisinde ağırlıkça %0.1 oranında dağıtılmasıyla elde edilen nanokompozitin (EP/ETH-hBN 40nm) basma modülü değeri 2020 MPa'ya yükselmiş olup, saf epoksiye göre artış göstermiştir. Bu durum, küçük tanecik boyutunun basma yüklemeleri altında kompozit rijitliğini artırıcı etkiye sahip olduğunu göstermektedir. Benzer şekilde, yüzey fonksiyonelleştirilmiş 110 nm boyutundaki hBN'nin asetonda dağıtılarak hazırlandığı EP/ASE-hBN 110nm-APTES nanokompozitinin 2018 MPa basma modülü göstermesi, APTES yüzey fonksiyonelleştirmesinin düşük %hBN katkı oranında basma modülüne olumlu katkı sağladığını ortaya koymaktadır.

Yüksek konsantrasyonlarda elde edilen sonuçlar, basma modülü açısından tanecik konsantrasyonu artışının çekme modülüne göre daha az olumsuz etki yarattığını göstermiştir. Ağırlıkça %0.5 oranında hazırlanan EP/ETH-hBN 40nm nanokompozitinin 2038 MPa basma modülü göstermesi, yüksek konsantrasyonlardaki aglomerasyon oluşumunun basma yüklemeleri sırasında çekme yüklemelerine kıyasla daha az kritik olduğunu işaret etmektedir. Bu durum, basma yüklemelerinde aglomere olmuş taneciklerin de belirli bir oranda yük taşıma kapasitesine katkıda bulunabildiğini ortaya koymaktadır [179].

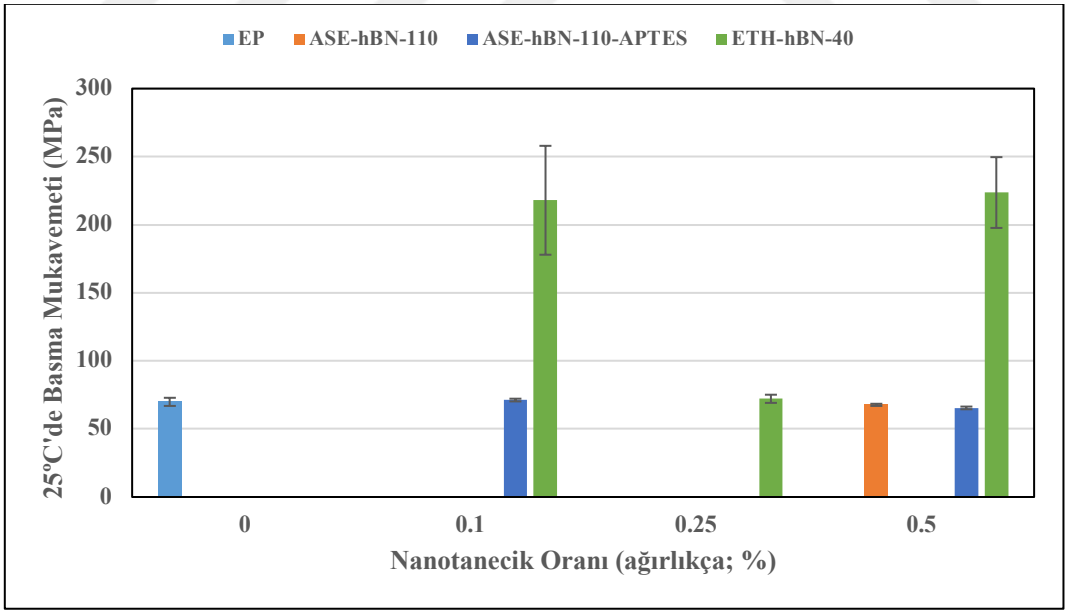


Şekil 5.13 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C basma modülü değerleri

Epoksi matrisli nanokompozitlerin basma mukavemeti değerlerinin hBN nanotaneciklerinin tanecik boyutu, konsantrasyonu ve dağıtıldığı çözücü türüne bağlı olarak belirgin şekilde arttığı gözlenmiştir (Şekil 5.14). 25°C'de gerçekleştirilen basma testinde, saf epoksi termoset numunenin basma mukavemeti 70 MPa olarak ölçülmüştür. hBN-40 nanotaneciklerinin etanol içerisinde dağıtılarak ağırlıkça %0.1 ve %0.5 oranlarında hazırlanan nanokompozitlerin (EP/ETH-hBN 40nm) basma mukavemetleri sırasıyla 218 MPa ve 224 MPa değerlerine ulaşarak saf epoksiye göre yaklaşık %212-220 gibi dramatik bir artış sağlamıştır. Bu sonuçlar, özellikle sıkıştırma yükleri altında hBN nanotaneciklerinin epoksi matris üzerindeki performans arttırıcı etkisinin çok daha belirgin olduğunu ortaya koymaktadır. hBN nanotaneciklerinin kristal yapısının ve tabakalı geometrisinin sıkıştırma yüklemeleri açısından ideal özellikler sunması, basma mukavemetindeki bu dramatik artışın temel sebebi olarak değerlendirilebilir.

hBN'nin sahip olduğu hekzagonal tabakalı yapı, sıkıştırma yükleri altında tabakalar arası kayma direncini artırarak kompozitin basma mukavemetini önemli ölçüde iyileştirmektedir. Bu yapıyı oluşturan tabakaların Van der Waals kuvvetleriyle birbirine bağlanmış olması, uygulanan yük altında etkin bir yük dağılımı sağlayarak matris içerisinde güçlendirici bir etki yaratmaktadır. Ayrıca tanecik boyutunun küçülmesiyle birlikte, yüksek yüzey alanına sahip taneciklerin matris ile daha geniş bir temas yüzeyi oluşturduğu ve böylece mukavemet artışının daha da belirgin hale geldiği anlaşılmaktadır [180].

Basma yüklemeleri altında konsantrasyon artışının etkisi, çekme testlerine göre daha olumlu sonuçlar vermiştir. Özellikle ağırlıkça %0.5 gibi daha yüksek konsantrasyonda daha yüksek basma mukavemet değerinin elde edilmesi, daha fazla taneciğin sıkıştırma yüklemelerinde yük taşıma kapasitesine olumlu katkıda bulunduğunu göstermektedir. Bu durum, yüksek konsantrasyonlarda taneciklerin birbirleriyle temas ederek sürekli bir yük transfer ağı oluşturduğu perkolasyon etkisinin gerçekleştiğini düşündürmektedir [181]. Böylece, hBN nanotaneciklerinin sıkıştırma yükleri altındaki davranışının, çekme yüklerine kıyasla daha avantajlı olduğu ortaya konulmaktadır.



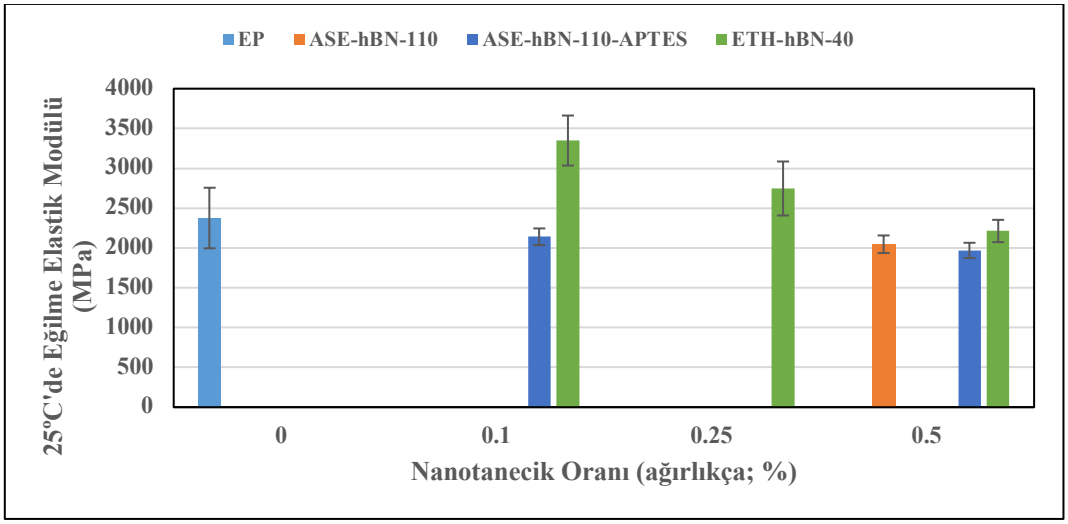
Şekil 5.14 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C basma mukavemeti değerleri

5.6 Mekanik Eğilme Testi

Eğilme modülü testleri, epoksi matrisli nanokompozitlerin karma yükleme altındaki rijitlik davranışlarının, hBN nanotaneciklerinin morfolojik ve kimyasal

özelliklerine duyarlı olduğunu ortaya koymuştur (Şekil 5.15). Özellikle tanecik boyutu, katkı oranı ve yüzey fonksiyonelleştirme durumu gibi parametrelerin, malzemenin eğilme modülüne etkisi belirgin şekilde gözlemlenmiştir. 25°C'de yapılan eğilme testinde, saf epoksi termoset numunenin eğilme modülü 2375.85 MPa olarak ölçülmüştür. hBN-40 nanotaneciklerinin etanol içerisinde dağıtılarak ağırlıkça %0.1 oranında katkılandırılmasıyla hazırlanan nanokompozitin (EP/ETH-hBN 40nm) eğilme modülü değeri ise 3348 MPa'ya yükselmiş olup, saf epoksiye kıyasla %40.9'luk dikkate değer bir artış sağlamıştır. Bu sonuç, küçük tanecik boyutunun eğilme yüklemeleri altında, çekme ve basma bileşenlerini içeren karma yükleme koşullarında üstün rijitlik sağladığını ve hBN nanotaneciklerinin etkin biçimde performans gösterdiğini ortaya koymaktadır.

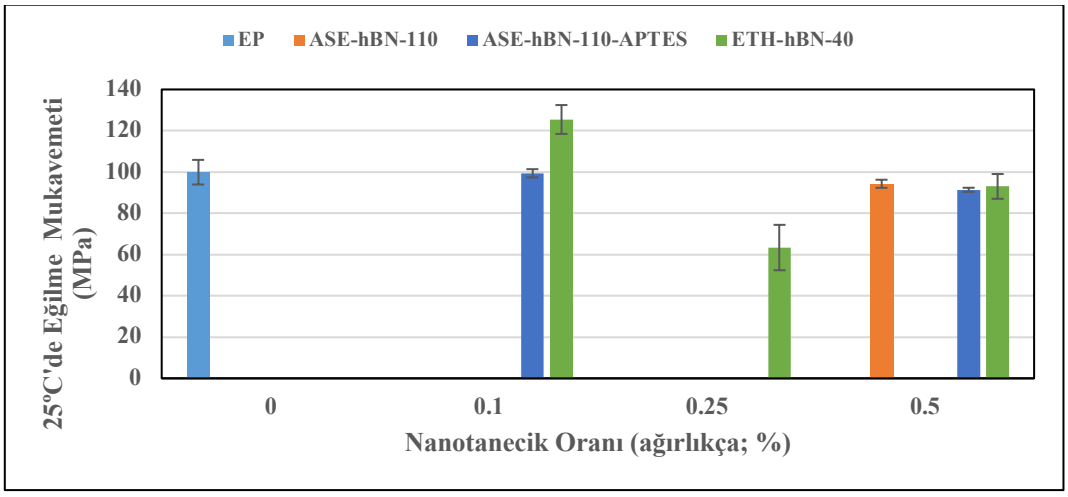
Eğilme modülü üzerinde konsantrasyon artışının etkisi incelendiğinde, ağırlıkça %0.25 oranındaki EP/ETH-hBN 40nm kompozitinin modül değerinin 2746.47 MPa'ya düşmesiyle, tanecik konsantrasyonunun eğilme modülü üzerindeki etkisinin çekme testlerindeki davranışa benzer şekilde olduğu belirlenmiştir. Bu durum, eğilme yüklemelerindeki çekme bileşeninin tanecik aglomerasyonuna karşı duyarlı olduğunu ve oluşan aglomerelerin yük dağılım homojenliğini olumsuz yönde etkilediğini ortaya koymaktadır. Ayrıca, APTES ile yüzey fonksiyonelleştirilmiş EP/ASE-hBN 110nm-APTES nanokompozitinin ağırlıkça %0.1 oranında 2140.13 MPa değerini sergilemesi, yüzey fonksiyonelleştirmenin eğilme modülü açısından sınırlı katkı sağladığını ve yüzey fonksiyonlandırma stratejisinin eğilme yüklemeleri için optimize edilmesi gerektiğini göstermektedir.



Şekil 5.15 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C eğilme testi elastik modül değerleri

Eğilme mukavemeti testlerinde elde edilen sonuçlar, hBN nanotaneciklerinin çatlak yayılımını engelleme potansiyelini ortaya koymuştur (Şekil 5.16). 25°C'de gerçekleştirilen testte, hBN-40 nanotaneciklerinin etanol içerisinde dağıtılarak ağırlıkça %0.1 oranında katkılandığı EP/ETH-hBN 40nm nanokompozitinin 126 MPa eğilme mukavemeti sergilemesi, saf epoksiye kıyasla %26.1'lik bir artışa karşılık gelmektedir. Bu artış, nano boyuttaki hBN taneciklerinin çatlak uçlarında meydana gelen gerilme konsantrasyonlarını düşürerek çatlak yayılımına karşı direnç oluşturduğunu ve bu sayede eğilme yükleri altında kompozitin daha sünek bir davranış sergilediğini göstermektedir.

