

**Yüksek Sıcaklık ve Yapısal Uygulamalar için
Alüminit Tabanlı Çok Bileşenli İntermetaliklerin
Geliştirilmesi, Modellenmesi ve Karakterizasyonu**

Proje No: MAG-COST535-104M323

Prof.Dr. M. Vedat AKDENİZ
Prof.Dr. Amdulla O. MEKHRABOV

EYLÜL 2008
ANKARA

ÖNSÖZ

Avrupa Birliđi Ülkelerinin ÷lkemizin de üyesi bulunduđu European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research, COST teřkilatı bünyesinde gerekleřtirdikleri “*Thermodynamics of Alloyed Aluminides*” (THALU) konulu **COST 535** giriřimi erevesinde önerilen ve TÜBİTAK tarafından 3 senelik süre ile desteklenen bu proje ile, intermetalik bileřenler temelinde mühendislik ve yapısal uygulamalar için yeni alařımlar geliřtirilmesi, alüminit tabanlı intermetaliklerin termodinamik özelliklerinin modellenmesi, yapılması planlanan yeni teorik ve deneysel yaklařımlardan alınan veriler ile literatürde hali hazırda bulunan verilerin de deđerlendirildiđi uluslararası bir bilimsel ve termodinamik altyapı yaratılması amaçlanmıřtır.

Uluslararası bir platformda koordineli ve organize olarak gerekleřtirilen bu alıřma, řu anda mevcut olandan daha fazla alařım sisteminin anlaşılmasına olanak tanımakla kalmayıp, özellikle uzun vadeli yapısal kararlılık ve ikili sistemlere ilave edilen alařım elementi/elementlerinin ok bileřenli sistemlerdeki etkilerinin hem teorik hemde deneysel olarak arařtırılmasını konu almaktadır.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	2
İÇİNDEKİLER.....	3
TABLO ve ŞEKİL LİSTELERİ.....	4
ÖZET.....	7
ABSTRACT.....	8
1. GİRİŞ.....	9
2. GENEL BİLGİLER.....	11
2.1. Alüminyum Esaslı İntermetalikler (Alüminitler).....	13
3. TEORİK ÇALIŞMALAR.....	17
3.1. Modelleme ve Bilgisayar Simülasyonları.....	17
3.2. Fe-Al Alaşım Sistemi.....	18
3.3. Ni-Al Alaşım Sistemi.....	20
3.3.1. Ni ₃ Al Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Sürecinin Karakterizasyonu.....	23
3.3.2. Ni ₃ Al Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Süreçlerinin Değerlendirilmesi.....	24
3.3.3. Ni ₃ Al Alaşım Sisteminde Sıcaklığın ve Al Konsantrasyonunun Düzenlenme Özelliklerine Etkisi..	26
3.4. Ti-Al Alaşım Sistemi.....	28
3.4.1. TiAl Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Enerjilerinin Hesaplanması ve MC Simülasyonu....	29
3.4.2. TiAl Alaşım Sisteminde Alaşım Elementlerinin Kafes Pozisyonu Tercihleri.....	34
3.4.3. TiAl Alaşım Sisteminde Kafes Pozisyonu Tercihlerinin Düzenlenme Enerjileri ile Açıklanması....	35
3.4.4. TiAl Alaşım Sisteminde Alaşım Eklentilerinin Kümeleşmesi.....	36
3.5. Fe-Al-X Alaşım Sistemi.....	39
3.5.1. B2-tip Düzenli Yapıdaki A-B-C üçlü İntermetalliklerde Atomların Düzenlenme Süreçleri.....	39
3.5.2. B2-tip Düzenli Yapıdaki Fe-Al-X üçlü Alaşımalarında Atomların Düzenlenme Süreçleri.....	41
4. DENEYSEL ÇALIŞMALAR.....	46
4.1. Fe-Al-X İntermetaliklerinde Alaşım Elementi İlavesinin Düzen-Düzensizlik Faz Dönüşüm Sıcaklıklarına Etkisi.....	46
4.1.1. Deneysel Yöntem.....	47
4.1.2. Deneysel Bulgular ve Tartışma.....	49
4.2. Hızlı Soğutulmuş Fe-Al-Cr-C Alaşımındaki Katılma Mikroyapıları ve Karbür Biçimleri.....	67
4.2.1. Deneysel Yöntem.....	68
4.2.2. Deneysel Bulgular ve Tartışma.....	69
5. SONUÇLAR.....	77
KAYNAKÇA.....	79
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU.....	84

TABLO ve ŞEKİL LİSTELERİ

Tablo 2.1. Bazı intermetaliklerin kristal yapıları ve fiziksel özellikleri (ANTON et al., 1989).....	12
Şekil 2.1. (a) Ni ₃ Al bileşiğine ait L12 kristal yapısı; köşe atomları alüminyum, yüzey merkezi atomları nikel. (b) NiAl bileşiğine ait B2 kristal yapısı; köşe atomları nikel, yüzey merkezi atomları alüminyum.....	14
Şekil 2.2. (a) TiAl bileşiğine ait L10 kristal yapısı (b) Ti ₃ Al bileşiğine ait D019 kristal yapısı.....	14
Şekil 2.3. (a) FeAl bileşiğine ait B2 kristal yapısı (b) Fe ₃ Al bileşiğine ait D03 kristal yapısı.....	14
Tablo 2.2. Ni, Fe ve Ti tabanlı alüminitlerin malzeme özellikleri (PRAKASH et al., 1991).....	15
Şekil 3.1. Fe _{0,5} Al alaşımı için düzenlenme enerjisinin, W(R _i), atomlararası mesafeye, (R), göre değişimi	19
Şekil 3.2. Ni ₃ Al alaşımı için düzenlenme enerjisinin, W(R _i), atomlararası mesafeye, (R), göre 300 C sıcaklığındaki değişimi.....	21
Tablo 3.1. Ni-Al atomik çiftleri için hesaplanan kısmi düzenlenme enerjileri.....	22
Şekil 3.3. Ni ₃ Al alaşım sisteminde LRO parametresinin düzensiz durumdan uzun mesafe düzenine geçişinin MC basamaklarına göre gelişimi	24
Şekil 3.4. Ni ₃ Al alaşım sisteminde SRO parametrelerinin düzensiz durumdan kısa mesafe düzenine geçişinin MC basamaklarına göre gelişimi (a) ÇALIŞTIRMA1, (b) ÇALIŞTIRMA2 ve (c) ÇALIŞTIRMA3	25
Şekil 3.5. Ni ₃ Al alaşım sisteminde atomik düzenlenme parametrelerinin sıcaklık ve Al konsantrasyonu ile değişimi (a) LRO parametresi ve (b) SRO parametresi	27
Şekil 3.7. Ti-Al (noktalı çizgiler), Ti-M (kesikli çizgiler) ve Al-M (kesiksiz çizgiler) çiftlerinin Ti ₅₀ Al ₄₉ M ₁ alaşımındaki kısmi düzenlenme enerjilerinin mesafe ile değişimi. Birinci, ikinci ve üçüncü KÇ'ler soldan sağa sıralı olarak, dikey, noktalı çizgiler ile belirtilmiştir. Şekli yalınlaştırmak amaçlı, her KÇ'nin sadece daha küçük boyutlu olan alt çeperi belirtilmiştir.	30
Tablo 3.2. Ti ₅₀ Al ₄₉ M ₁ alaşımındaki ilk KÇ kısmi düzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon çeperinin daha küçük boyutlu alt çeperi için verilmiştir.	31
Tablo 3.3. Ti ₅₀ Al ₄₉ M ₁ alaşımındaki ikinci KÇ kısmi düzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon çeperinin daha küçük boyutlu alt çeperi için verilmiştir.	31
Tablo 3.4. Ti ₅₀ Al ₄₉ M ₁ alaşımındaki üçüncü KÇ kısmi düzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon çeperinin daha küçük boyutlu alt çeperi için verilmiştir.....	32
Tablo 3.5. L ₁₀ yapısındaki ilk üç koordinasyon çeperi, ikişer-ikişer olacak şekilde toplamda altı alt çepere bölünmüştür. Orijindeki atoma göre ilgili alt çeper mesafeleri ve koordinasyon sayıları altı farklı tür olarak listelenmiştir.	32
Şekil 3.8. Sistemin durum takibinin α_1 , α_2 ve α_3 kısa mesafeli düzenlenme parametreleri ile yapılması, bu şekilde, Ti ₅₀ Al _{50-X} Mo _X , (X = 1 ve X = 5) alaşımı ile örnelemiştir.	33
Şekil 3.9. M alaşım elementlerinin Ti ₅₀ Al _{50-X} M _X (X = 1, 2, 3, 4 ve 5) içerisindeki kafes pozisyonu tercihleri periyodik bir düzen ile verilmiştir.....	35
Tablo 3.6 Pozisyon tercihi ve çözünme modu kriterleri	36

Şekil 3.10. Hf atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde bir kümeleşme göstermeksizin çözünmüştür (Mod I). Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.	37
Şekil 3.11. Cr atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde düzlemsel bir kümeleşme göstermektedir (Mod II). Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.	37
Şekil 3.12. Ag atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde bir üç boyuta yayılmış bir kümeleşme göstermektedir (Mod III), Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.	38
Şekil 3.13. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımı için düzenlenme enerjisinin, $W(R_i)$, atomlararası mesafeye, (R), göre değişimi, ($X \equiv Co$).....	42
Tablo 3.7. $A_{0.5}(B_{1-n}C_n)_{0.5}$ alaşımındaki ilk KÇ kısmi düzenlenme enerjileri ($A \equiv Fe$, $B \equiv Al$, $C \equiv X$) ve $n = 0.01$ atomik konsantrasyon.....	43
Tablo 3.8. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için ilk koordinasyon küresindeki kısmi kısa mesafe düzenlenme parametreleri.....	43
Tablo 3.9. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için normalize edilmiş sıcaklık değişimleri, $\Delta T/T_o$, ($T_o = 1523$ K).....	44
Şekil 4.1 Fe-Al faz diyagramı [32].	46
Tablo 4.1. Alaşımlarda kullanılan elementlerin saflık yüzdeleri.....	48
Tablo 4.2. Üçlü Fe-Al-X alaşımlarının elemental analiz sonuçları	48
Şekil 4.2. Isıl işlem görmüş ikili Fe-40Al alaşımına ait mikroyapı fotoğrafları; (a) SEM (b) Optik mikroskop	49
Şekil 4.3. Isıl işlem görmüş ikili Fe-50Al, Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarına ait X-Işınları spektrumu.....	49
Şekil 4.4. Isıl işlem görmüş ikili Fe-50Al, Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarına ait termal analiz grafikleri.	50
Şekil 4.5. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ni üçlü alaşımlarının optik mikroskop mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Ni (b) Fe-47Al-3Ni (c) Fe-45Al-5Ni	51
Şekil 4.6. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Cr üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Cr (b) Fe-47Al-3Cr (c) Fe-45Al-5Cr.....	51
Şekil 4.7. Değişik bileşime sahip üçlü ısıl işlem görmüş alaşım mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Nb (b) Fe-47Al-3Nb (c) Fe-45Al-5Nb	52
Şekil 4.8. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Hf (b) Fe-47Al-3Hf (c) Fe-45Al-5Hf (d) Fe-43Al-7Hf (e) Fe-41Al-9Hf.....	52
Şekil 4.9. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Mo (b) Fe-47Al-3Mo (c) Fe-45Al-5Mo	53
Şekil 4.10. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Ta (b) Fe-47Al-3Ta (c) Fe-45Al-5Ta	54
Şekil 4.11. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Zr alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Zr (b) Fe-47Al-3Zr (c) Fe-45Al-5Zr.	54
Şekil 4.12 Fe-47Al-3Zr alaşımı mikro yapı fotoğrafında görülen (a) koyu renkli birincil kristalleşmiş Fe-Al esaslı faza ait elemental analiz (b) açık renkli Laves fazına ait elemental analiz.	54