Tanecik konsantrasyonunun artırılmasının eğilme mukavemeti üzerindeki etkisi ise oldukça değişken bir profil ortaya koymuştur. Ağırlıkça %0.25 oranında katkı ile hazırlanan aynı nanokompozitin 63 MPa gibi düşük bir değere gerilemesi, bu konsantrasyonda oluşan tanecik aglomerasyonlarının çatlak başlangıç noktaları oluşturduğunu ve mukavemeti olumsuz yönde etkilediğini göstermektedir. Bununla birlikte, ağırlıkça %0.5 katkı oranında mukavemet değerinin 93MPa'ya yükselmesi, daha yüksek konsantrasyonlarda bazı alternatif güçlendirme mekanizmalarının (örneğin perkolasyon etkisi veya tabakalar arası yük transferinin artması) devreye girdiğini düşündürmektedir [50]. Bu sonuçlar, eğilme mukavemeti gibi karma yüklemeye maruz kalan özelliklerde optimum katkı oranının dikkatle belirlenmesi gerektiğini ve mikro yapı ile mekanik performans arasında güçlü bir etkileşim bulunduğunu ortaya koymaktadır.



Şekil 5.16 hBN/Epoksi nanokompozitlerin 25°C eğilme testi mukavemet değerleri

Farklı çözücü sistemlerinin kompozit performansı üzerindeki etkisi, etanol sisteminin sürekli olarak üstün sonuçlar vermesi ile belirginleşmiştir. EP/ETH-hBN

kompozitlerinin genel olarak EP/ASE-hBN ve EP/IPA-hBN kompozitlerinden daha iyi performans sergilemesi, etanol ortamında hBN taneciklerinin daha homojen dağılım gösterdiğini düşündürmektedir. Etanol'ün orta polarite değeri ve hBN yüzeyine olan afinitesi, tanecik-çözücü etkileşimini optimize ederek aglomerasyonu minimize etmektedir [51].

5.7 Gerçekleştirilen Deneylerin Parametre Matrisindeki Yeri

Çalışma parametreleri ve parametre sayıları kullanılarak tam faktöriyel bir deney planlanmasında toplam 900 test numunesinin kullanılması gerekli olduğu sonucuna varılmıştır. Tablo 5.1'de kullanılan parametre ve parametre sayılarını göstermektedir.

Tablo 5.1 Deneysel parametreler ve parametre sayıları

Parametre	Değerler	Parametre Sayıları
hBN Oranı (ağırlıkça, %)	0.1, 0.25, 0.5	3
Çözücü Türü	ASE, ETH, IPA	3
Fonksiyonelleştirme	APTES, Yok	2
Tanecik Boyutu (nm)	40, 110	2
Her Numune için Test Türü	5 farklı mekanik/termal test	5
Her Test için Tekrar Sayısı	5 tekrar	5

Tablo 5.2'de, toplam 152 test numunesi ile tam faktöriyel deney matrisinin yaklaşık %17'sini kapsayan testlere ait malzeme kombinasyonları verilmiştir.

Tablo 5.2 Malzeme test matrisi

	Ağırlıkça Katkı Oranı			
Açıklama	**0**	**0.1**	**0.25**	**0.5**
EP				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	✓	-	-	-
Çekme Testi @80°C	✓	-	-	-
Çekme Testi @25°C	✓	-	-	-
Eğme Testi @25°C	✓	-	-	-
Basma Testi @25°C	✓	-	-	-
ASE-hBN-110				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	-	-	-	✓
Çekme Testi @80°C	-	-	-	✓
Çekme Testi @25°C	-	✓	-	✓
Eğme Testi @25°C	-	-	-	✓
Basma Testi @25°C	-	-	-	✓
ASE-hBN-110-APTES				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	-	✓	-	✓
Çekme Testi @80°C	-	✓	-	✓
Çekme Testi @25°C	-	✓	-	✓
Eğme Testi @25°C	-	✓	-	✓
Basma Testi @25°C	-	✓	-	✓
ETH-hBN-110				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	-	-	-	-
Çekme Testi @80°C	-	-	-	-
Çekme Testi @25°C	-	✓	-	-
Eğme Testi @25°C	-	-	-	-
Basma Testi @25°C	-	-	-	-
IPA-hBN-110				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	-	-	-	-
Çekme Testi @80°C	-	-	-	-
Çekme Testi @25°C	-	-	-	✓
Eğme Testi @25°C	-	-	-	-
Basma Testi @25°C	-	-	-	-
ETH-hBN-40				
Camsı Geçiş Sıcaklığı	-	✓	✓	✓
Çekme Testi @80°C	-	✓	-	-
Çekme Testi @25°C	-	✓	✓	✓
Eğme Testi @25°C	-	✓	✓	✓
Basma Testi @25°C	-	✓	✓	✓

5.8 Model Performansı

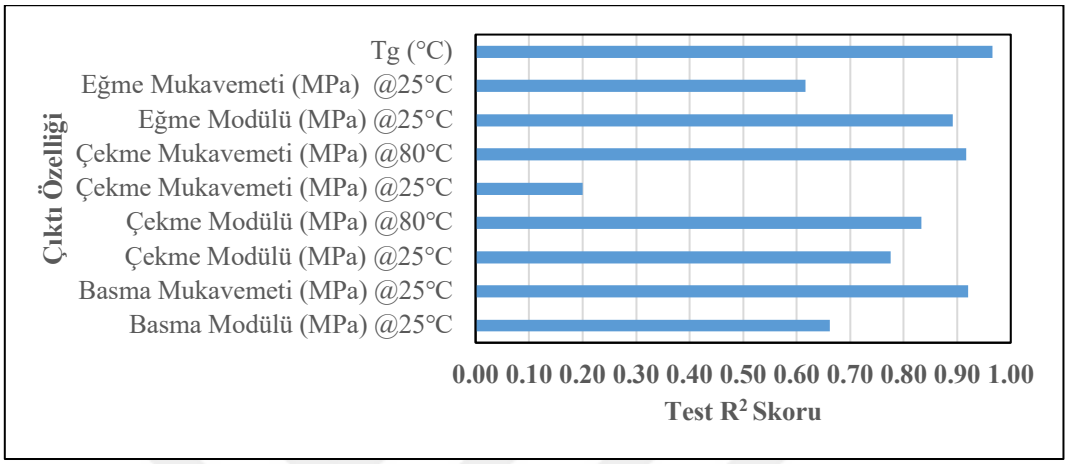
Yapay sinir ağı (YSA) modellerinin test verisindeki başarı düzeyi, her bir çıktı özelliği için hesaplanan Test R^2 skorları üzerinden karşılaştırmalı olarak değerlendirilmiştir. Bu metrik, modelin test verisinde açıklayabildiği varyans oranını yansıttığından, genel genelleme performansı hakkında önemli bilgi sunmaktadır.

Şekil 5.17'de en yüksek doğruluk değerleri, sırasıyla cam geçiş sıcaklığı (Tg), çekme mukavemeti @80 °C, basma mukavemeti @25 °C ve eğme modülü @25 °C gibi özelliklerde gözlemlenmiştir (Test $R^2 > 0.89$). Özellikle Tg değerinin ~0.98 düzeyine ulaşması, bu ısıl özelliğin modele sağlanan giriş parametreleri (örneğin çözücü tipi, hBN oranı, yüzey fonksiyonelleştirme durumu, tanecik boyutu) ile yüksek korelasyona sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Benzer şekilde, ısıya maruz kalma altında ölçülen çekme mukavemeti ve basma mukavemeti gibi mekanik özellikler için de yüksek R^2 değerleri, bu çıktıların belirli parametrelerle oldukça başarılı şekilde modellenebildiğini göstermektedir. Bu durum, literatürde polimer matrisli nanokompozitlerde mekanik özelliklerin sıcaklık, katkı oranı ve dağılım homojenliği gibi değişkenlerle güçlü şekilde ilişkili olduğunu belirten çalışmalarla da uyumludur [84].

Orta seviyede performans sergileyen çıktılar arasında, çekme modülü @25 °C, çekme modülü @80 °C ve çekme mukavemeti @25 °C yer almaktadır ($0.70 < \text{Test } R^2 < 0.85$). Bu değerler, modelin bu özellikleri de makul düzeyde tahmin edebildiğini ancak doğruluk açısından daha gelişmiş modellerle karşılaştırıldığında iyileştirme potansiyeli barındırdığını göstermektedir. Özellikle oda sıcaklığındaki çekme modülü gibi özelliklerde gözlenen doğruluk sınırlılığı, bu çıktılara ilişkin parametre duyarlılığının daha karmaşık veya doğrusal olmayan ilişkiler barındırabileceğini düşündürmektedir. Bu durum, ilave girdi parametreleri, daha karmaşık sinir ağı mimarileri ya da farklı hiperparametre optimizasyon stratejileri ile geliştirilebilir [182].

Buna karşılık, eğme mukavemeti @25 °C ve basma modülü @25 °C için elde edilen görece düşük Test R^2 skorları (~0.65 civarı), bu özelliklerin mevcut modelleme yaklaşımıyla yeterli düzeyde tahmin edilemediğini ortaya koymaktadır. Bu durumun temel nedenlerinden biri, test veri setinin hem nicel hem de temsili açıdan yetersiz olmasıdır. Test verisinin sınırlılığı, modelin genelleme kapasitesini

düşürmekte ve özellikle karmaşık mekanik davranışların doğru öngörülmesini zorlaştırmaktadır. Bu tür durumlarda, fiziksel ilkelere dayalı modellerle yapay sinir ağlarının desteklenmesi, hem veri gereksinimini azaltmakta hem de tahminlerin fiziksel tutarlılığını artırarak model performansını iyileştirmeye katkı sunabilmektedir [183].



Şekil 5.17 Farklı çıktı özellikleri için yapay sinir ağı tahmin doğruluklarının karşılaştırılması

Hekzagonal bor nitrür katkılı epoksi nanokompozitlerin çeşitli mekanik ve ısıl özelliklerini tahmin etmek amacıyla geliştirilen yapay sinir ağı modellerine ait eğitim ve doğrulama kayıpları Şekil 5.18 altında görselleştirilmiştir. Basma modülü (MPa) @25°C'ye ait modelin kayıp eğrileri Şekil (5.18-A)'da sunulmuş olup, eğitim kaybı ilk döngülerde dalgalı bir seyir izlese de süreç sonunda stabil hale gelmiştir. Doğrulama kaybının düşük ve yatay seyretmesi, modelin aşırı öğrenmeye gitmeden başarılı bir genelleme gerçekleştirdiğini ortaya koymaktadır. Şekil (5.18-B)'de gösterilen çekme modülü (MPa) @25°C modelinde hem eğitim hem doğrulama kayıpları oldukça düşük olup, modelin ölçümsel doğruluk açısından yüksek performans sunduğu anlaşılmaktadır. Şekil (5.18-C)'de yer alan basma mukavemeti (MPa) @25°C modelinde erken döngülerde doğrulama kaybında ani sıçramalar gözlenmiş olsa da süreç sonunda her iki kayıp da düşerek stabil bir seviyeye ulaşmıştır. Bu durum modelin erken dönemde sınırlı ezberleme eğilimi gösterdiğini ancak daha sonra dengelendiğini göstermektedir.

Şekil (5.18-D)'de sunulan çekme modülü (MPa) @80°C için geliştirilen modelde, ilk döngülerde yüksek kayıplar gözlenmekte ancak ilerleyen aşamalarda belirgin bir azalma ve dengelenme meydana gelmektedir. Bu, modelin ısıl etkiler altında

başarılı şekilde öğrenme gerçekleştirdiğini göstermektedir. Şekil (5.18-E)'de yer alan çekme mukavemeti (MPa) @25°C modeli hem eğitim hem doğrulama setlerinde düşük kayıplar sunmakta olup, ezberleme eğilimi göstermeksizin iyi bir genelleme gerçekleştirdiğini ortaya koymaktadır. Eğme modülü (GPa) @25°C'ye ait modelin kayıp eğrileri Şekil (5.18-F)'te verilmiş olup, eğitim kaybındaki dalgalanmalara karşın doğrulama kaybının oldukça düşük ve stabil kalması, modelin doğrulama verisinde yüksek performans gösterdiğini ve eğitim verisindeki varyasyona karşı hassasiyet geliştirdiğini göstermektedir.

Çekme mukavemeti (MPa) @80°C için eğitilen modelin performansı Şekil (5.18-G)'de sunulmuş, doğrulama kaybının oldukça düşük ve kararlı olması bu modelin yüksek sıcaklık koşullarında dahi yüksek doğrulukla tahmin yapabildiğini göstermiştir. Şekil (5.18-H)'te yer alan eğme mukavemeti (MPa) @25°C modelinde eğitim kaybı dalgalı bir yapıya sahipken, doğrulama kaybı düşük ve stabil düzeyde seyretmiştir. Bu durum modelin eğitimi sırasında ağırlık güncellemelerinde kararsızlık yaşansa da genel doğrulama başarısının yüksek olduğunu göstermektedir. Son olarak, Şekil (5.18-I)'de gösterilen cam geçiş sıcaklığı (Tg, °C) modelinde eğitim kaybında belirgin dalgalanmalar mevcut olsa da doğrulama kaybının düşük ve kararlı olması, modelin ısıl geçiş gibi kompleks davranışları dahi doğru şekilde öğrenebildiğini ortaya koymaktadır.

Genel olarak değerlendirildiğinde, Şekil (5.18) kapsamında sunulan tüm modellerin doğrulama kayıplarının düşük ve istikrarlı olması, kurulan YSA modellerinin yüksek genelleme kapasitesine sahip olduğunu ve malzeme özelliklerinin başarıyla öngörülebildiğini göstermektedir. Bununla birlikte, bazı modellerde gözlenen eğitim kaybı dalgalanmaları, hiperparametre optimizasyonunun iyileştirilmesiyle daha dengeli bir öğrenme süreci elde edilebileceğini de düşündürmektedir.



Şekil 5.18 Yapay sinir ağı modellerinin farklı malzeme özellikleri için öğrenme davranışları: (a) basma modülü @25°C, (b) çekme modülü @25°C, (c) basma mukavemeti @25°C, (d) çekme modülü @80°C, (e) çekme mukavemeti @25°C, (f) eğme modülü @25°C, (g) çekme mukavemeti @80°C, (h) eğme mukavemeti @25°C, (ı) cam geçiş sıcaklığı (Tg)

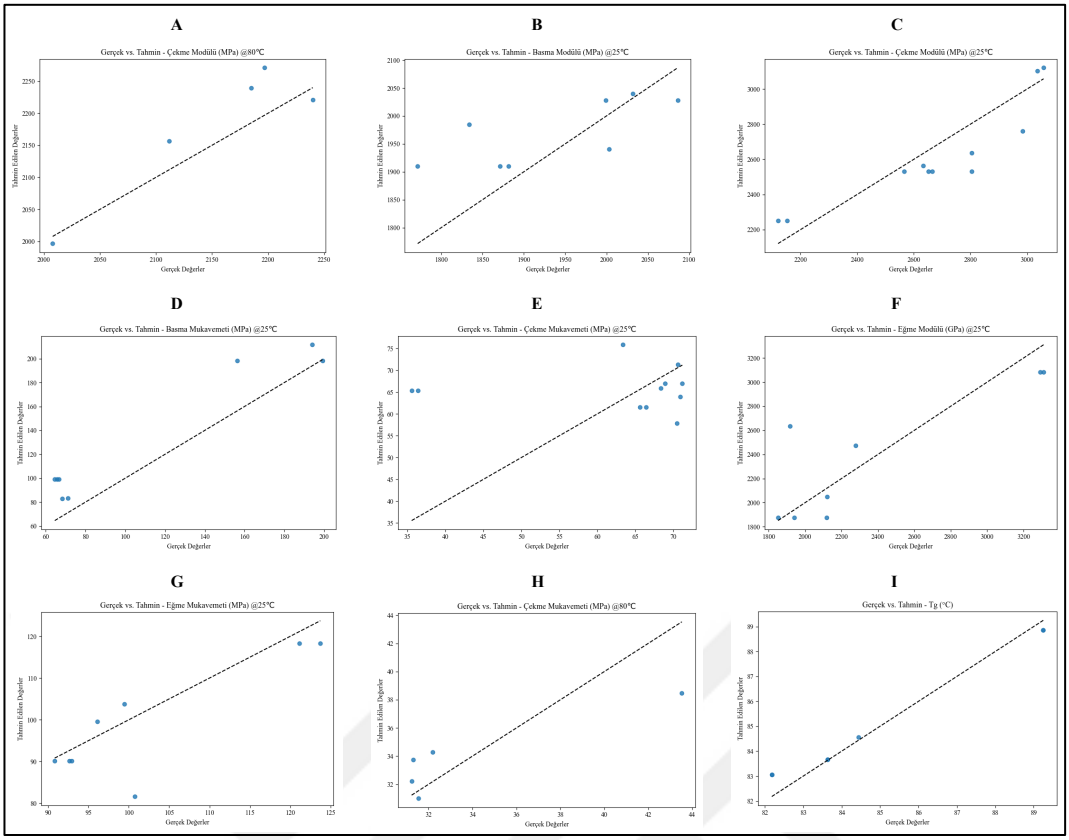
Şekil 5.19'da yapay sinir ağı (YSA) modeli ile tahmin edilen değerlerin deneysel (gerçek) verilerle karşılaştırmalı olarak sunulduğu grafikler yer almaktadır. Grafiklerdeki dağılım, modelin her bir hedef özellik için ne düzeyde başarılı tahminler gerçekleştirebildiğini göstermektedir. Şekil 5.19-(a) incelendiğinde, 80 °C sıcaklıktaki çekme modülü tahminlerinin, regresyon doğrusuna oldukça yakın olduğu ve modelin bu sıcaklıktaki elastik davranışı başarılı biçimde yakalayabildiği görülmektedir. Şekil 5.19-(b)'de 25 °C'deki basma modülü tahminleri için ise daha geniş bir yayılım gözlemlenmekte olup, orta değerlerde sapmaların belirginleştiği anlaşılmaktadır. Şekil 5.19-(c) grafiğinde, 25 °C'deki çekme modülü tahminlerinde doğrusal eğilim korunmakla birlikte bazı örneklerde modelin düşük tahminlerde bulunduğu gözlemlenmektedir; bu durum, yüksek çekme modülü değerlerinde modelin doğruluğunun sınırlı olduğunu göstermektedir.

Şekil 5.19-(d), 25 °C'deki basma mukavemeti tahminlerinin oldukça yüksek doğrulukta olduğunu göstermekte; neredeyse tüm veri noktaları $y = x$ doğrusuna yakın seyretmektedir. Benzer şekilde, Şekil 5.19-(e)'de yer alan çekme mukavemeti tahminlerinde de özellikle yüksek mukavemet değerlerinde başarılı bir tahmin

performansı sergilenmiş olup düşük değerlerde hafif sapmalar mevcuttur. Şekil 5.19-(f)'deki 25 °C'deki eğme modülü tahminlerinde ise doğrusal eğilim genel olarak korunmuş olmakla birlikte bazı noktalarda sapmalar gözlenmekte, bu da modelin geniş aralıklı elastik davranışı temsil etmekte zorlandığını düşündürmektedir.

Şekil 5.19-(g) grafiğinde, eğme mukavemeti tahminlerinin yüksek doğrulukla belirlendiği ve özellikle tüm veri aralığında tahminlerin iyi bir şekilde dağıldığı görülmektedir. Şekil 5.19-(h) ise 80 °C'deki çekme mukavemeti tahminlerini içermekte olup, veri sayısının sınırlı olmasına rağmen modelin doğruluğu tatmin edici düzeydedir. Son olarak, Şekil 5.19-(ı) grafiği, geçiş sıcaklığı (Tg) tahminlerinin yüksek doğrulukla yapıldığını göstermektedir; çünkü tüm veri noktaları $y = x$ doğrusuna oldukça yakın seyretmektedir ve sistematik sapmalar gözlenmemektedir.

Genel olarak, model Tg, eğme mukavemeti ve basma mukavemeti gibi özelliklerde oldukça başarılı tahminler sunarken; basma ve çekme modülü gibi daha değişken özelliklerde yer yer sapmalar göstermektedir. Bu durum, modelin doğruluk performansının hedef özelliğin varyansına ve eğitildiği veri setinin dağılımına bağlı olduğunu ortaya koymaktadır. Modelin doğruluğunu daha da artırmak amacıyla, veri setinin genişletilmesi, hiperparametre optimizasyonunun tekrarlanması ve belirli özellikler için daha derin ağ mimarilerinin denenmesi önerilmektedir [23].



Şekil 5.19 Deneysel veriler ile YSA tahminleri arasındaki ilişki – çoklu özellik analizi: (a) çekme modülü (MPa) @80 °C, (b) basma modülü (MPa) @25 °C, (c) çekme modülü (MPa) @25 °C, (d) basma mukavemeti (MPa) @25 °C, (e) çekme mukavemeti (MPa) @25 °C, (f) eğme modülü (MPa) @25 °C, (g) eğme mukavemeti (MPa) @25 °C, (h) çekme mukavemeti (MPa) @80 °C ve (ı) camsı geçiş sıcaklığı – Tg (°C)

hBN katkılı epoksi nanokompozitlerin mekanik (çekme, eğme, basma) ve ısıl (cam geçiş sıcaklığı, Tg) özellikleri, SHAP (SHapley Additive exPlanations) analiz yöntemi ile yorumlanarak yapay sinir ağı (YSA) modellerinin karar mekanizması anlaşılmıştır. Elde edilen açıklamalar, modelin hangi girdi parametrelerini hangi yönde ve ne derece dikkate aldığını detaylı biçimde ortaya koymuştur (Şekil 5.20).

Öncelikle basma özellikleri incelendiğinde, “Basma Modülü” üzerinde en yüksek etkiye sahip değişkenin ethanol olduğu görülmüştür. Ethanol’ün özellikle yüksek seviyelerde kullanımı, basma modülünde belirgin artış sağlamış, bu durum çözücü kaynaklı homojen dağılımın rijitlik üzerine olumlu etkisini ortaya koymuştur. “Tanecik Boyutu 110” ise rijitliğe katkı sunarken, küçük tanecikler (40 nm) ve APTES fonksiyonlandırma negatif etki göstermiştir. “Basma Mukavemeti” açısından ise yine ethanol ve Tanecik Boyutu 40 en güçlü pozitif katkıları sunarken, yüksek % hBN katkısı da mukavemeti artırıcı etki yapmıştır. Bu durum, ince

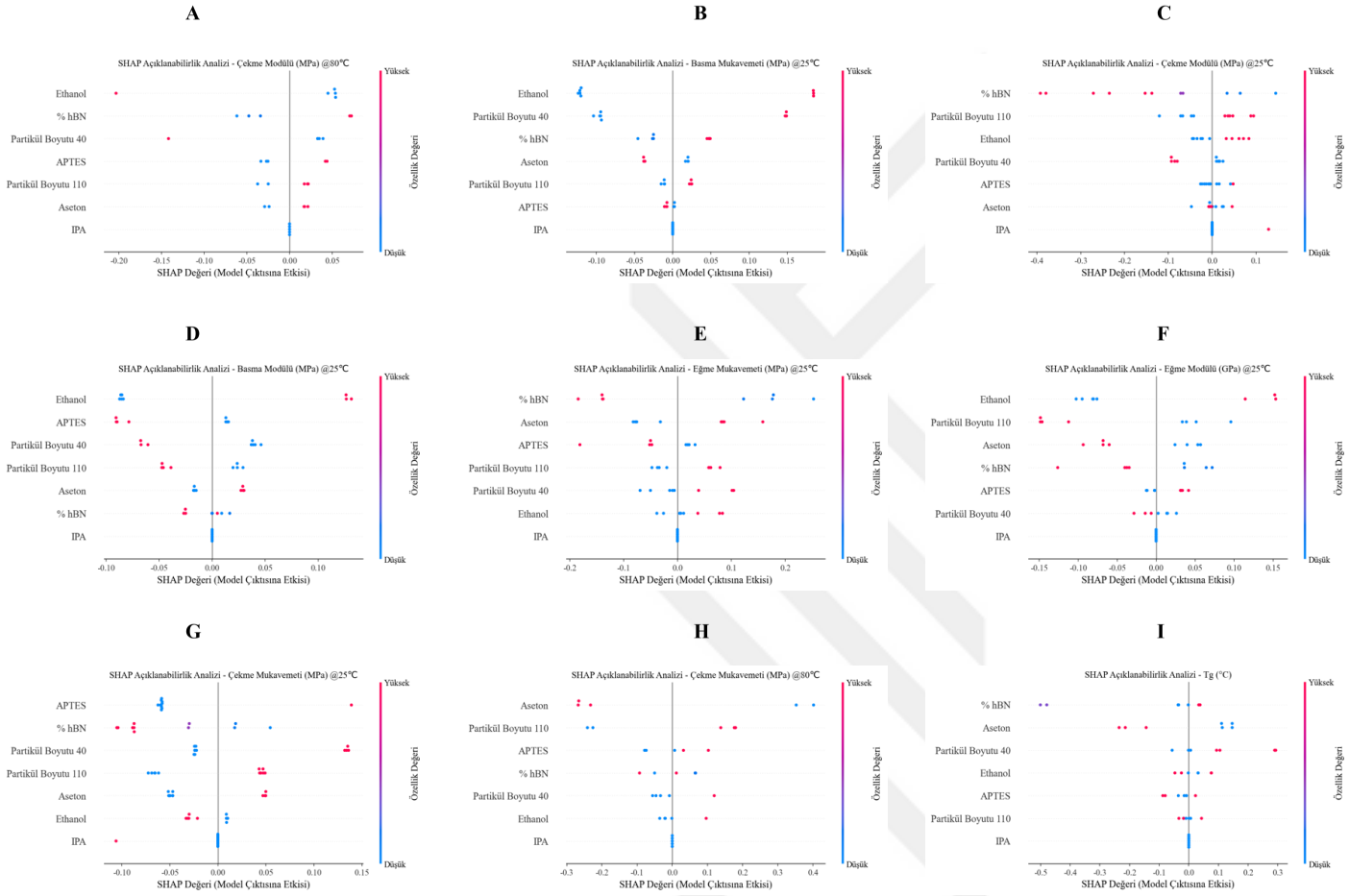
taneciklerin çatlak ucu civarındaki gerilme konsantrasyonunu düşürmesiyle açıklanabilir [172].