Şekil 4.13. Fe-45Al-5Zr alaşımı mikro yapı fotoğrafında görülen koyu renkli birincil kristalleşmiş Laves fazına ait elemental analiz.....	55
Şekil 4.14. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Cr alaşımlarının XRD örnekleri.....	56
Şekil 4.15. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Ni alaşımlarının XRD örnekleri.....	56
Şekil 4.16. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.....	57
Şekil 4.17. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Nb üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.....	57
Şekil 4.18. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.....	58
Şekil 4.19. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.....	58
Şekil 4.20. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Mn alaşımlarının XRD örnekleri.....	59
Şekil 4.21. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-W alaşımlarının XRD örnekleri.....	59
Şekil 4.22 Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Zr alaşımlarının XRD örnekleri.....	60
Şekil 4.23. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ni alaşımlarının DSC eğrileri.....	61
Şekil 4.24. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Cr alaşımlarının DSC eğrileri.....	61
Şekil 4.25. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf alaşımlarının DSC eğrileri.....	62
Şekil 4.26. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo alaşımlarının DSC eğrileri.....	62
Şekil 4.27. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta alaşımlarının DSC eğrileri.....	62
Şekil 4.28. Isıl işlem görmüş Fe-Al-W alaşımlarının DSC eğrileri.....	63
Şekil 4.29. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mn alaşımlarının DSC eğrileri.....	63
Şekil 4.30. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Zr alaşımlarının DSC eğrileri.....	63
Tablo.4.3. Fe-Al-X alaşımlarının deneysel olarak belirlenen faz dönüşüm sıcaklıkları.....	64
Şekil 4.31. İkili FeAl alaşımının solidus sıcaklığının üçüncül alaşım ilavesinin türü ve miktarı ile değişimi.....	65
Şekil 4.32. İkili FeAl alaşımının likuidus sıcaklığının üçüncül alaşım ilavesinin türü ve miktarı ile değişimi.....	66
Tablo 4.4. Üçüncül alaşım elementi ilavesinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarına etkisinin teorik tahminler (Tablo 3.9.) ve proje kapsamında elde edilen deneysel sonuçlarla kıyaslanması ($T_0=1523K$).....	67
Table 4.5. Deneysel çalışmalarda kullanılan alaşımların nominal kompozisyonları (at.%).....	69
Şekil 4.33. Geleneksel ingot döküm yöntemiyle üretilmiş numunelerin katılaşma yapıları (a) Alaşım A, (b) Alaşım A1, (c) Alaşım A2 ve (d) Alaşım A3.....	70
Şekil 4.34. Eriyik emme yöntemiyle hızlı katılaştırılmış numunelerin katılaşma yapıları (a) Alaşım A, (b) Alaşım A1, (c) Alaşım A2 ve (d) Alaşım A3.....	71
Şekil 4.35. Geleneksel ingot döküm yöntemiyle üretilmiş numunelerdeki karbürlerin X-ışınları kırınım analizi.....	72
Şekil 4.36. Fe ₃ AlC karbürlerinin dağılımı ve morfolojisinin SEM görüntüleri (a) Alaşım A1, (b) Alaşım A2 ve Cr ₇ C ₃ karbürleri ve (c) Alaşım A3.....	73
Şekil 4.37. Hızlı katılaştırılmış ve 1200 °C de 2 saat ısıl işlem gördükten sonra havada ve suda soğutulmuş numunelerin SEM görüntüsü (a) Alaşım A1, (b) Alaşım A2 ve (c) Alaşım A3.....	75
Şekil 4.38. Hızlı katılaştırılmış A-A3 alaşımlarında I(200)/I(400) X-ışınları toplam yoğunluk değerlerinin oranı.....	76

ÖZET

İntermetalik bileşikler son yıllarda yüksek sıcaklık ve aktif/saldırğan ortamlarda mühendislik ve yapısal uygulamaları için potansiyel adaylar olarak görülmektedirler. İlgi çeken intermetalik bileşiklerin büyük bölümü esas bileşen olarak Al içermektedirler ve bunlar **alüminit** olarak bilinirler. Alüminit tabanlı intermetalikler sahip oldukları nadir malzeme özellikleri ve davranışlarıyla da yapısal seramikler ile ikincil bir fazla güçlendirilmiş katı çözelti esaslı bilinen metalik alaşımlar arasında yerini alan yeni sınıf mühendislik malzemeleri olarak değerlendirilmektedir.

Alüminitlerin sahip oldukları eşsiz fiziksel-kimyasal ve mekanik özellikleri, bu malzemelerde bulunan çeşitli uzun erimli düzenli süperkafesler (LRO), kısa erimli düzenli halleri (SRO) ve bu malzemelerde meydana gelen düzenli-düzenli ve/veya düzenli-düzensiz faz dönüşümleri sebebiyle ortaya çıkmaktadır. Bundan dolayı alüminitlerin yapısal özellikleri alaşım stokiometrisi ve eklenen alaşım elementinin çeşitine bağlı olduğu ortaya çıkmaktadır. Atomal açıdan bakıldığında fiziksel-kimyasal ve mekanik özelliklerdeki gelişim genel olarak alaşım elementi atomlarının düzenli kristal süperkafesin mikron altı boyutlardaki hacminde dağılımına, başka bir deyişle geniş sıcaklık aralıklarında alüminitlerdeki LRO ve SRO oluşumlarının enerjetik ve yapısal karakteristiklerine bağlıdır. Bu anlamda alüminitlerdeki uzun erimli düzenli halinin korunabildiği sıcaklıklar, yüksek sıcaklık özelliklerinin korunabilmesi için düzenli-düzenli ve/veya düzenli-düzensiz faz dönüşümü sıcaklıklarının değişikliği açısından üstün bir öneme sahiptir.

Bilimsel programın merkezinde çok bileşenli Al-Fe-Ni-Ti sistemi bulunan projenin ana hedefi bu dört bileşenli sistemin tamamen anlaşılması ve sistemin güvenilir bir termodinamik açıklamasının yapılmasıdır. Bu amaçla, seçilen dördü sistem alt sistemleri olan Fe-Al, Ni-Al ve Ti-Al bazlı ikili ve üçlü intermetalik sistemlerinde LRO ve SRO karakteristiklerinin eklenen alaşım elementinin çeşidi ve miktarına bağlı olarak nasıl değiştiği, düzenliliğin istatistik termodinamik teorisi ile çok bileşenli alaşımların elektronik teorisi ve düzenlilik oluşumunun kinetiğini atomistik hesaplamalarla birleştirerek, Monte Carlo gibi modelleme ve simülasyon yöntemleri kullanılarak incelenmiş ve modelleme çalışmaları, fazların ve faz dengelerinin fiziksel özellikleri ve karakterizasyonu ile ilgili yoğun deneysel çalışmalarla desteklenmiştir.

Anahtar Kelimeler : İntermetalik bileşikler, alüminitler, Fe-Al, Ni-Al, Ti-Al, alaşım sistemleri

ABSTRACT

Intermetallic compounds have, for some time, been considered as potential candidates for use as materials for high temperature in hostile environment applications. Many of the compounds of interest involve aluminium as the main component, and are known as aluminides. The ordered intermetallic alloys based on aluminides occupy an intermediate position between structural ceramics and the usual metallic alloys based on solid solutions with second phase strengtheners. This intermediate behaviour provides both the promises and the difficulties associated with the use of intermetallics as structural materials.

The unique physico-chemical and mechanical properties of aluminides are attributed mainly to the presence of various types of Long-Range Ordered (LRO) superlattices, Short-Range Ordered (SRO) states, order-order and/or order-disorder phase transformations occurring in these intermetallics. It appears that structural properties of aluminides strongly depend on the deviation from alloy stoichiometry and type and content of constituent alloying elements addition. From an atomistic point of view it seems most likely that the improvement of the observed physico-chemical and mechanical properties would be mainly associated with the distribution of atoms of alloying elements in the sub-micro volume of ordered crystal superlattices, i.e. energetical and structural characteristic of LRO and SRO processes in aluminides at the wide temperature ranges. In this respect, the temperature up to which the various LRO state can be preserved in aluminides are of paramount importance for the modification of order-order and/or order-disorder phase transition temperatures in order to retain the elevated temperature properties.

The main objective of this project is to create the thermodynamic platform, which is crucial for the development of new alloys based on intermetallic compounds. The quaternary Al-Fe-Ni-Ti system has been selected as the core system of the scientific programme. The effect of type and content of the alloying element additions on the LRO and SRO (sub-lattice occupancy) characteristics of Fe-Al, Ni-Al and Ti-Al based binary, ternary and quaternary intermetallics with various type of ordered structures will be investigated by combining the statistical-thermodynamical theory of ordering with the electronic theory of multicomponent alloys. Atomistic calculation such as Monte-Carlo has also been considered to study the kinetics of ordered processes in these systems. The modelling approaches have also been supported by intense experimental studies of thermodynamic and physical properties of the individual phases, as well as of phase equilibria.

Key words: Intermetallics, aluminide, Fe-Al, Ni-Al, Ti-Al, alloy systems

1. GİRİŞ

Son yıllarda, öncelikle yüksek sıcaklık olmak üzere çeşitli mühendislik ve yapısal uygulamaları için hafif intermetalik bileşiklerin geliştirilmesine yönelik, özellikle alüminitlerin, termodinamik ve fiziksel özellikleri üzerinde çok yoğun çalışmalar yapılmaktadır. Ancak bu çalışmalar, genel olarak ilgi çeken bazı ikili sistemler üzerinde odaklanmasına karşın, üçlü ve/veya daha fazla bileşenli sistemlerin modellenmesi ve karakterizasyonu konusunda oldukça sınırlıdır. Örneğin, hem akademisyenlerin hemde endüstrinin yaygın bir şekilde kullandığı “*Yeni hafif alaşımlar üretimi için veri tabanı sağlamaya yönelik termokimyasal ve termofiziksel özelliklerin tanımı*” konulu **COST 507** girişimi sonucunda oluşturulan mevcut alüminyum veritabanı, sadece birkaç önemli endüstriyel alaşım sınırlı olup, çoğu zaman intermetalik bileşikler çok basit bir şekilde irdelemekte ve değerlendirmektedir. Dolayısı ile bu konuda uluslararası bir platformda koordineli ve organize olarak gerçekleştirilecek yeni bir girişim, şu anda mevcut olandan daha fazla alaşım sisteminin anlaşılmasına olanak tanımakla kalmayıp, özellikle uzun vadeli yapısal kararlılık ve ikili sistemlere ilave edilen alaşım elementi/elementlerinin çok bileşenli sistemlerdeki etkilerinin hem teorik hemde deneysel olarak araştırılması sonucunda, alüminit tabanlı çok bileşenli birtakım yeni intermetaliklerin mühendislik malzemesi olarak geliştirilmesini hızlandıracaktır.

Avrupa Birliği Ülkelerinin ülkemizin de üyesi bulunduğu COST teşkilatı bünyesinde gerçekleştirdikleri “*Thermodynamics of Alloyed Aluminides*” (THALU) konulu **COST 535** girişimi bu alanda şimdiye kadar ulusal düzeyde bireysel olarak yapılan çalışmalarını daha organize ve uluslararası düzeyde bir şemsiye altında toplamayı hedeflemektedir. Bu kapsamda yapılması planlanan uluslararası bir çalışmanın “*İntermetalik tabanlı Malzemelerin Bulunurluğunun ve Kalitesinin Geliştirilmesi*” konulu **COST 513** ve “*21. yy.’da Güç/Enerji Üretimi: Ultra Verimli, Düşük Emisyonlu Tesis*” konulu **COST 522** girişimleri ile de aynı doğrultuda ve birbirlerini tamamlayan projeler şeklinde olmasına da dikkat edilmiştir.

Avrupa Birliği, European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research, COST, çerçevesinde önerilen bu proje ile intermetalik bileşenler temelinde mühendislik ve yapısal uygulamalar için yeni alaşımlar geliştirilmesi, alüminit tabanlı intermetaliklerin termodinamik özelliklerinin modellenmesi, yapılması planlanan yeni teorik ve deneysel yaklaşımlardan alınan veriler ile literatürde hali hazırda bulunan verilerin de değerlendirileceği uluslararası bir bilimsel ve termodinamik platform yaratılması amaçlanmaktadır. Bu temel amaç çerçevesi içerisinde beklenen sonuç, yeni malzeme geliştirme çalışmaları için çok önemli olan tutarlı ve birbirine bağlı modellerle, malzeme özelliklerini tahmin ve karakterize edebilmektir.