Çekme özellikleri değerlendirmesinde, “Çekme Modülü @25 °C” için % hBN katkısı en etkili parametre olarak belirlenmiş, özellikle yüksek katkı oranlarında rijitlik artışı sağlanmıştır. “Tanecik Boyutu 110” da benzer şekilde modüle olumlu katkı sunarken, çözücü ve yüzey fonksiyonlandırma faktörleri daha sınırlı etki göstermiştir. “Çekme Modülü @80 °C” çıktısında ise sıcaklığın artmasıyla birlikte etkili değişkenlerin etkisi daha dağılmış ve genellenemez hâle gelmiştir; ancak yine de % hBN katkısı ve Tanecik Boyutu 110 pozitif katkılarını sürdürmüştür. “Çekme Mukavemeti @25 °C” için en etkili parametreler % hBN, Tanecik Boyutu 40 ve APTES olarak belirlenmiş; bu da mukavemetin, matristeki dağılımın kalitesine ve ara yüzey etkileşimlerine duyarlılığını göstermektedir. Öte yandan “Çekme Mukavemeti @80 °C” çıktısında Aseton çözücüsü öne çıkmış; yüksek sıcaklıkta matris-tanecik etkileşimini daha iyi destekleyerek çekme dayanımını artırmıştır. Bu, çözücü seçiminin sıcaklıkla birlikte farklılaştığını ortaya koymuştur.

Eğme özellikleri açısından “Eğme Modülü” parametresinde en belirleyici faktör yine ethanol olurken, ardından gelen % hBN katkısı ve Tanecik Boyutu 110 gibi parametreler eğilme rijitliğini destekleyici katkılar sunmuştur. Bu bulgu, daha rijit bir sistemin çözücü ve tanecik özellikleriyle kontrol edilebildiğini göstermektedir. “Eğme Mukavemeti” içinse en yüksek SHAP etkisi yine % hBN’de gözlenmiş, bu katkı oranı eğilme altındaki yük taşıma kapasitesine doğrudan etki etmiştir. Aseton ve APTES gibi parametreler ise fonksiyonlandırma ve dağılım açısından belirli katkılar sağlamışlardır.

Son olarak, cam geçiş sıcaklığı (Tg) çıktısı incelendiğinde, en baskın parametre % hBN katkısı olmuştur. hBN tanecikleri, polimer zinciri hareketliliğini kısıtladığı için Tg’yi belirgin şekilde artırmıştır. İkinci derecede etkili parametre Aseton olmuş, bu çözücünün nanotanecik dağılımı üzerindeki olumlu etkisi, Tg yükselmesinde etkili olmuştur. Özellikle 40 nm boyutundaki tanecikler, düzgün dağıldığında Tg üzerinde pozitif etki yaparken; düzensiz dağılım durumlarında negatif etkiler gözlenmiştir. Bu durum SHAP analizinde hem pozitif hem negatif etkilerin aynı değişkende gözlenmesiyle desteklenmiştir.

Genel olarak, SHAP analizleri sayesinde yapay sinir ağı modelinin kararlarını etkileyen faktörler açıkça ortaya konmuş, modelin sadece tahmin yapmadığı, aynı zamanda fiziksel/mekanik olarak yorumlanabilir sonuçlar verdiği görülmüştür. Bu açıklamalar, gelecekteki nanokompozit tasarımı ve deney planlaması süreçlerinde veri temelli yönlendirme sağlaması açısından büyük önem taşımaktadır.



Şekil 5.20 Farklı mekanik ve termal özellikler için yapay sinir ağı (YSA) modelleri ile elde edilen SHAP açıklanabilirlik analizi sonuçları. a: çekme modülü (MPa) @80°C, b: basma mukavemeti (MPa) @25°C, c: çekme modülü (MPa) @25°C, d: basma modülü (MPa) @25°C, e: eğilme mukavemeti (MPa) @25°C, f: eğilme modülü (MPa) @25°C, g: çekme mukavemeti (MPa) @25°C, h: çekme mukavemeti (MPa) @80°C, ı: camsı geçiş sıcaklığı (Tg, °C)

Çalışmada ayrıca, deneysel veriler kullanılarak oluşturulan sentetik veri setiyle yapılan tahminlerin doğruluğu değerlendirilmiştir. Bu kapsamda, hedef değişken olarak camsı geçiş sıcaklığı (Tg) belirlenmiş ve toplam 39 adet deneysel veri üzerinde ±%0.1 oranında kontrollü gürültü uygulanarak 390 adet sentetik örnek üretilmiştir. Elde edilen toplam 429 veri noktası, eğitim (%64), doğrulama (%16) ve test (%20) setlerine ayrılarak, MinMaxScaler yöntemiyle normalize edilmiştir. Modelin tekrarlanabilirliğini sağlamak adına tüm rastgelelik parametreleri sabitlenmiş ve her bir model eğitimi beş kez tekrar edilmiştir.

Sentetik verinin model eğitimine dahil edilmesiyle birlikte tahmin doğruluğunda anlamlı bir düşüş gözlemlenmiş, özellikle test seti üzerinde performansın zayıfladığı tespit edilmiştir. Bu bulguya paralel olarak gerçekleştirilen SHAP analizleri, sentetik verilerle eğitilen modellerde, malzeme girdi parametreleri ile çıktı özellikleri arasındaki nedensel ve fiziksel ilişkilerin zayıfladığını ortaya koymuştur. Örneğin, katkı oranı, tanecik boyutu ve yüzey fonksiyonelleştirme gibi belirleyici değişkenlerin model kararlarına etkisi azalırken, bazı ikincil parametrelerin modelde yapay biçimde öne çıktığı belirlenmiştir. Bu durum, sentetik veri üretiminin dikkatli değerlendirilmesi gerektiğini ve fiziksel gerçeklikten sapmanın, özellikle çok parametreli malzeme sistemlerinde tahmin performansını olumsuz etkileyebileceğini göstermektedir.

6
SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, hBN nanotanecikleri ile takviye edilmiş epoksi esaslı polimer nanokompozitlerin morfolojik, ısıl ve mekanik özellikleri detaylı bir şekilde incelenmiştir. Çalışma kapsamında, 40 nm ve 110 nm boyutundaki hBN nanotanecikleri farklı katkı oranlarında (ağırlıkça %0.1–0.5) epoksi matris içerisine izopropil alkol, etanol ve aseton gibi farklı çözücülerde dağıtılarak numuneler hazırlanmıştır. Ayrıcı (3-aminopropil)trietoksisilan APTES ile yüzey fonksiyonelleştirmenin nanotaneciklerin matris içindeki dağılımına fonksiyonlandırmanın etkileri değerlendirilmiştir. Nanokompozitler Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR), Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) ve Diferansiyel Taramalı Kalorimetre (DSC) analizleriyle karakterize edilerek yapısal, morfolojik ve ısıl özellikler incelenmiştir. Ayrıca çekme, basma ve eğilme testleri ile mekanik performans üzerinde tanecik boyutu, katkı oranı, çözücü türü ve yüzey fonksiyonlandırma gibi parametrelerin etkileri araştırılmıştır. Elde edilen deneysel veriler ışığında, çok katmanlı YSA modelleri kurulmuş ve bu modeller aracılığıyla seçilen mekanik özelliklerin tahmin edilmesi hedeflenmiştir. Ayrıca, deneysel verilerle oluşturulan eğitim veri seti üzerinden sentetik veri üretimi yapılmış ve bu sentetik veri kullanılarak modelin tahmin performansı değerlendirilmiştir. Böylece, veri kalitesinin ve fiziksel gerçekliğin korunmasının makine öğrenimi tabanlı tahmin modellerinin başarısı üzerindeki etkisi ortaya konmuştur.

Analizler sonucunda, daha küçük boyutlu (40 nm) hBN nanotaneciklerinin etanol ortamında homojen şekilde dağılması, özellikle basma mukavemeti açısından belirgin iyileşmeler sağlamıştır. Ağırlıkça %0.1 ve %0.5 oranlarında katkılanan hBN-40/etanol sistemlerinde, saf epoksiye kıyasla sırasıyla yaklaşık %212 ve %220 oranında artış elde edilmiştir. Bu artışın, perkolasyon eşiği sonrasında oluşan sürekli yük taşıma ağıyla ilişkili olduğu değerlendirilmektedir. Yüzey fonksiyonelleştirme işlemleri ise özellikle daha büyük boyutlu tanecikler üzerinde sınırlı etki göstermiş; bu nedenle hem işlem verimliliği hem de mekanik performans açısından daha küçük taneciklerin tercih edilmesinin daha uygun olduğu sonucuna varılmıştır. Camsı geçiş sıcaklığı (Tg) ölçümleri de bu bulguları destekler

niteliktedir. Özellikle, ağırlıkça %0.1 oranında 40 nm boyutundaki hBN katkısıyla hazırlanan kompozitte Tg'nin yaklaşık 5 °C artarak 89 °C'ye ulaşması, küçük taneciklerin ısıl kararlılık üzerindeki olumlu etkisini ortaya koymuştur. Bununla birlikte %0.25 ve %0.5 katkı oranlarında Tg'nin sırasıyla 82 °C ve 88 °C olduğu tespit edilmiştir. Bu durum, katkı oranının hem mekanik hem de ısıl özellikler üzerindeki etkisini açıkça ortaya koymuştur.

Yapay sinir ağı modeli, Tg ve basma mukavemeti gibi bazı özellikleri yüksek doğrulukla (Test $R^2 \approx 0.98$) tahmin edebilmiş, ancak eğilme mukavemeti ve basma modülü gibi daha kompleks davranışları açıklayan parametreler için daha düşük doğruluk düzeyleri (Test $R^2 \approx 0.65$) elde edilmiştir. Bu farklılık, bazı çıktıların mevcut deneysel verilerle sınırlı ölçüde temsil edilebildiğini ve yapay zeka modellerinin fiziksel anlamlılık çerçevesinde dikkatle yorumlanması gerektiğini göstermektedir.

Uygulamaya Yönelik Öneriler

- hBN katkılı nanokompozitlerin geliştirilmesinde, basma yükleri altında üstün performans sağlamak için 40 nm boyutlu nanotaneciklerin tercih edilmesi,
- Yüzey fonksiyonelleştirme işlemlerinin tanecik boyutuyla etkileşimli şekilde optimize edilmesi,
- YSA gibi veri temelli yaklaşımların, sınırlı deneysel veriyle dahi yüksek doğruluk sağlayabildiği göz önünde bulundurularak malzeme tasarımında daha yaygın olarak kullanılması,
- Fiziksel ilişkilerde sapmalara ve model kararlarının bozulmasına yol açabileceğinden dolayı sentetik verilerin dikkatli ve sınırlı amaçlarla kullanılması,
- Bazı çıktı parametreleri için fizik temelli modellere dayanan açıklayıcı yaklaşımların entegre edilerek hibrit modelleme yapılarının oluşturulması.

İleri Çalışmalar İçin Öneriler

Modelleme Geliştirmeleri:

- YSA tabanlı malzeme girdi parametrelerinin optimizasyonu için Parçacık Sürü Optimizasyonu (Particle Swarm Optimization, PSO) gibi doğadan esinlenen algoritmaların uygulanması,

- YSA modellerinin alternatif makine öğrenmesi algoritmaları ile (örneğin ensemble öğrenme, karar ağaçları, rastgele orman) karşılaştırılarak model seçim sürecinin nesnel hale getirilmesi,
- Sentetik veri üretiminde, doğrusal interpolasyonun ötesine geçebilen ve dağılım öğrenebilen üretken modellerin, özellikle Çekişmeli Üretici Ağ (Generative Adversarial Networks, GAN) yapılarının değerlendirilmesi.

Deneysel ve Malzeme Odaklı Genişletmeler:

- Daha çok sayıda parametreyi kapsayan deneysel veri setlerinin oluşturulması,
- hBN katkılı sistemlerin farklı polimer matrisler ile karşılaştırmalı olarak incelenmesi,
- Uzun süreli yaşlandırma, çevresel testler ve dinamik yükleme koşullarının çalışmaya dâhil edilerek potansiyel uygulama koşulları için test edilmesi.

Bu tez çalışmasının sonuçları, hBN nanotanecikleriyle takviye edilmiş epoksi esaslı polimer nanokompozitlerin hem deneysel karakterizasyonunu hem de yapay sinir ağı temelli tahmin modelleriyle analizini bütüncül biçimde ele alarak veri temelli yaklaşımlar ile malzeme biliminde ekonomik ve hızlı çözümler sunabileceğini ortaya koymuştur. Bu kapsamda elde edilen bulgular hem malzeme tasarım süreçlerinin dijitalleştirilmesi hem de polimer matrisli nanokompozitlerin çok parametreli optimizasyonuna yönelik gelecekteki disiplinlerarası çalışmalar için yol gösterici niteliktedir.

KAYNAKÇA

[1] K. I. Winey and R. A. Vaia, “Polymer Nanocomposites,” *MRS Bulletin*, vol. 32, no. 4, pp. 314–322, Apr. 2007, doi: 10.1557/mrs2007.229.

[2] Sir David Brewster and Richard Taylor, *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. Taylor & Francis, 1842.

[3] D. M. Engler and D. Christoph, “Hexagonales Bornitrid (hBN) - Anwendungen von Metallurgie bis Kosmetik,” no. 12, 2007.

[4] “Hexagonal Boron Nitride | About Us | Saint-Gobain Boron Nitride.” Accessed: Mar. 02, 2025. [Online]. Available: https://www.bn.saint-gobain.com/resource-center/about-us

[5] J. A. Gannon, “History and Development of Epoxy Resins,” in *High Performance Polymers: Their Origin and Development*, R. B. Seymour and G. S. Kirshenbaum, Eds., Dordrecht: Springer Netherlands, 1986, pp. 299–307. doi: 10.1007/978-94-011-7073-4_29.

[6] C. Negoita, N. Cristache, and M. Bodor, “The Epoxy Resin - History and Perspectives,” *MATERIALE PLASTICE*.

[7] W. Scheibner and M. Jäckel, “Thermal Conductivity and Specific Heat of an Epoxy Resin/Epoxy Resin Composite Material at Low Temperatures,” in *Volume 87, Number 2 February 16*, Görlich, Ed., De Gruyter, 2022, pp. 543–548. doi: 10.1515/9783112497586-015.

[8] Z. Liu, J. Li, and X. Liu, “Novel Functionalized BN Nanosheets/Epoxy Composites with Advanced Thermal Conductivity and Mechanical Properties,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 12, no. 5, pp. 6503–6515, Feb. 2020, doi: 10.1021/acsami.9b21467.

[9] M. G. Rasul, A. Kiziltas, B. Arfaei, and R. Shahbazian-Yassar, “2D boron nitride nanosheets for polymer composite materials,” *npj 2D Mater Appl*, vol. 5, no. 1, pp. 1–18, May 2021, doi: 10.1038/s41699-021-00231-2.

[10] K. C. Yung and H. Liem, “Enhanced thermal conductivity of boron nitride epoxy-matrix composite through multi-modal particle size mixing,” *Journal of Applied Polymer Science*, vol. 106, no. 6, pp. 3587–3591, 2007, doi: 10.1002/app.27027.

[11] Q. Weng, X. Wang, X. Wang, Y. Bando, and D. Golberg, “Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 45, no. 14, pp. 3989–4012, Jul. 2016, doi: 10.1039/C5CS00869G.

[12] A. M. TURING, “I.—COMPUTING MACHINERY AND INTELLIGENCE,” *Mind*, vol. LIX, no. 236, pp. 433–460, Oct. 1950, doi: 10.1093/mind/LIX.236.433.

[13] F. Rosenblatt, “The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain,” *Psychological Review*, vol. 65, no. 6, pp. 386–408, 1958, doi: 10.1037/h0042519.

[14] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, “Learning representations by back-propagating errors,” *Nature*, vol. 323, no. 6088, pp. 533–536, Oct. 1986, doi: 10.1038/323533a0.

[15] H. K. D. H. Bhadeshia, “Neural Networks in Materials Science.,” *ISIJ International*, vol. 39, no. 10, pp. 966–979, 1999, doi: 10.2355/isijinternational.39.966.

[16] J. F. Rodrigues, L. Florea, M. C. F. de Oliveira, D. Diamond, and O. N. Oliveira, "Big data and machine learning for materials science," *Discov Mater*, vol. 1, no. 1, p. 12, Apr. 2021, doi: 10.1007/s43939-021-00012-0.
[17] Z. Song *et al.*, "Machine learning in materials design: Algorithm and application*," *Chinese Phys. B*, vol. 29, no. 11, p. 116103, Nov. 2020, doi: 10.1088/1674-1056/abc0e3.
[18] Z. Zhang and K. Friedrich, "Artificial neural networks applied to polymer composites: a review," *Composites Science and Technology*, vol. 63, no. 14, pp. 2029–2044, Nov. 2003, doi: 10.1016/S0266-3538(03)00106-4.
[19] Z. Liu, J. Li, and X. Liu, "Novel Functionalized BN Nanosheets/Epoxy Composites with Advanced Thermal Conductivity and Mechanical Properties," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 12, no. 5, pp. 6503–6515, Feb. 2020, doi: 10.1021/acsami.9b21467.
[20] A. Agrawal, S. Chandrakar, and A. Sharma, "Mechanical and Thermal Behaviour of Epoxy/Hexagonal Boron Nitride/Short Sisal Fiber Hybrid Composites," *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, vol. 840, no. 1, p. 012011, May 2020, doi: 10.1088/1757-899X/840/1/012011.
[21] H. Yang, Z. Zhang, J. Zhang, and X. C. Zeng, "Machine learning and artificial neural network prediction of interfacial thermal resistance between graphene and hexagonal boron nitride," *Nanoscale*, vol. 10, no. 40, pp. 19092–19099, Oct. 2018, doi: 10.1039/C8NR05703F.
[22] R. Esmaeili and M. R. Dashtbayazi, "Modeling and optimization for microstructural properties of Al/SiC nanocomposite by artificial neural network and genetic algorithm," *Expert Systems with Applications*, vol. 41, no. 13, pp. 5817–5831, Oct. 2014, doi: 10.1016/j.eswa.2014.03.038.
[23] A. Alwosheel, S. van Cranenburgh, and C. G. Chorus, "Is your dataset big enough? Sample size requirements when using artificial neural networks for discrete choice analysis," *Journal of Choice Modelling*, vol. 28, pp. 167–182, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.jocm.2018.07.002.
[24] V. Gupta *et al.*, "Cross-property deep transfer learning framework for enhanced predictive analytics on small materials data," *Nat Commun*, vol. 12, no. 1, p. 6595, Nov. 2021, doi: 10.1038/s41467-021-26921-5.
[25] H. Yamada *et al.*, "Predicting Materials Properties with Little Data Using Shotgun Transfer Learning," *ACS Cent. Sci.*, vol. 5, no. 10, pp. 1717–1730, Oct. 2019, doi: 10.1021/acscentsci.9b00804.
[26] T. Hai *et al.*, "Integrating artificial neural networks, multi-objective metaheuristic optimization, and multi-criteria decision-making for improving MXene-based ionanofluids applicable in PV/T solar systems," *Sci Rep*, vol. 14, no. 1, p. 29524, Nov. 2024, doi: 10.1038/s41598-024-81044-3.
[27] A. Zotti, S. Zuppolini, A. Borriello, and M. Zarrelli, "Thermal and Mechanical Characterization of an Aeronautical Graded Epoxy Resin Loaded with Hybrid Nanoparticles," *Nanomaterials*, vol. 10, no. 7, p. 1388, Jul. 2020, doi: 10.3390/nano10071388.
[28] M. Jalali, S. Dauterstedt, A. Michaud, and R. Wuthrich, "Electromagnetic shielding of polymer–matrix composites with metallic nanoparticles," *Composites Part B: Engineering*, vol. 42, no. 6, pp. 1420–1426, Sep. 2011, doi: 10.1016/j.compositesb.2011.05.018.
[29] Y. Wang and G. J. Weng, "Electrical Conductivity of Carbon Nanotube- and Graphene-Based Nanocomposites," in *Micromechanics and Nanomechanics of Composite Solids*, S. A. Meguid and G. J. Weng, Eds., Cham: Springer

International Publishing, 2018, pp. 123–156. doi: 10.1007/978-3-319-52794-9_4.
[30] J. Ashfaq *et al.*, "Enhancement of Thermal and Gas Barrier Properties of Graphene-Based Nanocomposite Films," *ACS Omega*, vol. 8, no. 44, pp. 41054–41063, Nov. 2023, doi: 10.1021/acsomega.3c02885.
[31] M. Dong, Y. Sun, D. J. Dunstan, R. J. Young, and D. G. Papageorgiou, "Mechanical reinforcement from two-dimensional nanofillers: model, bulk and hybrid polymer nanocomposites," *Nanoscale*, vol. 16, no. 28, pp. 13247–13299, Jul. 2024, doi: 10.1039/D4NR01356E.
[32] R. D. Maalihan, M. R. B. Domalanta, A. C. C. Corrales, and E. B. Caldona, "Advances in interfacially engineered surface-functionalized fillers for multifunctional polymer composite coatings," *Polymer Composites*, vol. n/a, no. n/a, doi: 10.1002/pc.29358.
[33] M. G. Rasul, A. Kiziltas, B. Arfaei, and R. Shahbazian-Yassar, "2D boron nitride nanosheets for polymer composite materials," *npj 2D Mater Appl*, vol. 5, no. 1, pp. 1–18, May 2021, doi: 10.1038/s41699-021-00231-2.
[34] S. Homayoonnia, A. Phani, and S. Kim, "MOF/MWCNT–Nanocomposite Manipulates High Selectivity to Gas via Different Adsorption Sites with Varying Electron Affinity: A Study in Methane Detection in Parts-per-Billion," *ACS Sens.*, vol. 7, no. 12, pp. 3846–3856, Dec. 2022, doi: 10.1021/acssensors.2c01796.
[35] S. Karamikamkar *et al.*, "Nanocomposite Aerogel Network Featuring High Surface Area and Superinsulation Properties," *Chem. Mater.*, vol. 36, no. 2, pp. 642–656, Jan. 2024, doi: 10.1021/acs.chemmater.3c01391.
[36] S. Coiai, E. Passaglia, A. Pucci, and G. Ruggeri, "Nanocomposites Based on Thermoplastic Polymers and Functional Nanofiller for Sensor Applications," *Materials (Basel)*, vol. 8, no. 6, pp. 3377–3427, Jun. 2015, doi: 10.3390/ma8063377.
[37] O. Olabisi and K. Adewale, Eds., *Handbook of Thermoplastics*, 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2016. doi: 10.1201/b19190.
[38] M. Biron, "2 - The Plastics Industry: Economic Overview," in *Thermoplastics and Thermoplastic Composites (Second Edition)*, M. Biron, Ed., in Plastics Design Library. , William Andrew Publishing, 2013, pp. 31–131. doi: 10.1016/B978-1-4557-7898-0.00002-0.
[39] J.-P. Pascault and R. J. J. Williams, "Thermosetting Polymers," in *Handbook of Polymer Synthesis, Characterization, and Processing*, John Wiley & Sons, Ltd, 2013, pp. 519–533. doi: 10.1002/9781118480793.ch28.
[40] H. Van Quy and S. T. T. Nguyen, "Experimental Analysis of Coir Fiber Sheet Reinforced Epoxy Resin Composite," *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, vol. 642, no. 1, p. 012007, Oct. 2019, doi: 10.1088/1757-899X/642/1/012007.
[41] B. Ellis, "The kinetics of cure and network formation," in *Chemistry and Technology of Epoxy Resins*, B. Ellis, Ed., Dordrecht: Springer Netherlands, 1993, pp. 72–116. doi: 10.1007/978-94-011-2932-9_3.
[42] T. D. Chang, S. H. Carr, and J. O. Brittain, "Studies of epoxy resin systems: Part B: Effect of crosslinking on the physical properties of an epoxy resin," *Polymer Engineering & Sci*, vol. 22, no. 18, pp. 1213–1220, Dec. 1982, doi: 10.1002/pen.760221807.
[43] W. R. Ashcroft, "Curing agents for epoxy resins," in *Chemistry and Technology of Epoxy Resins*, B. Ellis, Ed., Dordrecht: Springer Netherlands, 1993, pp. 37–71. doi: 10.1007/978-94-011-2932-9_2.

[44] X. Li *et al.*, “Study on the Mechanical and Toughness Behavior of Epoxy Nano-Composites with Zero-Dimensional and Two-Dimensional Nano-Fillers,” *Polymers*, vol. 14, no. 17, p. 3618, Sep. 2022, doi: 10.3390/polym14173618.
[45] S.-L. Chung and J.-S. Lin, “Thermal Conductivity of Epoxy Resin Composites Filled with Combustion Synthesized h-BN Particles,” *Molecules*, vol. 21, no. 5, Art. no. 5, May 2016, doi: 10.3390/molecules21050670.
[46] H. Chen, O. Jacobs, W. Wu, G. Rüdiger, and B. Schädel, “Effect of dispersion method on tribological properties of carbon nanotube reinforced epoxy resin composites,” *Polymer Testing*, vol. 26, no. 3, pp. 351–360, May 2007, doi: 10.1016/j.polymertesting.2006.11.004.
[47] C. Yeung and A. S. Vaughan, “On the Effect of Nanoparticle Surface Chemistry on the Electrical Characteristics of Epoxy-Based Nanocomposites,” *Polymers*, vol. 8, no. 4, Art. no. 4, Apr. 2016, doi: 10.3390/polym8040126.
[48] Y. Yan *et al.*, “Effects of h-BN content and silane functionalization on thermal conductivity and corrosion resistance of h-BN/EPN coating,” *Surface and Coatings Technology*, vol. 476, p. 130185, Jan. 2024, doi: 10.1016/j.surfcoat.2023.130185.
[49] S. Das, S. Halder, B. Paul, N. I. Khan, and M. S. Goyat, “Impact of silanized milled graphite nanoparticles on thermo-mechanical properties of epoxy nanocomposite,” *Materials Chemistry and Physics*, vol. 278, p. 125601, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.matchemphys.2021.125601.
[50] J. J. Varughese and S. M. S., “Influence of silane and polyethylene glycol functionalization of boron nitride nanosheets on mechanical and thermal properties of epoxy nanocomposites: Machine and deep learning forecasting,” *Polymer Composites*, vol. n/a, no. n/a, doi: 10.1002/pc.29098.
[51] J. J. Varughese and S. M. S., “Investigation on enhancement of filler dispersion and prediction of mechanical behavior of hexagonal boron nitride/epoxy nanocomposites through machine learning and deep learning models,” *Polymer Composites*, vol. 45, no. 7, pp. 6287–6304, May 2024, doi: 10.1002/pc.28197.
[52] A. A. Musa *et al.*, “Nano-Enhanced Polymer Composite Materials: A Review of Current Advancements and Challenges,” *Polymers*, vol. 17, no. 7, Art. no. 7, Jan. 2025, doi: 10.3390/polym17070893.
[53] A. V. Kukhta, “Organic-Inorganic Nanocomposites and Their Applications,” in *Nanoscience Advances in CBRN Agents Detection, Information and Energy Security*, P. Petkov, D. Tsiulyanu, W. Kulisch, and C. Popov, Eds., Dordrecht: Springer Netherlands, 2015, pp. 207–225. doi: 10.1007/978-94-017-9697-2_22.
[54] A. M. Díez-Pascual *et al.*, “Influence of carbon nanotubes on the thermal, electrical and mechanical properties of poly(ether ether ketone)/glass fiber laminates,” *Carbon*, vol. 49, no. 8, pp. 2817–2833, Jul. 2011, doi: 10.1016/j.carbon.2011.03.011.
[55] A. Ibrahim, A. Klopocinska, K. Horvat, and Z. Abdel Hamid, “Graphene-Based Nanocomposites: Synthesis, Mechanical Properties, and Characterizations,” *Polymers (Basel)*, vol. 13, no. 17, p. 2869, Aug. 2021, doi: 10.3390/polym13172869.