Yukarıda amaçlanan hedefler doğrultusunda çalışma ağının merkezine koyulmak üzere Al-Fe-Ni-Ti dördümlü alaşım sistemi seçilmiştir. Bu seçimin sebebi teknolojik açıdan en önemli alüminitleri kapsayan Fe-Al, Ti-Al, ve Ni-Al sistemlerinin, seçilen dördümlü sistemin alt sistemleri olmasıdır. Al içeren ve belirtilen sistemi sınırlayan bütün üçlü alaşım sistemleri, uygulama açısından önemlidir. Öte yandan, Al-Fe-Ni-Ti sistemindeki intermetalik bileşikler hakkında ortaya çıkarılacak yeni bilgiler Ni esaslı, Al esaslı, Ti esaslı alaşımların davranışlarının daha fazla anlaşılır olmasını sağlayacaktır. Buradaki amaç orta ve yüksek sıcaklık aralıklarında bulunan faz karışımlarının doğası hakkında ve alaşım ilavelerinin bunlar üzerindeki etkileri hakkında tahmin olacaktır.

Alüminitlerin sahip oldukları eşsiz fiziksel-kimyasal ve mekanik özellikleri, bu malzemelerde bulunan çeşitli uzun erimli düzenli süperkafesler (LRO), kısa erimli düzenli halleri (SRO) ve bu malzemelerde meydana gelen düzenli-düzenli ve/veya düzenli-düzensiz faz dönüşümleri sebebiyle ortaya çıkmaktadır. Bundan dolayı alüminitlerin yapısal özellikleri alaşım stokiometrisi ve eklenen alaşım elementinin çeşitine bağlı olduğu ortaya çıkmaktadır. Atomsal açıdan bakıldığında fiziksel-kimyasal ve mekanik özelliklerdeki gelişim genel olarak alaşım elementi atomlarının düzenli kristal süperkafesin mikron altı boyutlardaki hacminde dağılımına, başka bir deyişle geniş sıcaklık aralıklarında alüminitlerdeki LRO ve SRO oluşumlarının enerjetik ve yapısal karakteristiklerine bağlıdır. Bu anlamda alüminitlerdeki uzun erimli düzenli halinin korunabildiği sıcaklıklar, yüksek sıcaklık özelliklerinin korunabilmesi için düzenli-düzenli ve/veya düzenli-düzensiz faz dönüşümü sıcaklıklarının değişikliği açısından üstün bir öneme sahiptir.

Bu amaçla, proje/araştırma konusu intermetalik sistemlerde LRO ve SRO karakteristiklerinin eklenen alaşım elementinin çeşidi ve miktarına bağlı olarak nasıl değiştiği, düzenliliğin istatistik termodinamik teorisi ile çok bileşenli alaşımların elektronik teorisi ve düzenlilik oluşumunun kinetiğini atomistik hesaplamalarla birleştirerek, Monte Carlo, Moleküler Dinamik gibi modelleme ve simülasyon yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. Bu kapsamda gerçekleştirilen teorik yaklaşımlar ve modelleme çalışmaları Fe-Al, Ni-Al ve Ti-Al gibi basitleştirilmiş model alaşımlarda uygulanmış olup, daha sonra bu çalışmalar alaşım ilavelerinin ana sisteme ilaveleri ile genişletilmiştir. Öte yandan modelleme çalışmaları fazların ve faz dengelerinin fiziksel özellikleri ve karakterizasyonu ile ilgili yoğun deneysel çalışmalarla desteklenmiştir.

2. GENEL BİLGİLER

Düzenli intermetalikler, düzenlenme sıcaklığı denilen kritik bir sıcaklığın altında uzun menzilli (erişimli) düzenli kristal yapıya sahip, genellikle dar kompozisyon aralıklarında ve basit stokiometrik oranların yakınında ara bileşik (oranlı ara faz) olarak ortaya çıkan ve az bulunur malzeme özellikleriyle de yapısal seramikler ile ikincil bir fazla güçlendirilmiş katı çözeltili esaslı bilinen metalik alaşımlar arasında yerini alan yeni sınıf mühendislik malzemeleri olarak değerlendirilmektedir.

Intermetalikler genel olarak iki grupta toplanırlar (LIU et al., 1990):

- *Normal valans bileşikleri:* Valans kurallarına uygun biçimde oluşurlar. Örneğin, Mg_3Sb_2 , Mg_3Bi_2 . Bu tip bileşikler genellikle metalik özelliği kuvvetli bir metal (ör, Mg) ile metalik özelliği zayıf bir metalin (Sb, Sn, Bi...) birleşmesinden meydana gelirler. Bu tip bileşiklerin çoğu bileşiği meydana getiren metallere daha yüksek erime noktası değerlerine sahiptir.
- *Elektron bileşikleri:* Valans kurallarına uymayacak şekilde oluşurlar. Bu tip intermetaliklerde bir molekülde toplam atom sayısı ile toplam valans bağı sayısında sabit bir oran vardır (toplam valans sayısı/toplam atom sayısı). Hume-Rothery oranları olarak bilinen bu ilişki 3'e ayrılır.
 - 3/2 oranı (21/14) → β yapıları ($CuZn$, Cu_3Al , Cu_5Sn , Ag_3Al ,...)
 - 21/13 oranı → γ yapıları (Cu_5Zn_8 , Cu_9Al_4 , $Cu_{31}Sn_8$, Ag_5Zn_8 ,...)
 - 7/4 oranı (21/12) → ϵ yapıları ($CuZn_3$, Cu_3Sn , $AgCd_3$, Ag_5Al_3 ,...)

Bunlara ek olarak yukarıdaki gruplara girmeyen birçok intermetalik bulunmaktadır (HIGGINS, 1973). Birim kafes araştırmaları yapılarak intermetaliklerin karbür, nitür ve borür bileşiklerinden farklı oldukları bulunmuştur. Buna göre, bu tip bileşikler düzenli yapılarında az sayıda stokiometrik orandaki iki elementten oluşmaktadır. Genel olarak A ve B gibi iki elementten oluşan A_3B , A_2B , AB , A_7B_6 ve A_5B_3 kompozisyonuna sahip beş farklı stokiometrik oran grubunda sınıflandırılırlar. Her bir gruptaki bileşikler farklı kristal yapıya sahiptirler. Tablo 2.1.'de bazı kristal yapılar ve özellikleri gösterilmektedir (ANTON et al., 1989).

Düzenli intermetalikler yüksek ergime noktalarına sahip olup benzer olmayan metal atomları arasındaki sıkı bağları nedeniyle de yüksek sıcaklıklarda oldukça kararlıdır. Yüksek sıcaklıklarda intermetalikliğin oluşturan saf bileşenlere kıyasla yüksek dayanç ve bükülmezlik (stiffness) gibi üstün mekanik özelliklerin yanısıra saldırgan ve yıpratıcı ortamlardaki sahip oldukları davranış ve malzeme özellikleri, teknolojinin ve araştırmacıların yoğun ilgisini özellikle yüksek sıcaklık yapısal uygulamaları için bu malzemeler üzerine çekmektedir (YAMAGUCHI et al., 2000; KOCH et al., 1985; STOLOFF et al., 1987). Örneğin TiAl intermetalikliğinin dayanıcı 600 °C ye kadar 450 MPa seviyesindedir ve ancak bu sıcaklığın üzerinde düşmeye başlar (LIPSITT et al., 1975). Ayrıca Ni_3Al için sıcaklığın artmasıyla akma dayanıcının arttığı gözlemlenmiştir (FLINN, 1960; RAY et al., 1983). Benzer bir biçimde elastikiyet sabiti düzensiz alaşımlara göre yüksek kalma ve sıcaklığın artmasıyla daha yavaş bir düşüş gösterme eğilimindedir. Bunlara ek olarak bu malzemelerin yüksek oksidasyon ve korozyon dirençleri ve görece düşük yoğunlukları yüksek dayanç ve yüksek elastikiyet sabitiyle birleştiğinde çok iyi özgül özellikler (özellik/yoğunluk oranı) ortaya çıkmaktadır. Bu özelliklerde düzenli intermetalikleri örneğin yüksek sıcaklık havacılık ve uzay uygulamaları ile bir eksen etrafında dönen makine parçalarında ve tribünlerde kullanımını çekici hale getirmektedir.

Tablo 2.1. Bazı intermetaliklerin kristal yapıları ve fiziksel özellikleri (ANTON et al., 1989).

<i>Stokiometri</i>	<i>Kristal yapı</i>	<i>Grup</i>	<i>Örnek bileşik</i>	<i>Ergime noktası (°C)</i>	<i>Yoğunluk (gr/cm³)</i>	
A₃B	L12	Geometrik sıkı paket	Ni ₃ Al	1397	7,41	
			Pt ₃ Al	1556	17,47	
	D0 ₁₉		Ti ₃ Sn	1670	5,29	
			Ti ₃ Al	1547	11,8	
	D0 ₂₂		Al ₃ Nb	1607	4,52	
	A15		Nb ₃ Al	1960	7,29	
			Mo ₃ Si	2025	8,97	
			Cr ₃ Si	1770	6,46	
	A12		α - Mn	Re ₃ Nb	2700	17,6
	A₂B		C1	Silisidler	CoSi ₂	1326
C11 _b		MoSi ₂	2030		6,31	
C14		Laves fazı	Cr ₂ Hf	1870	10,24	
			Cr ₂ Nb	1720	7,68	
C15		Topolojik sıkı paket	W ₂ Hf	2512	-	
			Co ₂ Nb	1520	9,0	
			Co ₂ Zr	1560	8,23	
			Fe ₂ Zr	1645	7,69	
C36			Mo ₂ Hf	2170	11,4	
D8 _b		Sigma fazı	Nb ₂ Al	1871	6,87	
A₅B₃	D8 _m		Mo ₅ Si ₃	2180	8,2	
	D8 ₈	Ti ₅ Si ₃	2130	4,38		
A₇B₆	D8 ₅	Mü fazı	Nb ₆ Fe ₇	1620	-	
			W ₆ Co ₇	1689	-	
AB	B2		NiAl	1640	5,88	
			FeAl	1250	5,56	

İntermetalik bileşiklerde düzenli yapılarından dolayı öz difüzyon katsayısı düzensiz alaşımlara oranla çok daha düşüktür. Düşük difüzyon hızı yüksek sıcaklıklarda mikroyapısal kararlılık açısından bazı avantajlar getirmektedir. Sürünme hızı difüzyonla orantılı olduğu için, düzenli intermetaliklerde sürünme dayancı bir miktar artar. Ayrıca yapıdaki yüksek menzilli düzenin yüksek devirli yorulma direncini arttırdığına literatürde değinilmiştir (BOETTNER et al., 1966).

Ancak birçok intermetalik normal sıcaklıklarda düşük sünekliğe sahiptir ve gevrek kırılma gösterir. Ayrıca bu malzemelerin kırılma dirençlerinin düşük olması ve şekil verme işlemlerinin belirli bir aşamaya kadar uygulanabilmesi birçok durumda intermetaliklerin mühendislik malzemesi olarak kullanılmasını engeller. Örneğin yukarıda da bahsedildiği gibi TiAl 600 °C'ye kadar yüksek dayanca sahip olmakla birlikte bu sıcaklıkta gevrek özellikler gösterir ve sünekliği ancak dayancın hızla düştüğü sıcaklık aralığında artmaya başlar (LIPSITT et al., 1975). Ayrıca Fe-Al alaşımları için alüminyum miktarı % 25 'in üstüne çıktığında oda sıcaklığında çekme sünekliği neredeyse sıfıra düşer (MARCINKOWSKI et al., 1975). Aslında bir alaşım sisteminde sünekliğin düşmesi genellikle intermetalik bileşiğin

oluşmasının ilk belirtisi olarak kabul edilir. İntermetalik bileşiklerin gevrek olmasının birçok nedeni vardır, taneler arası kırılma bu sebeplerden sadece bir tanesidir.