[56] M. Shin, J. Lim, Y. Park, J.-Y. Lee, J. Yoon, and J.-W. Choi, “Carbon-based nanocomposites for biomedical applications,” *RSC Adv*, vol. 14, no. 10, pp. 7142–7156, doi: 10.1039/d3ra08946k.
[57] A. Kausar, “Fullerene Reinforced Polymeric Nanocomposites for Energy Storage—Status and Prognoses,” *Front. Mater.*, vol. 9, Mar. 2022, doi: 10.3389/fmats.2022.874169.
[58] A. Zadehnazari, “Metal oxide/polymer nanocomposites: A review on recent advances in fabrication and applications,” *Polymer-Plastics Technology and Materials*, vol. 62, no. 5, pp. 655–700, Mar. 2023, doi: 10.1080/25740881.2022.2129387.
[59] F. Guo, S. Aryana, Y. Han, and Y. Jiao, “A Review of the Synthesis and Applications of Polymer–Nanoclay Composites,” *Applied Sciences*, vol. 8, no. 9, p. 1696, Sep. 2018, doi: 10.3390/app8091696.
[60] A. M. Díez-Pascual *et al.*, “Influence of carbon nanotubes on the thermal, electrical and mechanical properties of poly(ether ether ketone)/glass fiber laminates,” *Carbon*, vol. 49, no. 8, pp. 2817–2833, Jul. 2011, doi: 10.1016/j.carbon.2011.03.011.
[61] P. N. Khanam, D. Ponnamma, and M. A. AL-Madeed, “Electrical Properties of Graphene Polymer Nanocomposites,” in *Graphene-Based Polymer Nanocomposites in Electronics*, K. K. Sadasivuni, D. Ponnamma, J. Kim, and S. Thomas, Eds., Cham: Springer International Publishing, 2015, pp. 25–47. doi: 10.1007/978-3-319-13875-6_2.
[62] R. Atif, I. Shyha, and F. Inam, “Mechanical, Thermal, and Electrical Properties of Graphene-Epoxy Nanocomposites—A Review,” *Polymers*, vol. 8, no. 8, Art. no. 8, Aug. 2016, doi: 10.3390/polym8080281.
[63] A. Zadehnazari, “Metal oxide/polymer nanocomposites: A review on recent advances in fabrication and applications,” *Polymer-Plastics Technology and Materials*, vol. 62, no. 5, pp. 655–700, Mar. 2023, doi: 10.1080/25740881.2022.2129387.
[64] S. Li, Meng Lin ,Meng, Toprak ,Muhammet S., Kim ,Do Kyung, and M. and Muhammed, “Nanocomposites of polymer and inorganic nanoparticles for optical and magnetic applications,” *Nano Reviews*, vol. 1, no. 1, p. 5214, Jan. 2010, doi: 10.3402/nano.v1i0.5214.
[65] D. Feldman, “Polymer Nanocomposite Barriers,” *Journal of Macromolecular Science, Part A*, Jan. 2013, Accessed: Jul. 01, 2025. [Online]. Available: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10601325.2013.768440
[66] S. Singha and M. S. Hedenqvist, “A Review on Barrier Properties of Poly(Lactic Acid)/Clay Nanocomposites,” *Polymers*, vol. 12, no. 5, Art. no. 5, May 2020, doi: 10.3390/polym12051095.
[67] A. Ghazzy, R. R. Naik, and A. K. Shakya, “Metal–Polymer Nanocomposites: A Promising Approach to Antibacterial Materials,” *Polymers*, vol. 15, no. 9, Art. no. 9, Jan. 2023, doi: 10.3390/polym15092167.
[68] R. Islam, S. Maparathne, P. Chinwangso, and T. R. Lee, “Review of Shape-Memory Polymer Nanocomposites and Their Applications,” *Applied Sciences*, vol. 15, no. 5, Art. no. 5, Jan. 2025, doi: 10.3390/app15052419.
[69] S. N. Perevislov, “Structure, Properties, and Applications of Graphite-Like Hexagonal Boron Nitride,” *Refract Ind Ceram*, vol. 60, no. 3, pp. 291–295, Sep. 2019, doi: 10.1007/s11148-019-00355-5.

[70] J. Chen *et al.*, "Tribological properties of *h*-BN matrix solid-lubricating composites under elevated temperatures," *Tribology International*, vol. 148, p. 106333, Aug. 2020, doi: 10.1016/j.triboint.2020.106333.
[71] S. Ramteke and H. Chelladurai, "Examining the role of hexagonal boron nitride nanoparticles as an additive in the lubricating oil and studying its application," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanomaterials, Nanoengineering and Nanosystems*, vol. 234, no. 1–2, pp. 19–36, Mar. 2020, doi: 10.1177/2397791420911811.
[72] "Recent Progress in the Study of Thermal Properties and Tribological Behaviors of Hexagonal Boron Nitride-Reinforced Composites." Accessed: Jan. 13, 2025. [Online]. Available: https://www.mdpi.com/2504-477X/4/3/116
[73] M. R. Abdul Karim, M. A. Khan, A. U. Zaman, and A. Hussain, "Hexagonal boron nitride-based composites: an overview of processing approaches and mechanical properties," *J. Korean Ceram. Soc.*, vol. 60, no. 1, pp. 1–23, Jan. 2023, doi: 10.1007/s43207-022-00251-8.
[74] K. Zhang, Y. Feng, F. Wang, Z. Yang, and J. Wang, "Two dimensional hexagonal boron nitride (2D-hBN): synthesis, properties and applications," *J. Mater. Chem. C*, vol. 5, no. 46, pp. 11992–12022, Nov. 2017, doi: 10.1039/C7TC04300G.
[75] S. Castelletto, F. A. Inam, S. Sato, and A. Boretti, "Hexagonal boron nitride: a review of the emerging material platform for single-photon sources and the spin–photon interface," *Beilstein J. Nanotechnol.*, vol. 11, no. 1, pp. 740–769, May 2020, doi: 10.3762/bjnano.11.61.
[76] S. N. Perevislov, "Structure, Properties, and Applications of Graphite-Like Hexagonal Boron Nitride," *Refract Ind Ceram*, vol. 60, no. 3, pp. 291–295, Sep. 2019, doi: 10.1007/s11148-019-00355-5.
[77] Z. Guo, Z. Han, A. Alkandari, K. Khot, and X. Ruan, "First-principles prediction of thermal conductivity of bulk hexagonal boron nitride," *Applied Physics Letters*, vol. 124, no. 16, p. 163906, Apr. 2024, doi: 10.1063/5.0210935.
[78] C. Yu, J. Zhang, W. Tian, X. Fan, and Y. Yao, "Polymer composites based on hexagonal boron nitride and their application in thermally conductive composites," *RSC Adv.*, vol. 8, no. 39, pp. 21948–21967, Jun. 2018, doi: 10.1039/C8RA02685H.
[79] P. Strak, I. Gorczyca, and H. Teisseyre, "Bandgap Characteristics of Boron-Containing Nitrides—Ab Initio Study for Optoelectronic Applications," *Materials*, vol. 17, no. 20, Art. no. 20, Jan. 2024, doi: 10.3390/ma17205120.
[80] "Boron Nitride Coated Three-Dimensional Graphene as an Electrically Insulating Electromagnetic Interference Shield | IEEE Conference Publication | IEEE Xplore." Accessed: Jan. 13, 2025. [Online]. Available: https://ieeexplore.ieee.org/document/8880119?utm_source=chatgpt.com
[81] J. Ren, L. Stagi, and P. Innocenzi, "Hydroxylated boron nitride materials: from structures to functional applications," *J Mater Sci*, vol. 56, no. 6, pp. 4053–4079, Feb. 2021, doi: 10.1007/s10853-020-05513-6.
[82] Z. Zheng, M. Cox, and B. Li, "Surface modification of hexagonal boron nitride nanomaterials: a review," *J Mater Sci*, vol. 53, no. 1, pp. 66–99, Jan. 2018, doi: 10.1007/s10853-017-1472-0.
[83] W. Zhou, J. Zuo, X. Zhang, and A. Zhou, "Thermal, electrical, and mechanical properties of hexagonal boron nitride–reinforced epoxy composites," *Journal*

of Composite Materials, vol. 48, no. 20, pp. 2517–2526, Aug. 2014, doi: 10.1177/0021998313499953.
[84] A. Bhat *et al.*, "Review on nanocomposites based on aerospace applications," *Nanotechnology Reviews*, vol. 10, no. 1, pp. 237–253, Jan. 2021, doi: 10.1515/ntrev-2021-0018.
[85] A. Shahbaz *et al.*, "17 - Polymer nanocomposites for biomedical applications," in *Smart Polymer Nanocomposites*, N. Ali, M. Bilal, A. Khan, T. A. Nguyen, and R. K. Gupta, Eds., in Micro and Nano Technologies. , Elsevier, 2023, pp. 379–394. doi: 10.1016/B978-0-323-91611-0.00012-8.
[86] M. S. A. Darwish, M. H. Mostafa, and L. M. Al-Harbi, "Polymeric Nanocomposites for Environmental and Industrial Applications," *Int J Mol Sci*, vol. 23, no. 3, p. 1023, Jan. 2022, doi: 10.3390/ijms23031023.
[87] W. Wu *et al.*, "Thermally conductive composites based on hexagonal boron nitride nanosheets for thermal management: Fundamentals to applications," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 169, p. 107533, Jun. 2023, doi: 10.1016/j.compositesa.2023.107533.
[88] A. Agrawal and S. Chandrakar, "Influence of particulate surface treatment on physical, mechanical, thermal, and dielectric behavior of epoxy/hexagonal boron nitride composites," *Polymer Composites*, vol. 41, no. 4, pp. 1574–1583, Apr. 2020, doi: 10.1002/pc.25479.
[89] W. Zhou, J. Zuo, X. Zhang, and A. Zhou, "Thermal, electrical, and mechanical properties of hexagonal boron nitride–reinforced epoxy composites," *Journal of Composite Materials*, vol. 48, no. 20, pp. 2517–2526, Aug. 2014, doi: 10.1177/0021998313499953.
[90] N. Jouault, D. Zhao, and S. K. Kumar, "Role of Casting Solvent on Nanoparticle Dispersion in Polymer Nanocomposites," *Macromolecules*, vol. 47, no. 15, pp. 5246–5255, Aug. 2014, doi: 10.1021/ma500619g.
[91] "Nanocomposite: Solution Blending Method | BioRender Science Templates." Accessed: Jan. 29, 2025. [Online]. Available: https://www.biorender.com/template/nanocomposite-solution-blending-method
[92] M. Albdiry, "Effect of melt blending processing on mechanical properties of polymer nanocomposites: a review," *Polym. Bull.*, vol. 81, no. 7, pp. 5793–5821, May 2024, doi: 10.1007/s00289-023-05012-z.
[93] S. Gul, S. Arican, M. Cansever, B. Beylergil, M. Yildiz, and B. Saner Okan, "Design of Highly Thermally Conductive Hexagonal Boron Nitride-Reinforced PEEK Composites with Tailored Heat Conduction Through-Plane and Rheological Behaviors by a Scalable Extrusion," *ACS Appl. Polym. Mater.*, vol. 5, no. 1, pp. 329–341, Jan. 2023, doi: 10.1021/acsapm.2c01534.
[94] F. J. Tommasini *et al.*, "Poly (Methyl Methacrylate)-SiC Nanocomposites Prepared Through in Situ Polymerization," *Mat. Res.*, vol. 21, no. 6, Sep. 2018, doi: 10.1590/1980-5373-mr-2018-0086.
[95] V. Shukla, "Review of electromagnetic interference shielding materials fabricated by iron ingredients," *Nanoscale Adv.*, vol. 1, no. 5, pp. 1640–1671, 2019, doi: 10.1039/C9NA00108E.
[96] R. A. Hule and D. J. Pochan, "Polymer Nanocomposites for Biomedical Applications," *MRS Bulletin*, vol. 32, no. 4, pp. 354–358, Apr. 2007, doi: 10.1557/mrs2007.235.
[97] Y. Patil, U. Toti, A. Khdair, L. Ma, and J. Panyam, "Single-Step Surface Functionalization of Polymeric Nanoparticles for Targeted Drug Delivery,"

Biomaterials, vol. 30, no. 5, pp. 859–866, Feb. 2009, doi: 10.1016/j.biomaterials.2008.09.056.

[98] H. Samadian, H. Mobasheri, M. Azami, and R. Faridi-Majidi, "Osteoconductive and electroactive carbon nanofibers/hydroxyapatite nanocomposite tailored for bone tissue engineering: in vitro and in vivo studies," *Sci Rep*, vol. 10, no. 1, p. 14853, Sep. 2020, doi: 10.1038/s41598-020-71455-3.

[99] A. Soriente *et al.*, "Chitosan/hydroxyapatite nanocomposite scaffolds to modulate osteogenic and inflammatory response," *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, vol. 110, no. 2, pp. 266–272, 2022, doi: 10.1002/jbm.a.37283.

[100] J. Ran, J. Hu, L. Chen, X. Shen, and H. Tong, "Preparation and characterization of gelatin/hydroxyapatite nanocomposite for bone tissue engineering," *Polymer Composites*, vol. 38, no. 8, pp. 1579–1590, 2017, doi: 10.1002/pc.23725.

[101] M. Rahmati *et al.*, "Electrospinning for tissue engineering applications," *Progress in Materials Science*, vol. 117, p. 100721, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.pmatsci.2020.100721.

[102] M. Mushtaq *et al.*, "Composite of PLA Nanofiber and Hexadecyl Trimethyl-Ammonium Chloride-Modified Montmorillonite Clay: Fabrication and Morphology," *Coatings*, vol. 10, no. 5, p. 484, May 2020, doi: 10.3390/coatings10050484.

[103] L. Chen *et al.*, "Zinc Doped Synthetic Polymer Composites for Bone Regeneration: A Promising Strategy to Repair Bone Defects," *IJN*, vol. 20, pp. 8567–8586, Jul. 2025, doi: 10.2147/IJN.S512994.

[104] T. T. Madanagopal, S. V. Agarwalla, and V. Rosa, "3 - Carbon nanocomposites for implant dentistry and bone tissue engineering," in *Applications of Nanocomposite Materials in Dentistry*, A. M. Asiri, Inamuddin, and A. Mohammad, Eds., in Woodhead Publishing Series in Biomaterials. , Woodhead Publishing, 2019, pp. 47–63. doi: 10.1016/B978-0-12-813742-0.00003-1.

[105] N. D. Bikiaris *et al.*, "Recent Advances in the Investigation of Poly(lactic acid) (PLA) Nanocomposites: Incorporation of Various Nanofillers and their Properties and Applications," *Polymers*, vol. 15, no. 5, p. 1196, Feb. 2023, doi: 10.3390/polym15051196.

[106] G. Canché-Escamilla, S. Duarte-Aranda, and M. Toledano, "Synthesis and characterization of hybrid silica/PMMA nanoparticles and their use as filler in dental composites," *Materials Science and Engineering: C*, vol. 42, pp. 161–167, Sep. 2014, doi: 10.1016/j.msec.2014.05.016.

[107] O. Agboola *et al.*, "Polymer Nanocomposites for Advanced Automobile Applications," in *Research Anthology on Synthesis, Characterization, and Applications of Nanomaterials*, IGI Global Scientific Publishing, 2021, pp. 1353–1387. doi: 10.4018/978-1-7998-8591-7.ch056.

[108] A. K. Naskar, J. K. Keum, and R. G. Boeman, "Polymer matrix nanocomposites for automotive structural components," *Nat Nanotechnol*, vol. 11, no. 12, pp. 1026–1030, Dec. 2016, doi: 10.1038/nnano.2016.262.

[109] V. Shah, J. Bhaliya, G. Patel, and K. Deshmukh, "Advances in polymeric nanocomposites for automotive applications: A review," *Polymers for Advanced Technologies*, vol. 33, pp. 3023–3048, Jun. 2022, doi: 10.1002/pat.5771.

[110] V. Shah, J. Bhaliya, G. M. Patel, and K. Deshmukh, “Advances in polymeric nanocomposites for automotive applications: A review,” *Polymers for Advanced Technologies*, vol. 33, no. 10, pp. 3023–3048, 2022, doi: 10.1002/pat.5771.

[111] A. K. Chandra and N. R. Kumar, “Polymer Nanocomposites for Automobile Engineering Applications,” in *Properties and Applications of Polymer Nanocomposites: Clay and Carbon Based Polymer Nanocomposites*, D. K. Tripathy and B. P. Sahoo, Eds., Berlin, Heidelberg: Springer, 2017, pp. 139–172. doi: 10.1007/978-3-662-53517-2_7.

[112] A. Kiziltas, W. Liu, S. Tamrakar, and D. Mielewski, “Graphene nanoplatelet reinforcement for thermal and mechanical properties enhancement of bio-based polyamide 6, 10 nanocomposites for automotive applications,” *Composites Part C: Open Access*, vol. 6, p. 100177, Oct. 2021, doi: 10.1016/j.jcomc.2021.100177.

[113] S. Parihar and B. Gaur, “High performance self-healing polymeric nanocomposite coatings,” *Progress in Organic Coatings*, vol. 182, p. 107626, Sep. 2023, doi: 10.1016/j.porgcoat.2023.107626.

[114] M. I. S. Chowdhury, Y. S. Autul, S. Rahman, and M. E. Hoque, “11 - Polymer nanocomposites for automotive applications,” in *Advanced Polymer Nanocomposites*, M. E. Hoque, K. Ramar, and A. Sharif, Eds., in Woodhead Publishing in Materials. , Woodhead Publishing, 2022, pp. 267–317. doi: 10.1016/B978-0-12-824492-0.00010-6.

[115] S. Maharjan and A. H. Jayatissa, “Application of Nanocomposites in the Automotive Industry,” in *Applications of Nanocomposites*, CRC Press, 2022.

[116] P. Kozioł, S. Labocha, and T. Tański, “Review of nanocomposites in aerospace industry”.

[117] R. Vargas-Bernal and M. Tecpoyotl-Torres, “Nanocomposites for Space Applications: A Review,” in *Research Anthology on Synthesis, Characterization, and Applications of Nanomaterials*, I. R. Management Association, Ed., IGI Global, 2021, pp. 1681–1705. doi: 10.4018/978-1-7998-8591-7.ch070.

[118] joseph silverman, D. Astaire, and A. Siraeva, “Applications of Nanocomposites and Polymeric Materials in the Aerospace Industry,” in *2024 Regional Student Conferences*, in AIAA Regional Student Conferences. , American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2024. doi: 10.2514/6.2024-85611.

[119] J. Njuguna, K. Pielichowski, and J. Fan, “Polymer nanocomposites for aerospace applications,” in *Advances in Polymer Nanocomposites*, Elsevier, 2012, pp. 472–539. doi: 10.1533/9780857096241.3.472.

[120] Mark Hilburger, “Superlightweight Aerospace Composites - NASA.” Accessed: Apr. 08, 2025. [Online]. Available: https://www.nasa.gov/superlightweight-aerospace-composites/

[121] C. Merceron, “All the benefits of graphene for the aerospace industry,” Carbon Waters. Accessed: Apr. 08, 2025. [Online]. Available: https://www.carbon-waters.com/en/aerospace-how-does-graphene-meet-the-sectors-challenges/

[122] C. M. Manjunatha and S. Srihari, “A Brief Review on the Fatigue Behavior of Continuous Fiber Reinforced Thermosetting Epoxy Polymer Based Nanocomposites,” *Trans Indian Natl. Acad. Eng.*, vol. 7, no. 2, pp. 501–507, Jun. 2022, doi: 10.1007/s41403-022-00320-8.

[123] G. Romhany and G. Szebenyi, “Interlaminar fatigue crack growth behavior of MWCNT/carbon fiber reinforced hybrid composites monitored via newly developed acoustic emission method,” *Express Polym. Lett.*, vol. 6, no. 7, pp. 572–580, 2012, doi: 10.3144/expresspolymlett.2012.60.
[124] M. B. Öztürkmen, Y. Öz, and N. Dilsiz, “Physical and mechanical properties of graphene and h-Boron nitride reinforced hybrid aerospace grade epoxy nanocomposites,” *Journal of Applied Polymer Science*, vol. 140, no. 45, p. e54639, 2023, doi: 10.1002/app.54639.
[125] C. Yue, L. Guan, X. Zhang, Y. Wang, and L. Weng, “Thermally conductive epoxy/boron nitride composites with high glass transition temperatures for thermal interface materials,” *Materials & Design*, vol. 212, p. 110190, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.matdes.2021.110190.
[126] T. S. Muzata, A. Gebrekrstos, J. T. Orasugh, and S. S. Ray, “An overview of recent advances in polymer composites with improved UV-shielding properties,” *Journal of Applied Polymer Science*, vol. 140, no. 14, p. e53693, 2023, doi: 10.1002/app.53693.
[127] E. Toto, L. Lambertini, S. Laurenzi, and M. G. Santonicola, “Recent Advances and Challenges in Polymer-Based Materials for Space Radiation Shielding,” *Polymers*, vol. 16, no. 3, Art. no. 3, Jan. 2024, doi: 10.3390/polym16030382.
[128] T. Peng *et al.*, “Polymer Nanocomposite-based Coatings for Corrosion Protection,” *Chemistry – An Asian Journal*, vol. 15, no. 23, pp. 3915–3941, 2020, doi: 10.1002/asia.202000943.
[129] M. H. Al-Saleh and U. Sundararaj, “Electromagnetic interference shielding mechanisms of CNT/polymer composites,” *Carbon*, vol. 47, no. 7, pp. 1738–1746, Jun. 2009, doi: 10.1016/j.carbon.2009.02.030.
[130] Y. Yu *et al.*, “Enhanced Electromagnetic Interference Shielding Properties of CNT/Carbon Composites by Designing a Hierarchical Porous Structure,” *Nanomaterials*, vol. 14, no. 13, Art. no. 13, Jan. 2024, doi: 10.3390/nano14131099.
[131] K. Shahzad *et al.*, “Views on Radiation Shielding Efficiency of Polymeric Composites/Nanocomposites and Multi-Layered Materials: Current State and Advancements,” *Radiation*, vol. 3, no. 1, pp. 1–20, Dec. 2022, doi: 10.3390/radiation3010001.
[132] P. R. De Oliveira *et al.*, “Novel polyimide-hexagonal boron nitride nanocomposites for synergistic improvement in tribological and radiation shielding properties,” *Tribology International*, vol. 189, p. 108936, Nov. 2023, doi: 10.1016/j.triboint.2023.108936.
[133] J. Wei *et al.*, “Machine learning in materials science,” *InfoMat*, vol. 1, no. 3, pp. 338–358, 2019, doi: 10.1002/inf2.12028.
[134] G. Rebala, A. Ravi, and S. Churiwala, “Machine Learning Definition and Basics,” in *An Introduction to Machine Learning*, G. Rebala, A. Ravi, and S. Churiwala, Eds., Cham: Springer International Publishing, 2019, pp. 1–17. doi: 10.1007/978-3-030-15729-6_1.
[135] I. H. Sarker, “Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications and Research Directions,” *SN COMPUT. SCI.*, vol. 2, no. 3, p. 160, May 2021, doi: 10.1007/s42979-021-00592-x.
[136] J. Peng, E. C. Jury, P. Dönnes, and C. Ciurtin, “Machine Learning Techniques for Personalised Medicine Approaches in Immune-Mediated