Son yıllarda intermetalik alaşımların gevrek kırılma davranışlarıyla ilgili birçok kapsamlı çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmalar sonucunda gevrek kırılma davranışını oluşturan sebepler ortaya çıkarılmıştır. Örneğin, yapılan çalışmalar az miktarda boron ilavesinin polikristal Ni_3Al 'a süneklik kazandırdığını göstermiş (AOKI ve IZUMI, 1979) ve boronun sünekliği arttırdığı kritik kompozisyon aralığı ortaya çıkarılmıştır (LIU et al., 1984; TAUB ve HUANG, 1984). Öte yandan, *first-principle* hesaplamalardaki ve atomistik simülasyon tekniklerindeki son gelişmeler, intermetalik alaşımlarda, atomlar arası bağlar, dislokasyonların biçimleri ve alaşımlama etkileri hakkında daha kapsamlı bilgilere ulaşmamıza yardımcı olmuştur. Araştırmacıların $TiAl$ ve Ti_3Al esaslı alaşımlarda süneklik ve dayanç değerlerini, toz metalurji ve alaşımlama tekniklerinin birlikte kullanılması yoluyla, arttırmaları sonucu düzenli alaşımların yapısal uygulamalarda kullanılması fikri tekrar ilgi görmüştür. Hızlı katılaşma metodlarının gelişmesiyle de demir ve nikel alüminatlara ilgi tekrar artmıştır. Bu yüzden fiziksel metalurji prensiplerine dayanan (mikroyapı kontrolü için tane inceltmesi) alaşım tasarımı üzerindeki paralel çalışma, gelişmiş mekanik ve metalurjik özelliklere sahip, normal ve yüksek sıcaklıklarda yapısal uygulamalarda kullanabilecek alüminit alaşımlarının geliştirilmesine sebebiyet vermiştir (AOKI ve IZUMI, 1979; PRAKASH et al., 1991).

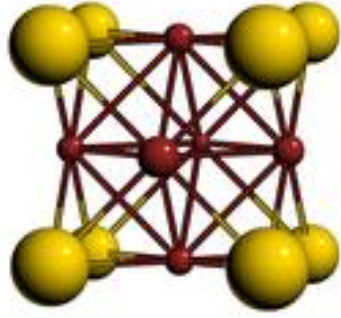
Düzenli intermetaliklerin sahip oldukları bu nadir malzeme özellikleri ve malzeme davranışları, çoğu mühendislik uygulamalarında yapısal malzemeler olarak kullanılmasına olanak sağlamakla beraber metallerin sünekliği ile seramiklerin sahip olduğu yüksek dayanç ve oksidasyon direncini birleştirmeye yönelik çabalar birçok durumda başarısız olmakta ve uygulamada bazı güçlükler yaratmaktadır.

2.1. Alüminyum Esaslı İntermetalikler (Alüminitler)

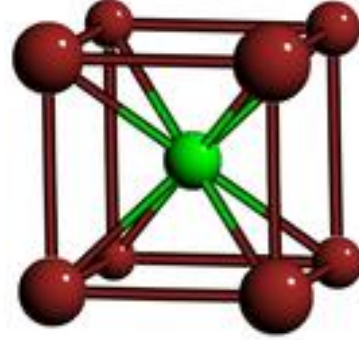
İntermetalik bileşikler bir süredir yüksek sıcaklık uygulamaları için potansiyel adaylar olarak görülmektedirler. İlgi çeken intermetalik bileşiklerin büyük bölümü esas bileşen olarak Al içermektedirler ve bunlar *alüminit* olarak bilinirler. Alüminitler, intermetalik bileşikler içinde önemli bir grubu oluştururlar. Yukarıda intermetalikler için belirtilen genel avantajların yanı sıra, oksidasyona ve korozyona karşı yüksek sıcaklıklarda, yüzeylerinde oluşturdukları koruyucu Al_2O_3 film sayesinde direnç gösterirler. Bu sebeple intermetalikler üzerindeki çalışmalar

Ni-Al (Ni_3Al and $NiAl$),
Ti-Al (Ti_3Al , $TiAl$ ve daha yeni olarak Al_3Ti)
Fe-Al ($FeAl$ and Fe_3Al)

sistemleri üzerinde yoğunlaşmıştır. Alüminitlerin çoğu belirtilen kompozisyon aralığının dışında oluşmakta ve stokiometrik oranda sapsmalar oluştuğunda düzen oranı da değişmektedir. Değişen bu düzen oranı, sözkonusu alüminitlerin malzeme özelliklerini de iyi ya da kötü yönde etkilemektedir. Bu malzemelerin bazı genel karakteristik özellikleri Tablo 2.2'de (PRAKASH et al., 1991) ve Ni-, Ti- ve Fe- alüminitlerinin kristal yapıları ise Şekil 2.1-2.3'de sırasıyla verilmektedir.

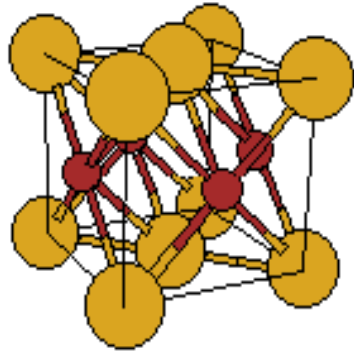


(a)

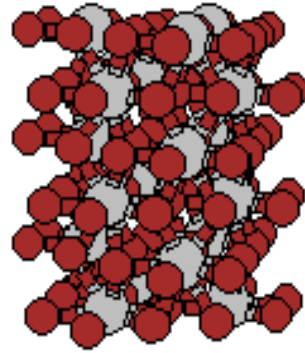


(b)

Şekil 2.1. (a) Ni_3Al bileşiğine ait L12 kristal yapısı; köşe atomları alüminyum, yüzey merkezi atomları nikel. (b) NiAl bileşiğine ait B2 kristal yapısı; köşe atomları nikel, yüzey merkezi atomları alüminyum.

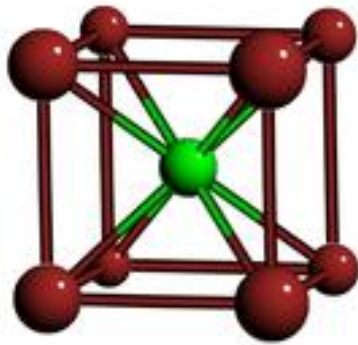


(a)

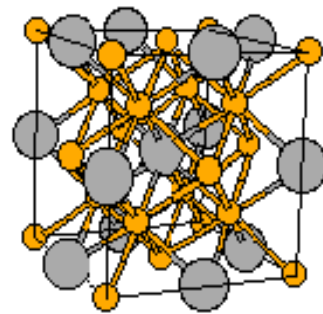


(b)

Şekil 2.2. (a) TiAl bileşiğine ait L10 kristal yapısı (b) Ti_3Al bileşiğine ait D019 kristal yapısı.



(a)



(b)

Şekil 2.3. (a) FeAl bileşiğine ait B2 kristal yapısı (b) Fe_3Al bileşiğine ait D03 kristal yapısı.

Tablo 2.2. Ni, Fe ve Ti tabanlı alüminitlerin malzeme özellikleri (PRAKASH et al., 1991)

Alaşım	Yapı	Erime sıcaklığı (°C)	Kritik Düzenlenme sıcaklığı (°C)	Akma Dayancı (MPa)	Yoğunluk (g/cm ³)	Süneklik (%)
Ni ₃ Al	L1 ₂ (ordered fcc)	1390	1390	250-500	7,50	2-50
NiAl	B2 (ordered bcc)	1640	1640	250-475	5,86	2
Fe ₃ Al	DO ₃ (ordered bcc) B2 (ordered bcc)	1540 1540	540 760	385-392	6,72	2-12
FeAl	B2 (ordered bcc)	1250	1250	360-380	5,56	2-17
Ti ₃ Al	DO ₁₉ (ordered hcp)	1600	1100	700-990	4,20	2-10
TiAl	L1 ₀ (ordered tetra)	1460	1460	400-650	3,91	1-4

Ni₃Al içeren bazı alaşımlar ve Fe-Al intermetalikleri şu anda fırın donanımlarında olduğu gibi bir kısım yapısal uygulamalarda kullanılmaktadır. Özellikle Ni₃Al bazlı alaşımlar döküm ve işleme için geliştirilmiş ve bazıları yüksek ısı fırın uygulamalarında kullanılmıştır. Boronla dope edilmiş Ni₃Al büyük ölçüde soğuk çekilebilmekte olup soğuk çekilmeye uygun ince levhalar mevcuttur. Ti-Al bazlı alaşımlar için ise çeşitli potansiyel kullanım alanları bulunmuş olup bunlar arasında uçak, otomotiv ve enerji üretimi gibi yüksek teknoloji alanları örnek verilebilir (SIKKA, 1996). Uçak motor üreticileri bu alaşımların uçak motorlarında kullanılabilirliği çalışmalarını çok yakından takip etmekte olup son zamanlarda Ti-Al bazlı alaşımlar üzerine yapılan yoğun çalışmalar TiAl tabanlı alaşımlarla üretilen parçaların, örneğin düşük basınç türbin kanatları, motorlarda kullanılması sonucu ciddi bir sınırlamanın olmadığını göstermiştir (AUSTIN et al., 1993 ve 1997). Bunun yanında otomotiv üreticileri de TiAl bazlı alaşımların otomotiv motorlarında, eksoz valflerinde ve turbocharger türbin pervanelerinde kullanılabilirlikleri ve yeterlilikleri çalışmalarını yakından takip etmektedir (TETSUI, 1999). Hatta oldukça yakın zamanlarda TiAl turbocharger türbin pervaneleri bazı özel tip ticari arabalarda kullanılmaya başlamıştır. Bu sebeplerle, yüksek sıcaklığa dayanıklı yapısal intermetalikler yapı uygulamalarında ilk sıradadırlar.

Alüminitler arasında demir alüminitler Ni ve Ti esaslı alüminitlerle karşılaştırıldığı zaman düşük mekanik özellikler göstermesine rağmen düşük maliyetleri ve kolay bulunabilir olmaları nedeniyle özellikle çekici hale gelmektedirler. Demir alüminitler mükemmel oksidasyon ve korozyon dirençleri düşük malzeme yoğunluğu ve maliyetleriyle ferritik ve östenitik paslanmaz çeliklere birçok yapısal uygulamada üstün gelmektedirler. Bu malzemelerin potansiyel uygulama alanları arasında otomobil egzoz sistemleri, rezistanslı ısıtma birimleri, buhar türbinleri, ısıtıcı tüpleri gibi enerji santrali ekipmanları, kömür gazlaştırma fabrikalarındaki sıcak gaz filtreleri, CS₂ üretim aşamalarında kullanılan konteynirler ve NH₄OH, NaOH, sitrik asit ve asetik asit tankları gibi kimyasal üretim ekipmanları, V₂O₃ içeren yakıtla temasda bulunacak fırın parçaları; ve sülfürce zengin atmosferlerde çalışacak rafineri ekipmanları sayılabilir. Son yıllarda birçok şirket demir alüminit (Fe₃Al esaslı alaşımlar) ticari olarak üretmeye veya kullanmaya başlamıştır.

Yüksek sıcaklığa dayanıklı intermetalik bileşiklerin yapısal uygulamadaki kullanılabilirlik test çalışmaları amacıyla son zamanlarda yapılan araştırmalardaki ilerlemelere ve gelişmelere

paralel olarak, bu malzemelerin temel araştırma çalışmalarında da önemli ölçüde ilerlemeler sağlanmıştır. Yapılan bu çalışmalar ana olarak alüminit tabanlı intermetaliklerin deformasyon, sürünme mekanizmaları ve özellik-mikroyapı ilişkilerinin incelenmesi konusunda yoğunlaşmaktadır.

Diğer metalik malzemelerde olduğu gibi intermetalik bileşiklerinin özelliklerinin iyileştirilmesi için ikili bileşiklere alaşım elementleri ekleyerek, diğer bir deyişle alaşımlayarak, birçok yeni mühendislik malzemesi elde edilebileceği inancı gittikçe kuvvetlenmektedir. Ancak alaşımlama kombinasyonları için sonsuz sayıda olasılık olduğu da gözardı edilmemelidir. Bu tür yeni malzemelerin geliştirilmesi deneme yanılma yoluyla yapılagelmekte olup, bu yöntem 1970 ve 1990 yılları arasında tek-kristal türbin kanatçıkları olarak kullanılmak üzere Ni-bazlı alaşımların geliştirilmesi için yaygın şekilde kullanılmıştır. Bu alaşımlar, malzemeye iyi tanımlanmış gelişmeler katan on veya daha fazla bileşen içermektedirler. Fakat, herbir bileşenin alaşıma katkısı ve etkisi tam olarak anlaşılamamıştır. Ancak, limitli termodinamik veri tabanlarının geliştirilmesi ve atomistik simülasyonlarının Ni-tabanlı alaşımların faz dönüşümlerinin tahmin edilebilmesine olduğu kadar bu malzemelerin daha da geliştirilmesine faydası olduğu/olacağı gerçeği unutulmamalıdır.

Özellikle son 10 yıldır TiAl bazlı alaşımlar konusunda, araştırma toplulukları ve sanayi kesimi arasındaki karşılıklı iyi etkileşim, bu alaşımların daha iyi araştırılmasına ve geliştirilmesine önemli ölçüde katkı sağlamıştır. Temel araştırmalardaki bu ilerlemeler ile yüksek sıcaklığa dayançlı intermetalik bileşikler konusunda yeni ilerlemeler sağlanacağı umut edilmektedir. Öte yandan yüksek sıcaklık intermetalik bileşiklere sadece yapısal uygulama alanlarında değil, aynı zamanda elektrik iletkenliği ve oksidasyon ve korozyon direnci alanlarında da kullanıcı bulmak için büyük çabalar harcanmaktadır.

Yukarıda değinildiği üzere, alüminitlerin mühendislik malzemesi olarak kullanımını kısıtlayan kırılma, oda sıcaklıklarındaki düşük süneklik, tokluk ve sünme direnci gibi mekanik özellikleri, mikroyapı ve alaşım kompozisyonlarının kontrolü ile iyileştirilmeye çalışılmaktadır. Alüminitlerin özgün fiziko-kimyasal ve mekanik özellikleri, alaşım stokiometrisinden sapmalara ve üçüncül alaşım ilavesine kuvvetli bir şekilde bağlı olup alaşımlama ve sonuç olduğu kafes tercihi durumu temel olarak, çeşitli LRO süper-örgülerini, SRO durumlarını, düzen-düzen ve/veya düzen-düzensizlik faz transformasyonlarını etkilemektedir. Atomik düzeyde gerçekleşen bu etkileşme günümüzde intermetaliklerde ve alüminitlerde en çok araştırılan konuların başındadır.

Dolayısı ile, sonraki bölümde ilk olarak, alaşımların istatistik termodinamik teorisi (Monte Carlo), alaşımların elektronik teorisi (Pseudopotansiyel yöntemi) gibi atomistik hesaplama, modelleme ve simülasyon yöntemleri kullanılarak alüminitlerin atomlararası etkileşim potansiyeli, düzenlenme (ordering) enerjisi, alt-kafes pozisyonları (sub-lattice occupancy) vb. termodinamik ve malzeme özelliklerinin teorik olarak incelendiği ve irdelendiği çalışmalar yer almaktadır.

Takip eden bölümde ise teorik çalışmalarda kullanılan/önerilen yaklaşımların ve elde edilen sonuçların doğruluğunun deneysel yöntemler ile test edildiği çalışmalar yer almaktadır. Deneysel çalışmalar temel olarak, alaşım elementi eklentilerinin ve ısıl işlemin, özellikle Fe-Al tabanlı intermetaliklerde mikroyapı gelişimine ve düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarına etkisi üzerine odaklanmıştır.

3. TEORİK ÇALIŞMALAR

3.1. Modelleme ve Bilgisayar Simülasyonları

Proje kapsamında yapılan teorik çalışmalar, teknolojik açıdan en önemli alüminitleri içeren çok bileşenli Al-Fe-Ni-Ti alaşım sisteminin alt sistemleri olan Fe-Al, Ni-Al, Ti-Al ikili, Ti-Al-X ve Fe-Al-X üçlü alaşım sistemlerinin incelenmesini ve karakterizasyonunu konu almaktadır. Bu sistemlerin ortak özellikleri belirli sıcaklık ve kompozisyon aralıklarında farklı kristal yapılı, fakat düzenli fazlar oluşturmalarıdır. Hem ikili, hem de çok-bileşenli alaşım sistemlerinde oluşan (veya oluşacak) düzenli fazların sıcaklık ve kompozisyona göre kararlılık aralıklarının, düzen-düzen ve düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarının belirlenmesi hem malzeme fiziğinin, hem de malzeme bilim ve mühendisliğinin en önemli konuları içersindedir. Bunun başlıca nedenleri, alaşım sistemlerinin fiziksel ve kimyasal (mekanik, elektiksel, manyetik, korozyon direnci, oksitleşme ve b.) özelliklerinin alaşım sistemlerindeki düzenli yapıların türlerine (DO3, B2, L12), atom düzenlenmelerinin derecelerine (LRO, SRO), düzenli fazların sıcaklık-kompozisyon diagramındaki kararlılık aralıklarına doğrudan bağlı oluşundan kaynaklanmaktadır.

Bu kapsamda, proje çerçevesinde hem ikili, hem de çok-bileşenli alaşımların istatistik-mekanik ve istatistik-termodinamik teorileri, alaşımların elektronik teorisinin psödopotansiyel yaklaşımı ile birleştirilerek geliştirilmiş yeni yöntemler kullanılarak modelleme ve bilgisayar simülasyonları gerçekleştirilmiştir. Bilgisayar simülasyonları için Monte-Carlo yönteminin farklı versiyonları kullanılmıştır.

Alaşımların istatistik-mekanik teorisine esasen, herhangi üçlü A-B-C alaşım sisteminde, seçilen herhangi bir atomun yakınındaki iç enerji, ilk l kordinasyon küresindeki atomların türleri dikkate alınarak, Ising tipi bir Hamiltonyan ile hesaplanmaktadır (ISING, 1925);

$$H = H_0 + \sum_{l=1}^4 \sum_{i,j} (W_{AB}^{(l)} S_i S_j + W_{AC}^{(l)} S_i S_j + W_{BC}^{(l)} S_i S_j) \quad (1)$$

Burada $W_{AB}^{(l)}, W_{AC}^{(l)}, W_{BC}^{(l)}$ sırası ile AB, AC ve BC atom çiftlerinin l'inci koordinasyon küresindeki kısmi düzenlenme enerjileri, $S_i (S_j)$ ise, -1, 0 ve +1 değerlerini alabilen temel spin değişkenidir. -1, 0 ve +1, l'inci koordinasyon küresinde, i(j)'inci örgü noktasında sırası ile A atomu, B atomu yada C atomunun bulunmasına karşılık gelmektedir. Bu model yalnızca farklı atomlar arasındaki etkileşimleri dikkate almaktadır ve kısmi düzenlenme enerjilerinin, düzenlenme sürecinde itici kuvvet olduğu açıktır. Bu anlamda, negatif düzenlenme enerji değerleri, sistemi düzenli oluşumlara yöneltir; bunun sebebi olarak da düzensizliğe ve hatta topaklanmaya sebep olan pozitif düzenlenme enerjilerinin aksine iç enerjide azalmaya sebep oluşudur.

Sistem Hamiltonyanı için verilen Denklem (1)'den de anlaşılacağı üzere herhangi bir alaşım sisteminde Hamiltonyanın hesaplanabilmesi için kısmi düzenlenme enerjilerinin, $W_{\alpha\alpha'}(R)$, çeşitli kordinasyon kürelerindeki değerlerine gereksinim duyulmaktadır. Fakat, farklı atom çiftleri arasındaki atomlararası etkileşim potansiyelleri ve/veya kısmi düzenlenme enerjileri alaşımların istatistik-mekanik ve istatistik-termodinamik teorilerinin tümünde teorinin bir

parametresi olduğu için bu teoriler çerçevesinde hesaplanması mümkün değildir. Bu tip enerji parametreleri alaşımların elektronik teorisinin farklı yaklaşımları kullanılarak hesaplanabilmektedir.

Psödopotansiyel yaklaşımı kullanılarak çok bileşenli alaşımların elektronik teorisi (MEKHRABOV et al., 1997; AKDENİZ ve MEKHRABOV, 1998) çalışmalarında geliştirilmiş ve kısmi düzenlenme enerjilerinin, $W_{\alpha\alpha'}(R)$, hesaplanması için aşağıdaki denklemler verilmiştir:

$$W_{\alpha\alpha'}(R_1) = \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \int_0^\infty F_{\alpha\alpha'}(q) \frac{\sin qR_1}{qR_1} q^2 dq \quad (2)$$

öyle ki,

$$F_{\alpha\alpha'}(q) = -\frac{\bar{\Omega}_0}{8\pi} \left| \omega_\alpha^0(q) - \omega_{\alpha'}^0(q) \right|^2 q^2 \frac{\varepsilon(q) - 1}{\varepsilon^*(q)} + \frac{2\pi}{\bar{\Omega}_0 q^2} \left| Z_\alpha^* - Z_{\alpha'}^* \right|^2 \exp\left(-\frac{q^2}{4\xi}\right) \quad (3)$$

Denklem (2) ve (3)'te, $\bar{\Omega}_0$ üçlü alaşımın ortalama atomik hacmi; $\varepsilon(q)$ Hartree yaklaşımındaki dielektrik sabiti; $\varepsilon^*(q)$ korelasyon ve değişim etkilerini göz önünde bulundurarak modifiye edilmiş dielektrik sabiti; $\omega_\alpha^0(q)$ ve $\omega_{\alpha'}^0(q)$, sırasıyla α ve α' bileşen iyonlarının perdelenmemiş psödopotansiyel form faktörleri; $Z_\alpha^*(Z_{\alpha'}^*)$, $\alpha(\alpha')$ bileşen atomlarının efektif valansı; ξ Ewald parametresidir.

Proje kapsamında yapılan teorik hesaplamalarda (ANIMALU, 1973) çalışmasında verilen, lokal-olmayan yalın psödopotansiyel form faktörleri *quasi-Fermi küresi yaklaşımında* kullanılmış ve (HUBBARD, 1957) tarafından geliştirilmiş dielektrik sabiti kullanılarak perdelenmişlerdir. Bunlara ek olarak, (SHAM, 1965) tarafından önerilen ve etkileşen elektron gazındaki değişim ve korelasyon etkilerinden sorumlu fonksiyon da hesaplamalarda kullanılmıştır. Denklem (2)-(3)'de kullanılan Ewald parametresinin değeri $\xi = 0.7$ olarak hesaplanmıştır.

3.2. Fe-Al Alaşım Sistemi

Psödopotansiyel yaklaşımındaki alaşımların elektronik teorisi gibi atomistik hesaplama yöntemleri kullanılarak, ilk olarak Fe-Al ikili alaşım sistemi, atomlararası etkileşim potansiyeli, düzenlenme (ordering) enerjisi, ve düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığı gibi enerjetik, yapısal, termodinamik ve malzeme özellikleri parametreleri yönünden incelenerek değerlendirmelerde bulunulmuştur.