Chronic Inflammatory Diseases: Applications and Challenges," *Front. Pharmacol.*, vol. 12, Sep. 2021, doi: 10.3389/fphar.2021.720694.
[137] K. Gurney, *An Introduction to Neural Networks*. London: CRC Press, 2018. doi: 10.1201/9781315273570.
[138] W. Sha and K. L. Edwards, "The use of artificial neural networks in materials science based research," *Materials & Design*, vol. 28, no. 6, pp. 1747–1752, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.matdes.2007.02.009.
[139] P. H. Sydenham and R. Thorn, Eds., *Handbook of measuring system design*. Chichester: Wiley, 2005.
[140] L. Shukla, "Designing Your Neural Networks," Medium. Accessed: Jan. 30, 2025. [Online]. Available: https://towardsdatascience.com/designing-your-neural-networks-a5e4617027ed
[141] P. H. Thike, Z. Zhao, P. Shi, and Y. Jin, "Significance of artificial neural network analytical models in materials' performance prediction," *Bull Mater Sci*, vol. 43, no. 1, p. 211, Dec. 2020, doi: 10.1007/s12034-020-02154-y.
[142] J. Li, J. Cheng, J. Shi, and F. Huang, "Brief Introduction of Back Propagation (BP) Neural Network Algorithm and Its Improvement," in *Advances in Computer Science and Information Engineering*, D. Jin and S. Lin, Eds., Berlin, Heidelberg: Springer, 2012, pp. 553–558. doi: 10.1007/978-3-642-30223-7_87.
[143] M. M. Bejani and M. Ghatee, "A systematic review on overfitting control in shallow and deep neural networks," *Artif Intell Rev*, vol. 54, no. 8, pp. 6391–6438, Dec. 2021, doi: 10.1007/s10462-021-09975-1.
[144] X. Ying, "An Overview of Overfitting and its Solutions," *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 1168, no. 2, p. 022022, Feb. 2019, doi: 10.1088/1742-6596/1168/2/022022.
[145] K. Choudhary *et al.*, "Recent advances and applications of deep learning methods in materials science," *npj Comput Mater*, vol. 8, no. 1, pp. 1–26, Apr. 2022, doi: 10.1038/s41524-022-00734-6.
[146] W. H. Lopez Pinaya, S. Vieira, R. Garcia-Dias, and A. Mechelli, "Convolutional neural networks," in *Machine Learning*, Elsevier, 2020, pp. 173–191. doi: 10.1016/B978-0-12-815739-8.00010-9.
[147] "A Convolutional Neural Network for Impact Detection and Characterization of Complex Composite Structures." Accessed: Jan. 31, 2025. [Online]. Available: https://www.mdpi.com/1424-8220/19/22/4933
[148] P. Monchot *et al.*, "Deep Learning Based Instance Segmentation of Titanium Dioxide Particles in the Form of Agglomerates in Scanning Electron Microscopy," *Nanomaterials*, vol. 11, no. 4, Art. no. 4, Apr. 2021, doi: 10.3390/nano11040968.
[149] Y. Bai *et al.*, "Recognition of Nanocomposites Agglomeration in Scanning Electron Microscopy Image with Semantic Segmentation Algorithm," in *2020 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP)*, Oct. 2020, pp. 374–377. doi: 10.1109/CEIDP49254.2020.9437466.
[150] S. A. Marhon, C. J. F. Cameron, and S. C. Kremer, "Recurrent Neural Networks," in *Handbook on Neural Information Processing*, M. Bianchini, M. Maggini, and L. C. Jain, Eds., Berlin, Heidelberg: Springer, 2013, pp. 29–65. doi: 10.1007/978-3-642-36657-4_2.
[151] I. Malashin, V. Tynchenko, A. Gantimurov, V. Nelyub, and A. Borodulin, "Applications of Long Short-Term Memory (LSTM) Networks in Polymeric

Sciences: A Review," *Polymers (Basel)*, vol. 16, no. 18, p. 2607, Sep. 2024, doi: 10.3390/polym16182607.
[152] M. J. Song, S. Kim, S. H. Oh, P. S. Jo, and J. M. Lee, "Soft Sensor for Melt Index Prediction Based on Long Short-Term Memory Network," *IFAC-PapersOnLine*, vol. 55, no. 7, pp. 857–862, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.ifacol.2022.07.552.
[153] S. Goswami, R. Ghosh, A. Neog, and B. Das, "Deep learning based approach for prediction of glass transition temperature in polymers," *Materials Today: Proceedings*, vol. 46, pp. 5838–5843, 2021, doi: 10.1016/j.matpr.2021.02.730.
[154] S.-C. Huang and T.-H. Le, "Chapter 2 - Neural networks," in *Principles and Labs for Deep Learning*, S.-C. Huang and T.-H. Le, Eds., Academic Press, 2021, pp. 27–55. doi: 10.1016/B978-0-323-90198-7.00006-9.
[155] L. Joel and W. Doorsamy, "A Review of Missing Data Handling Techniques for Machine Learning," Sep. 2022, doi: 10.15157/IJITIS.2022.5.3.971-1005.
[156] K. Cabello-Solorzano, I. Ortigosa de Araujo, M. Peña, L. Correia, and A. J. Tallón-Ballesteros, "The Impact of Data Normalization on the Accuracy of Machine Learning Algorithms: A Comparative Analysis," in *18th International Conference on Soft Computing Models in Industrial and Environmental Applications (SOCO 2023)*, P. García Bringas, H. Pérez García, F. J. Martínez de Pisón, F. Martínez Álvarez, A. Troncoso Lora, Á. Herrero, J. L. Calvo Rolle, H. Quintián, and E. Corchado, Eds., Cham: Springer Nature Switzerland, 2023, pp. 344–353. doi: 10.1007/978-3-031-42536-3_33.
[157] M. Xiao *et al.*, "Addressing Overfitting Problem in Deep Learning-Based Solutions for Next Generation Data-Driven Networks," *Wireless Communications and Mobile Computing*, vol. 2021, no. 1, p. 8493795, 2021, doi: 10.1155/2021/8493795.
[158] A. Jierula, S. Wang, T.-M. Oh, and P. Wang, "Study on Accuracy Metrics for Evaluating the Predictions of Damage Locations in Deep Piles Using Artificial Neural Networks with Acoustic Emission Data," *Applied Sciences*, vol. 11, no. 5, Art. no. 5, Jan. 2021, doi: 10.3390/app11052314.
[159] Y. Anagun, S. Isik, M. Olgun, O. Sezer, Z. B. Basciftci, and N. G. A. Arpacioglu, "The classification of wheat species based on deep convolutional neural networks using scanning electron microscope (SEM) imaging," *Eur Food Res Technol*, vol. 249, no. 4, pp. 1023–1034, Apr. 2023, doi: 10.1007/s00217-022-04192-8.
[160] Y. Yang *et al.*, "Fabrication of β-cyclodextrin-crosslinked epoxy polybutadiene/hydroxylated boron nitride nanocomposites with improved mechanical and thermal-conducting properties," *Journal of Materials Research and Technology*, vol. 8, no. 6, pp. 5853–5861, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.jmrt.2019.09.056.
[161] H. Zhang, B.-G. Shin, D.-E. Lee, and K.-B. Yoon, "Preparation of PP/2D-Nanosheet Composites Using MoS2/MgCl2- and BN/MgCl2-Bisupported Ziegler–Natta Catalysts," *Catalysts*, vol. 10, no. 6, p. 596, May 2020, doi: 10.3390/catal10060596.
[162] G. Xu, J. Lin, X. Gao, C. Yu, C. Tang, and Y. Huang, "Modification of boron nitride aerogels with APTES for enhanced iodine capture performance," *Ceramics International*, vol. 50, no. 15, pp. 27111–27119, Aug. 2024, doi: 10.1016/j.ceramint.2024.04.436.

[163] D. S. Muratov, D. V. Kuznetsov, I. A. Il'inykh, I. N. Burmistrov, and I. N. Mazov, "Thermal conductivity of polypropylene composites filled with silane-modified hexagonal BN," *Composites Science and Technology*, vol. 111, pp. 40–43, May 2015, doi: 10.1016/j.compscitech.2015.03.003.
[164] C. Gautam and S. Chelliah, "Methods of hexagonal boron nitride exfoliation and its functionalization: covalent and non-covalent approaches," *RSC Adv.*, vol. 11, no. 50, pp. 31284–31327, 2021, doi: 10.1039/D1RA05727H.
[165] Z. Lin, Y. Liu, K. Moon, and C.-P. Wong, "Enhanced thermal transport of hexagonal boron nitride filled polymer composite by magnetic field-assisted alignment," in *2013 IEEE 63rd Electronic Components and Technology Conference*, May 2013, pp. 1692–1696. doi: 10.1109/ECTC.2013.6575801.
[166] Department of Metallurgical and Material Engineering, Ondokuz Mayıs University, Ö. Demircan, N. R. Ansaroudi, Department of Metallurgical and Material Engineering, Ondokuz Mayıs University, F. B. Uzunoğlu, and Department of Nanoscience and Nanotechnology, Ondokuz Mayıs University, "Tensile and flexural properties of MWCNT-COOH and hBN integrated polyamide 66/short glass fiber composites," *Res. Eng. Struct. Mater.*, 2021, doi: 10.17515/resm2021.334me0822.
[167] A. Aghajani, M. Ehsani, R. Khajavi, M. Kalaee, and D. Zaarei, "Thermally conductive and mechanically strengthened bio-epoxy/boron nitride nanocomposites: The effects of particle size, shape, and combination," *Polymer Composites*, vol. 43, no. 12, pp. 9027–9039, 2022, doi: 10.1002/pc.27081.
[168] Y. Yan *et al.*, "Effects of h-BN content and silane functionalization on thermal conductivity and corrosion resistance of h-BN/EPN coating," *Surface and Coatings Technology*, vol. 476, p. 130185, Jan. 2024, doi: 10.1016/j.surfcoat.2023.130185.
[169] M. Honglin *et al.*, "Effects of hBN content and particle size on microstructure, mechanical and tribological properties of NiCr-Cr3C2-hBN coatings," *Surface and Coatings Technology*, vol. 478, p. 130330, Feb. 2024, doi: 10.1016/j.surfcoat.2023.130330.
[170] S. Abbasi and S. Aravamudhan, "Effect of boron nitride (hBN) filler on thermal properties of underfill epoxy," in *2017 16th IEEE Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems (ITherm)*, May 2017, pp. 251–259. doi: 10.1109/ITHERM.2017.7992479.
[171] G. Marom, "Why Do Nanoparticles (CNTs) Reduce the Glass Transition Temperature of Nanocomposites?," *Journal of Composites Science*, vol. 7, no. 3, Art. no. 3, Mar. 2023, doi: 10.3390/jcs7030114.
[172] O. A. Serenko, V. I. Roldughin, A. A. Askadskii, E. S. Serkova, P. V. Strashnov, and Z. B. Shifrina, "The effect of size and concentration of nanoparticles on the glass transition temperature of polymer nanocomposites," *RSC Adv.*, vol. 7, no. 79, pp. 50113–50120, Oct. 2017, doi: 10.1039/C7RA08152A.
[173] R. R. de S. Barnasky, J. C. Frankowiak, C. V. Opelt, and L. A. F. Coelho, "Percolation Threshold and Depression in Properties of Polymer Nanocomposites," *Mat. Res.*, vol. 25, p. e20220137, Sep. 2022, doi: https://doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2022-0137.
[174] A. Farahani, M. Jamshidi, and M. Foroutan, "Effects of functionalization and silane modification of hexagonal boron nitride on

thermal/mechanical/morphological properties of silicon rubber nanocomposite," *Sci Rep*, vol. 13, no. 1, p. 11915, Jul. 2023, doi: 10.1038/s41598-023-39203-5.
[175] J. Chen, B. Chen, J. Li, X. Tong, H. Zhao, and L. Wang, "Enhancement of mechanical and wear resistance performance in hexagonal boron nitride-reinforced epoxy nanocomposites," *Polymer International*, vol. 66, no. 5, pp. 659–664, 2017, doi: 10.1002/pi.5296.
[176] Y. Zare, K. Y. Rhee, and D. Hui, "Influences of nanoparticles aggregation/agglomeration on the interfacial/interphase and tensile properties of nanocomposites," *Composites Part B: Engineering*, vol. 122, pp. 41–46, Aug. 2017, doi: 10.1016/j.compositesb.2017.04.008.
[177] Y. Sasaki *et al.*, "Nanoparticle-Based Tough Polymers with Crack-Propagation Resistance," *Langmuir*, vol. 39, no. 26, pp. 9262–9272, Jul. 2023, doi: 10.1021/acs.langmuir.3c01226.
[178] H. Shin, S. Yang, J. Choi, S. Chang, and M. Cho, "Effect of interphase percolation on mechanical behavior of nanoparticle-reinforced polymer nanocomposite with filler agglomeration: A multiscale approach," *Chemical Physics Letters*, vol. 635, pp. 80–85, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.cplett.2015.06.054.
[179] A. Govorov, D. Wentzel, S. Miller, A. Kanaan, and I. Sevostianov, "Electrical conductivity of epoxy-graphene and epoxy-carbon nanofibers composites subjected to compressive loading," *International Journal of Engineering Science*, vol. 123, pp. 174–180, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.ijengsci.2017.11.014.
[180] A. Eryilmaz, H. Y. Ünal, and Y. Pekbey, "Investigation of the Effect of Hexagonal Boron Nitride Addition on the Mechanical Properties of Flax Fiber-Reinforced Composite Materials," *Gazi University Journal of Science Part A: Engineering and Innovation*, vol. 11, no. 3, pp. 577–588, Sep. 2024, doi: 10.54287/gujsa.1533769.
[181] M. Haghgoo, A. Alidoust, R. Ansari, and M. K. Hassanzadeh-Aghdam, "Percolation mechanism of the graphene nanoplatelets/elastomeric flexible sensing nanocomposite under an applied compressive strain," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 362, p. 114677, Nov. 2023, doi: 10.1016/j.sna.2023.114677.
[182] A. Thapliyal, R. K. Khar, and A. Chandra, "Artificial Neural Network Modelling of Green Synthesised Silver Nanoparticles in Bentonite/Starch Bio-Nanocomposite," *CNANO*, vol. 14, no. 3, pp. 239–251, Apr. 2018, doi: 10.2174/1573413713666171103103141.
[183] X. Liu, S. Tian, F. Tao, and W. Yu, "A review of artificial neural networks in the constitutive modeling of composite materials," *Composites Part B: Engineering*, vol. 224, p. 109152, Nov. 2021, doi: 10.1016/j.compositesb.2021.109152.

EK- A
MODEL AÇIK KAYNAK KODU

1. https://github.com/sametarica/ANN

TEZDEN ÜRETİLMİŞ YAYINLAR

Konferans Bildirileri

1. Arıca, S. (2024). Optimization of Hexagonal Boron Nitride (hBN) Epoxy Nanocomposites using Artificial Neural Networks. *In Proceedings of the* VI. International Ege Composite Materials Symposium, (p. 168). Paper ID: 6632.