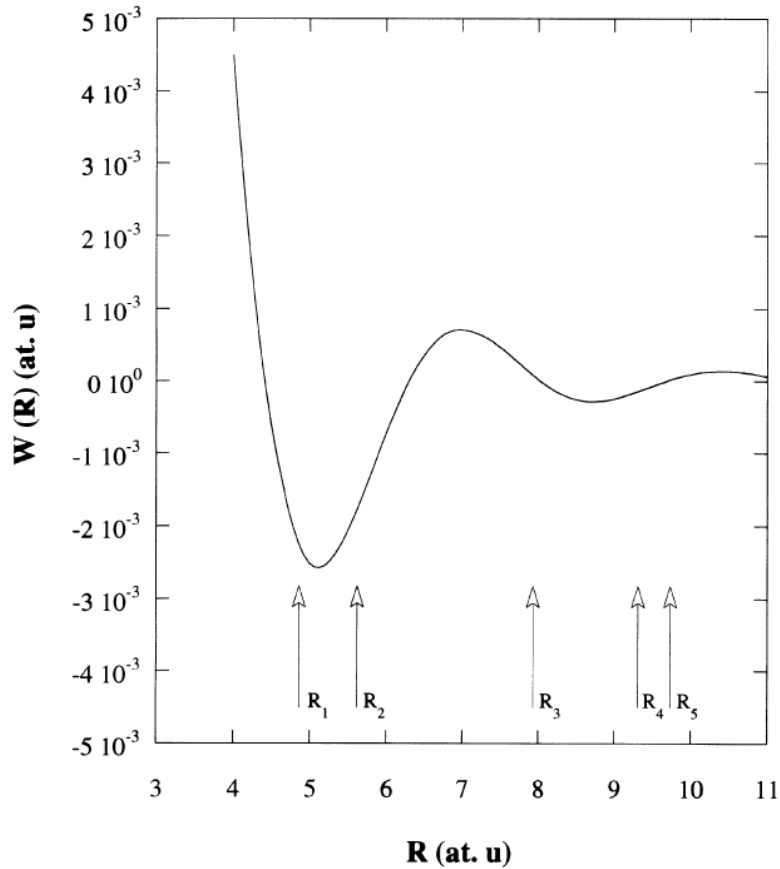
İkili intermetalik bileşiklerde, düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığını, T_0 , hesaplamak için ilk beş koordinasyon küresi için düzenlenme enerjilerinin hesaplanması gerekmektedir. Bu kapsamda (2)-(3) denklemleri kullanılarak hesaplanan düzenlenme enerjisinin, $W(R_i)$, atomlararası mesafeye, (R) , diğer bir deyişle koordinasyon kürelerine göre değişimi Şekil 3.1'de verilmektedir. Bu şekilden elde edilen enerji değerleri ise

$$\begin{aligned}
W(R_1) &= -2.98 \times 10^{-3} \\
W(R_2) &= -1.91 \times 10^{-3} \\
W(R_3) &= 3.00 \times 10^{-5} \\
W(R_4) &= -1.42 \times 10^{-4} \\
W(R_5) &= 4.35 \times 10^{-5} \quad (\text{atomic units}) \text{ olarak hesaplanmıştır.}
\end{aligned}$$

Düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığı, T_o , düzenlenme enerji değerleri kullanılarak aşağıda verilmiş denklemle hesaplanmaktadır (KHACHATURYAN, 1983).

$$T_o = -\frac{c_A c_B}{k_B} W(\bar{K}_o) \quad (4)$$

İkili $Fe_{0.5}Al$ alaşımı için hesaplanan düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığı $T_o \approx 1331 \pm 200$ K olup, deneysel olarak ölçülen sıcaklıkla büyük bir uyum içinde olduğu görülmektedir, $T_o^{(exp)} \approx 1523$ K (LIU ve KUMAR, 1993).



Şekil 3.1. $Fe_{0.5}Al$ alaşımı için düzenlenme enerjisinin, $W(R_i)$, atomlararası mesafeye, (R) , göre değişimi

Bu çalışmalara takiben, literatürde ilk defa tarafımızca Fe₃Al alaşım sisteminde

DO3 → B2 → düzensiz yapı

faz dönüşümlerindeki atomik düzenlenmelerin analizinde, psödopotansiyel yaklaşımda alaşımların elektronik teorisinin ve MC simülasyon metodunun birleştirildiği bir yöntem geliştirilmiş ve uygulanmıştır (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 2003). Bu simülasyon çalışmasının sonuçları, bahsedilen birleşik yöntemin, Fe₃Al tipi intermetaliklerin karmaşık atomik düzenlenme süreçlerinin enerji ve yapısal karakteristiklerinin nicel ve/veya yarı-nitel analizlerinde başarıyla uygulanabileceğini göstermiştir.

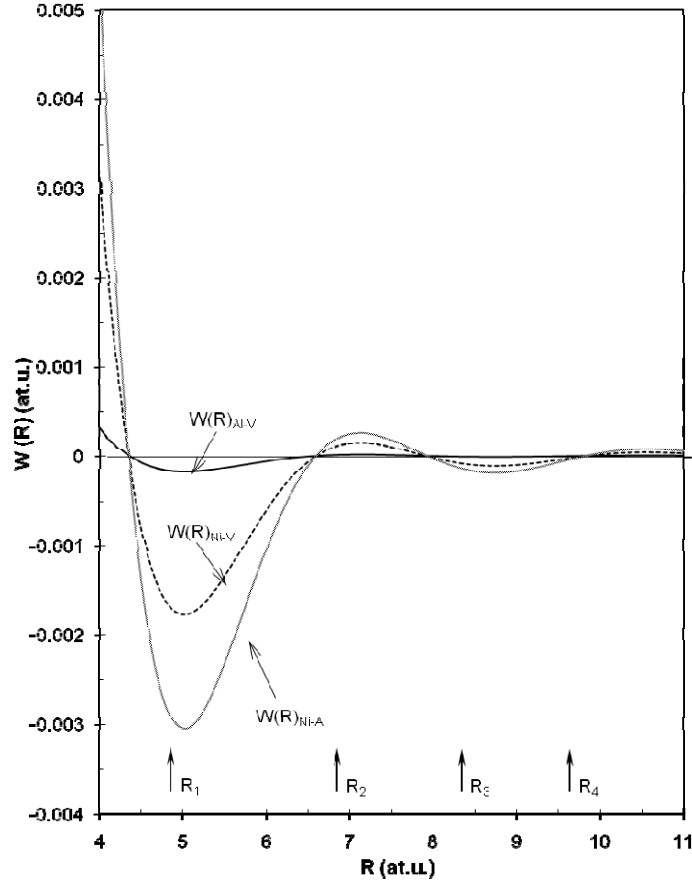
3.3. Ni-Al Alaşım Sistemi

Fe-Al sistemini konu alan teorik çalışmalardan (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 2003) elde edilen başarılı sonuç ve veriler sonrası, geliştirilen yeni teorik yaklaşım ve yöntemlerin hem doğruluğunu kanıtlamak hem de diğer alüminit tabanlı sistemlerde uygulanabilirliğini test etmek için, benzeri teorik çalışmaların Fe-Al ikili sisteminin yanı sıra Ni-Al ve Ti-Al gibi diğer bir önemli ikili model alaşım sistemlerini de kapsayacak şekilde genişletilmesi planlanılarak çalışmalara başlanmıştır.

Çok bileşenli ve ikili Ni₃Al tabanlı intermetalikler ile ilgili teorik çalışmalar, sıcaklığın, konsantrasyonun ve alaşım elementi eklemenin, alaşım sistemlerinin süper-yapı (superstructure), LRO ve SRO gibi düzenlenme karakteristikleri üzerine olan etkilerini açığa kavuşturma amaçlı olarak, “cluster variation” (CVM), MC simülasyon metodları, alaşımların elektronik teorisi ve temel ilkelerle yapılan hesaplamalar ile düzenlenme süreçlerinin kinetiğini (ENOMOTO ve HARADA, 1989; ORAMUS et al., 2004), alaşım fazlarının kararlılığını (WILSON et al., 2002), çeşitli ilave elementlerin örgü noktalarına göre dağılımını (BOZZOLO, 2002), termodinamik özelliklerini (WANG et al., 2004) vs., analiz etmeğe odaklanmıştır. Belirtilmesi gereken bir husus, CVM ve MC simülasyon metodları (BURSIK, 2004) için bilinmeyen parametreler, birinci ve ikinci kordinasyon kürelerine denk gelen düzenlenme enerjilerinin büyüklükleri veya oranlarıdır. Fakat, düzen-düzensizlik dönüşümü olayını ve atomik düzenlenme mekanizmasını gerçekçi bir şekilde açıklamak için, daha yüksek kordinasyon kürelerindeki düzenlenme enerji değerlerinin de bilinmesi gerekmektedir.

Bu çalışmada amaç, çok sayıda atom ile tek başına MC simülasyonu yaparak atomik düzenlenme işlemini tamamen açıklamaktan çok, daha önceki çalışmamızda (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 2003) önerilen metodun, L1₂ tipi FCC süper-yapısında sahip olan Ni₃Al intermetaliklerindeki düzen-düzensizlik dönüşümü olayının gelişimini için geçerliliğini onaylamaktır. MC simülasyonu için L1₂ tipi birim hücre yapısına sahip 15 x 15 x 15 boyutlarında, 13500 atom içeren bir örgü tanımlanmıştır. Klasik Metropolis/ısı banyosu algoritmasının ve periyodik sınır koşullarının geçerli olduğu, kanonik Monte Carlo metodu uygulanmıştır (BINDER, 1987).

Bu kapsamda yapılan çalışmalarda, 25 at% Al içeren Ni₃Al intermetalik bileşiği model alaşım olarak seçilerek 300 °C sıcaklıkta ilk 4 koordinasyon küresi için hesaplanan kısmi düzenlenme enerjilerinin, $W^{Ni-Al}(R)$, $W^{Al-V}(R)$ and $W^{Ni-V}(R)$, atomlararası mesafeye, diğer bir deyişle koordinasyon kürelerine göre değişimi Şekil 3.2’de verilmektedir. Ni₃Al kafes parametrelerinin sıcaklığa bağlı değişiminin deneysel ölçüm ve verileri (POPE ve GARIN, 1977) kullanılarak hesaplanan koordinasyon kürelerinin pozisyonu, (R₁), şekilde ayrıca belirtilmektedir.



Şekil 3.2. Ni₃Al alaşımı için düzenlenme enerjisinin, $W(R_i)$, atomlararası mesafeye, (R), göre 300 C sıcaklığındaki değişimi

$$(1 \text{ at. u. (energy)} = 2 Ry = 27.2 \text{ eV}; 1 \text{ at. u. (length)} = 0.529177 \text{ \AA})$$

Şekil 3.2'den de görüleceği üzere kısmi düzenlenme enerjilerinin atomlararası mesafeye göre değişimi salınımlı ve bağlı olarak işaret değiştiren bir karaktere sahiptir. Bu karakteristik değişim metalik etkileşim için bilinen bir özellik olup, Ni-Al, Al-Vacancy ve Ni-Vacancy gibi atomik çiftleri için yalnızca kısmi düzenlenme enerjilerinin büyüklüğünü değil işaretlerinin de değişebileceğini göstermektedir. Ni-Al atomik çiftleri için hesaplanan düzenlenme enerjileri, $W^{Ni-Al}(R)$, $W^{Al-V}(R)$ and $W^{Ni-V}(R)$, Tablo 3.1'de verilmektedir. Tablo 3.1'de verilen ve yukarıda bahsedilen yöntem ve yaklaşımlarla hesaplanan bu değerler, *first-principles electronic structure method of KKR-CPA-GPM* gibi çok daha sofistike yöntem ve bilgisayarlar ile T=0 K sıcaklığında L1₂ düzenine sahip Ni₃Al bileşiği için hesaplanan değerler ile kıyaslanabilir ve çok uyumlu olduğu görülmektedir (SLUITER et al., 1992).

Tablo 3.1. Ni-Al atomik çiftleri için hesaplanan kısmi düzenlenme enerjileri

Coordination Spheres (R _l), l=1,.....,4	Ordering Energies $W_{\alpha\alpha'}^{(l)} \times 10^{-4}$ (at.u.)															
	Temperature (°C)															
	25	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000	1100	1200	1300	1385	
$W_{Ni-Al}^{(l)}$	R ₁	-27,17	-27,39	-27,62	-27,81	-27,94	-28,13	-28,16	-28,27	-28,40	-28,53	-28,67	-28,85	-29,05	-29,27	-29,50
	R ₂	1,36	1,44	1,51	1,56	1,60	1,68	1,69	1,73	1,79	1,84	1,90	1,97	2,05	2,14	2,22
	R ₃	-1,28	-1,33	-1,36	-1,39	-1,41	-1,43	-1,44	-1,46	-1,49	-1,51	-1,55	-1,58	-1,61	-1,66	-1,71
	R ₄	-0,63	-0,60	-0,57	-0,55	-0,52	-0,49	-0,49	-0,45	-0,42	-0,39	-0,34	-0,30	-0,24	-0,18	-0,13
$W_{Al-V}^{(l)}$	R ₁	-1,74	-1,76	-1,77	-1,78	-1,79	-1,80	-1,80	-1,81	-1,82	-1,83	-1,83	-1,84	-1,86	-1,87	-1,88
	R ₂	0,089	0,093	0,097	0,10	0,102	0,106	0,108	0,110	0,114	0,117	0,121	0,125	0,130	0,135	0,140
	R ₃	-0,076	-0,078	-0,079	-0,080	-0,081	-0,083	-0,083	-0,085	-0,088	-0,091	-0,094	-0,098	-0,101	-0,104	-0,106
	R ₄	-0,042	-0,039	-0,036	-0,034	-0,032	-0,029	-0,029	-0,028	-0,026	-0,025	-0,023	-0,021	-0,018	-0,012	-0,007
$W_{Ni-V}^{(l)}$	R ₁	-15,30	-15,40	-15,60	-15,60	-15,70	-15,80	-15,90	-15,90	-16,00	-16,10	-16,20	-16,30	-16,40	-16,50	-16,60
	R ₂	0,77	0,81	0,85	0,88	0,90	0,94	0,95	0,97	1,00	1,03	1,07	1,11	1,15	1,20	1,24
	R ₃	-0,70	-0,72	-0,74	-0,76	-0,77	-0,78	-0,79	-0,80	-0,82	-0,84	-0,86	-0,88	-0,90	-0,92	-0,94
	R ₄	-0,36	-0,34	-0,32	-0,30	-0,29	-0,27	-0,25	-0,23	-0,21	-0,20	-0,118	-0,16	-0,14	-0,10	-0,06

3.3.1. Ni₃Al Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Sürecinin Karakterizasyonu

L1₂-tip düzenli süper örgünün birim hücresi iç içe geçmiş dört basit kübik alt örgü olarak canlandırılabilir. Bu süper örgü tipi A₃B kompozisyonunu baz alır. LRO (uzun mesafe düzeni) derecesi, η , ikili A-B alaşımında A ve B atomlarının alt örgülerde düzenli dağılımı için aşağıdaki denklemle tanımlanır (BRAGG ve WILLIAMS, 1934);

$$\eta = \frac{P_A^{(l)} - C_A}{1 - v^{(l)}} \quad (5)$$

LRO derecesi, η (Denklem (2)), $P_A^{(l)}$ olasılığının (herhangi bir alt örgüde A atomlarının bulunma ihtimali) düzensiz alaşım için C_A kompozisyonundan sapma miktarı ile orantılıdır. Bunun için η örgü popülasyon değerleri ile doğrusal orantılıdır. Stokiyometrik olmayan alaşımlar için ($C_A \neq v^{(l)}$), η her zaman 1' den az olacaktır, $v^{(l)}$ A atomlarına karşılık gelen alt örgü yerlerinin kompozisyonunu verir. Ancak, L1₂-tip düzenli yapılardaki düzenlenme sürecinin karakterizasyonunun tam anlamıyla yapılması için, SRO (kısa mesafe düzen) parametrelerinin LRO parametreleri ile birlikte dikkate alınması gerekmektedir. Bu çalışmada, Cowley-Warren SRO parametreleri (COWLEY, 1950; WARREN et al., 1951), $\alpha_{AB}(r_l)$, Ni₃Al intermetalikleri için atomik düzenin derecesinin nicel özelliklerinin l' inci kordinasyon küresine kadar (l=1-4) tanımlanmasında kullanılır;

$$\alpha_{AB}(r_l) = 1 - \frac{P_{AB}^{ij}(r_l)}{2C_A C_B} = 1 - \frac{N_{AB}^l}{N z_l C_A C_B} \quad (6)$$

Burada N_{AB}^l r_l uzaklığındaki AB çiftlerinin sayısını verir, N kristal örgü yerlerinin sayısını, z_l ise l'inci kordinasyon küresi için kordinasyon sayısını verir. $P_{AB}^{ij}(r_l)$, i 'inci örgü yerlerinin A atomları, A atomlarından r_l kadar uzakta olan j'inci örgü yerlerinin ise B atomları tarafından işgal edildiği A-B çiftinin bulunma olasılığını verir. Denklem (3)'ten görülebileceği üzere, mükemmel düzene sahip Ni₃Al alaşımları için, SRO parametreleri, α_1 , α_2 , α_3 ve α_4 sıra ile -0,33, 1,0, -0,33 ve 1,0 değerlerini alır.

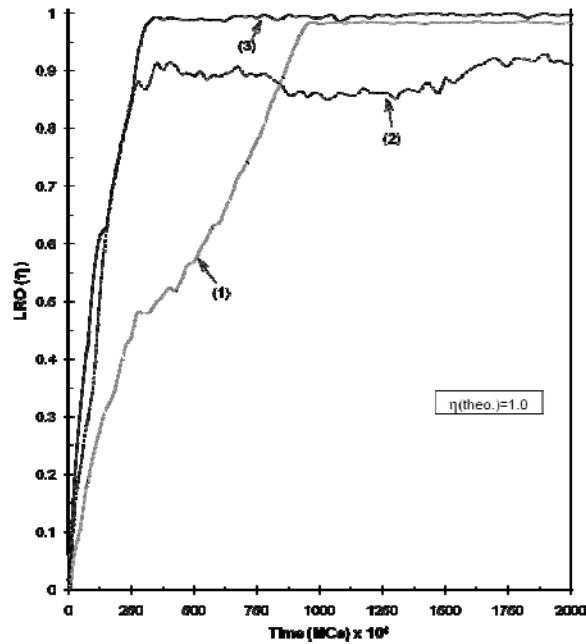
Çalıştırma kombinasyonlarından sıcaklık için, 10 tane 500' den 1385 °C' ye 100°C' lik artışlarla ve Al consantrasyonu için 24,5, 25 ve 26 at.% seçilmiştir. Her çalıştırma kombinasyonunda MC algoritması ile 20 konfigürasyon örneklenmiştir ve doğadaki süreçlere benzer rastgele olasılığı sağlayıp atomların örgüdeki ilk durumlarından kaynaklanan eğilimin önüne geçmek için üç defa tekrarlanmıştır. Her çalıştırmada 20×10^6 MC adımı (en yakın komşulukta olan atomların her yer değiştirmesi bir MC adımı olarak kabul edilmiştir) gerçekleştirilmiştir ve 1×10^7 inci adımdan başlayarak, tepki parametreleri (düzen parametreleri) 25×10^4 MC adımı aralığında hesaplanmıştır. Sonuç olarak, her çalıştırma kombinasyonu için 60 örnek konfigürasyon elde edilmiştir ve Ni₃Al intermetaliklerinin düzenlenme davranışını karakterize eden LRO ve SRO parametreleri bulunmuştur. Hesaplanan düzen parametreleri % 95 güvenilirlik seviyesindedir ve 1×10^7 MC adımı denge durumuna karşılık gelen değerlere ulaşmıştır. Bu da MC simülasyonunda şunu ifade eder, konfigürasyonun modellenmesi ve karşılık gelen düzen parametrelerinin belirlenmesi

istatistiksel analizin istenilen duyarlılığı ve güvenin amacı için 1×10^7 MC basamağından sonra gerçekleştirilmelidir.

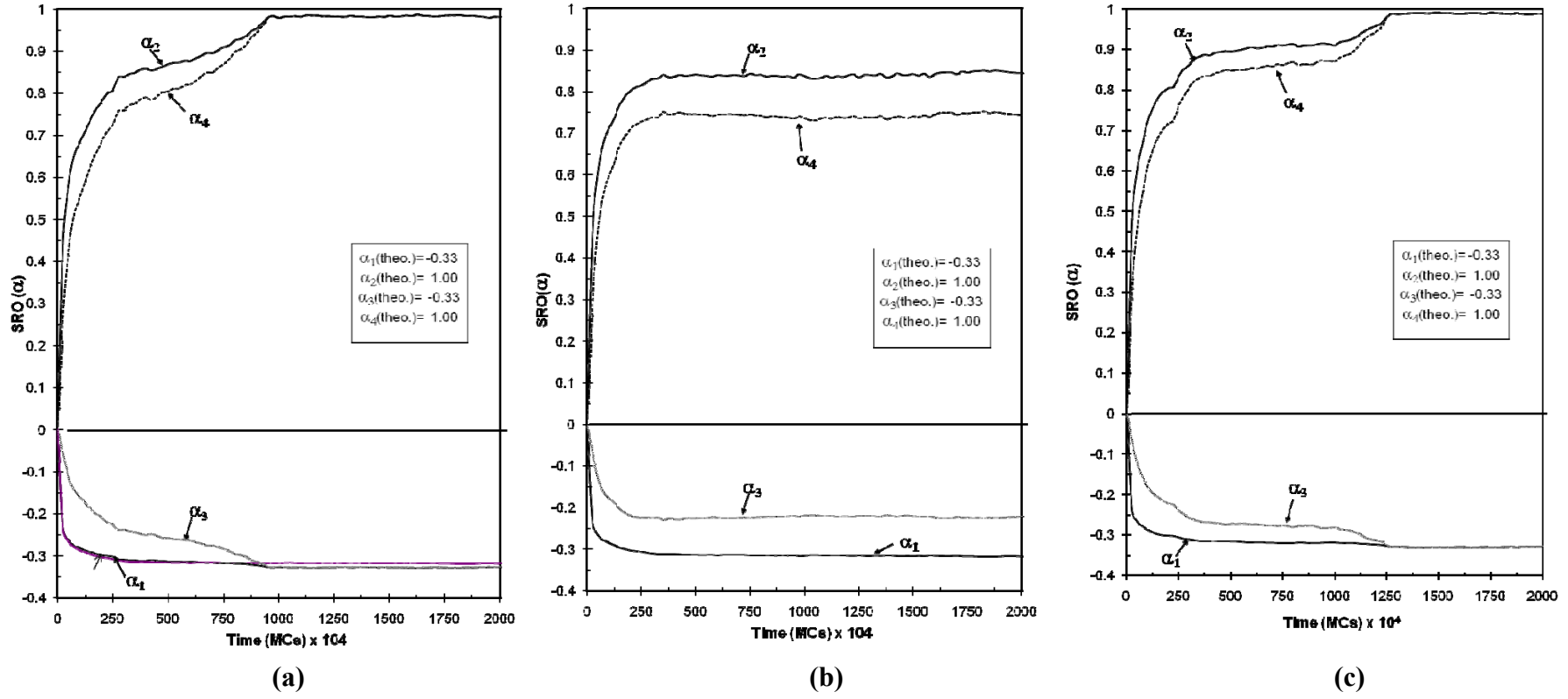
Bu çalışmada yaklaşımlar alt kafeslerdeki atomların dağılımı gibi denge hallerini tahmin etmek için yapıldı. Önceden tanımlanmış sıcaklık ve alüminyum konsantrasyonu için şartlar oluşturulmuş uygun bir kafes modeli üzerinde MC simülasyonu atomların elektronik teorisi ile birleştirilerek uygulandı. Uzun mesafe düzeni ve kısa mesafe düzeni parametreleri oda sıcaklığı ve erime sıcaklıkları arasındaki tüm önceden tanımlanmış sıcaklıklarda hesaplandı. Bu anlamda, 300°C sıcaklıkta atomların ilk sabit dağılımıyla % 25 atom yüzdesinde alüminyum içeren alaşımlar için düzenlenme süreçlerinin değerlendirmeleri için 3 tane ÇALIŞTIRMA (RUN 1–3) seçildi.

3.3.2. Ni_3Al Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Süreçlerinin Değerlendirilmesi

Geçici halden kararlı hale geçişteki önemli nokta diğer bir deyişle sistemin denge durumuna ulaştığı esnadaki zaman dilimi (MC basamakları) bu alaşım için Şekil 3.3 ve 3.4'te gösterilmiştir. Şekil 3.3'den de görüldüğü gibi ÇALIŞTIRMA1 ve ÇALIŞTIRMA3'ten uzun mesafe düzeni parametrelerinin düzensiz durumdan uzun mesafe düzeni haline dönüşümün değerlendirildiği sistem dengesini göstermektedir. Örnek, mükemmel $L1_2$ tipi düzenlenmiş süper kafes kafes yapısında tek bir bölge oluşturarak elde edilmiştir. Uzun mesafe düzeni için önerilen teklifler aynı zamanda kısa mesafe düzeni parametreleri, α_i , için de desteklenmiştir. Kısa mesafe düzeni parametreleri sırasıyla Şekil 3.4 (a) ve (c)'de ÇALIŞTIRMA1 ve ÇALIŞTIRMA3 için verilerek dördüncü koordinasyon küresine kadar aynı çalıştırmalarda varsayılan konfigürasyonlar için belirlenmiştir. Şekil 3.4 (a) ve (c)'de gösterildiği gibi MC simülasyonunda tahmin edilen değerler ile Denklem (6) kullanılarak elde edilen teorik hesaplamalar arasındaki uyum mükemmeldir.



Şekil 3.3. Ni_3Al alaşım sisteminde LRO parametresinin düzensiz durumdan uzun mesafe düzenine geçişinin MC basamaklarına göre gelişimi



Şekil 3.4. Ni3Al alaşım sisteminde SRO parametrelerinin düzensiz durumdan kısa mesafe düzenine geçişinin MC basamaklarına göre gelişimi (a) ÇALIŞTIRMA1, (b) ÇALIŞTIRMA2 ve (c) ÇALIŞTIRMA3

Bununla birlikte Şekil 3.3 ve 3.4 (b)'de gösterilen ÇALIŞTIRMA2'deki örnek konfigürasyonlar için uzun mesafe düzeni ve kısa mesafe düzeni parametreleri ÇALIŞTIRMA1 ve ÇALIŞTIRMA3'dekilerin aksine düzensiz yapıların matrislerinde birçok anti faz bölgelerinin oluştuğunun göstermektedir. Uzun mesafe düzeni parametreleri ve α_2 , α_3 , α_4 kısa mesafe düzeni parametrelerinin mümkün olan maksimum değerlerinden küçük bir değişimi L_{12} tipi yapının kafesinde birçok bölgenin ve anti faz sınırlarının varlığına bağlanabilir (CAHN et al., 1987).

Düzenlenme parametrelerinin değişik MC basamaklarında teorik denge değerlerine ulaştığını görmek önemlidir. Örneğin $\sim 300 \times 10^4$ 'teki α_1 kısa mesafe düzeni parametresi ve uzun mesafe düzeni parametresi ve $\sim 1 \times 10^7$ MC basamaklarındaki (Şekil 3.3 ve 3.4) yüksek koordinasyon kürelerindeki α_i kısa mesafe düzeni parametreleri (α_2 , α_3 , α_4) için. Bu yüzden hem kısa mesafe düzeni hem de düzeni parametrelerinin anlık hesaplanması sadece ilk koordinasyon küresi için değil hem de yüksek koordinasyon küreleri için sistemin denge hali daha kesin tahmin etmek için MC simülasyonlarında gerekenler önemli hale gelmektedir.

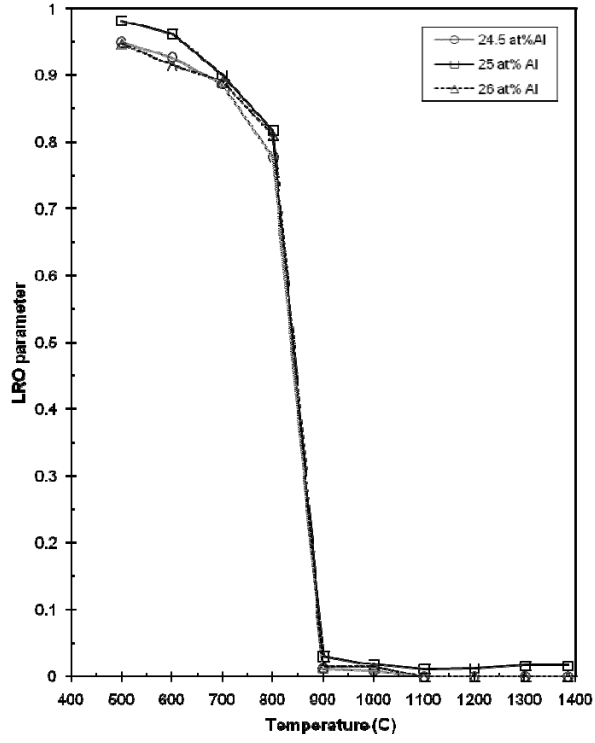
Örnek çalıştırmaların sonucu, başka bir deyişle RUN1-3, MC simülasyonu ve (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 2003) çalışmasında Fe_3Al için önerilmiş olan alaşımların elektronik teorisini onaylamakta ve haklı çıkarmaktadır. Ayrıca bu programlar L_{12} tipindeki düzenli Ni_3Al intermetaliklerinin gerçek fiziksel koşullarla uyum içinde olan ve beklenen denge koşullarına ulaşması sebebiyle, bu alaşım sistemine de başarıyla uygulanabilmiştir.

3.3.3. Ni_3Al Alaşım Sisteminde Sıcaklığın ve Al Konsantrasyonunun Düzenlenme Özelliklerine Etkisi

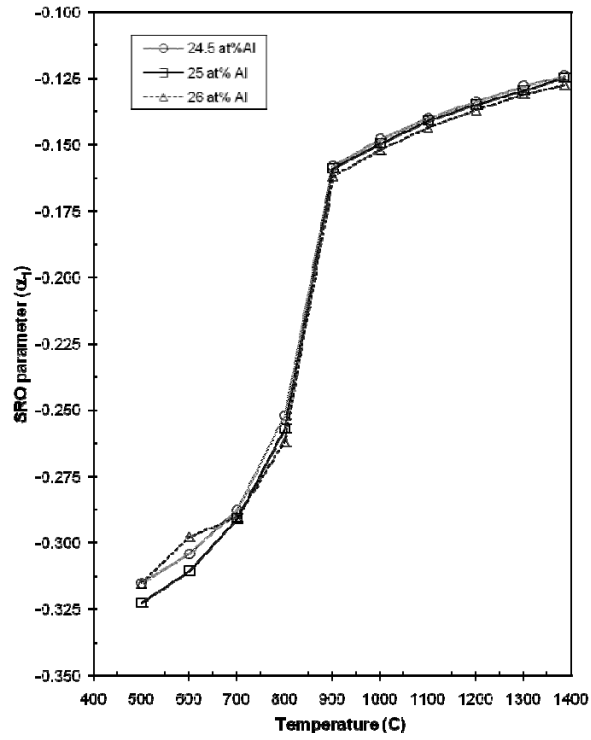
Sıcaklığın ve Al konsantrasyonunun Ni_3Al intermetaliklerinin düzenlenme özelliklerine etkileri, α_1 , LRO ve SRO parametreleri için Şekil 3.5'te gösterilmiştir. Yaklaşık 800-850°C'de, Ni_3Al alaşımlarının tam düzenli durumdan bir miktar SRO içerecek şekilde düzensiz yapıya geçtiği açıkça ortadadır. %95 güvenilirlik derecesinde hesaplanmış olan α_1 , LRO ve SRO parametreleri, 850°C'nin altında Ni_3Al alaşımlarında neredeyse mükemmel L_{12} tipinde düzenin varlığını kanıtlamıştır. Ni_3Al intermetaliklerinin neticede L_{12} tipinde düzen gösterdiği göz önüne alınarak bir sıcaklık aralığı için hesaplanmış olan LRO ve SRO parametrelerinin, düzenlenme parametrelerinin teorik değerleriyle ve de düşük sıcaklıklarda yapılmış taban durumu hesaplamalarıyla oldukça iyi örtüştüğü görülmüştür (COLINET et al., 1989).

Ancak, Şekil 3.5'ten elde edilmiş olan düzen-düzensizlik sıcaklığının deneysel olarak bulunmuş veriden sapma gösterdiği gözlemlenmiştir. Stokiyometrik ve stokiyometrik olmayan Ni_3Al alaşımlarında yapılan düzen-düzensizlik faz dönüşümleri deneylerine göre, tam düzenli durumlar yüksek sıcaklıklara kadar korunmuş ve stokiyometrik Ni_3Al 'un olası düzensizleşme sıcaklık aralığı, erime sıcaklığının 65°C yakınında bir bölgeye daraltılmıştır (CAHN et al., 1987).

Bu çelişki MC simülasyonunun algoritmasına bağlanabilir, başka bir deyişle yüksek sıcaklıklardaki düşük güvenilirlik ve Boltzman faktöründeki kuvvetli sıcaklık bağımlılığı, ve/veya düzenlenme enerjilerinin hesaplanmasında yapılmış olan varsayımlar; atomik boyut farklılıklarından kaynaklanan gevşemeler, kovalentlik, öz-kararlılık, çok atomlu etkileşimler ve benzerleri, bu çelişkiye neden olabilir.



(a)



(b)

Şekil 3.5. Ni_3Al alaşım sisteminde atomik düzenlenme parametrelerinin sıcaklık ve Al konsantrasyonu ile değişimi (a) LRO parametresi ve (b) SRO parametresi

Ayrıca, oluşturulmuş kafes modelinde, kafes hem mükemmel (dislokasyon, tane sınırı, ve benzeri gibi kafes hatalarını göz ardı ederek), hem de katı (kafes titreşimini ve elastik uzamayı göz ardı ederek) kabul edilmiştir, öyle ki sadece biçimsel problem, alaşımın durumlarının bölgesel işgal değişkenleriyle tanımlanan modellerle hesaplanmıştır. Günümüzde Ni₃Al alaşımının T_c sıcaklığı (~800-850°C) hakkındaki göreceli derecede basit ve doğrudan yaklaşımlar kullanılarak yapılan tahminler, deneysel olarak 1390°C bulunmuş T_c sıcaklığıyla ~40% uyumsuzluk göstermektedir. Oysa ki, bazı durumlarda hesaplanmış ve deneysel olarak bulunmuş T_c sıcaklık değerleri arasındaki uyumsuzluk çok daha fazladır (>200%), hatta komplike yüksek hızlı bilgisayarlarla ve bilgisayar kodlarıyla gerçekleştirilmiş olan B2-NiAl intermetaliklerinin birinci temel hesaplamalarında bile bu durumlar karşılaşılmıştır (STOCKS et al., 1994).

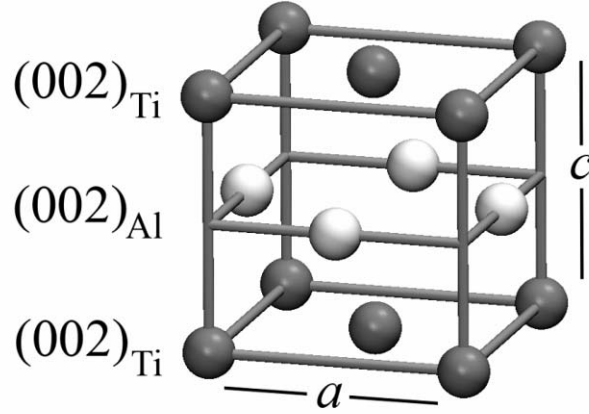
Şekil 3.5'te stokiometrik kompozisyona sahip alaşımların 800°C'ın altında daha yüksek SRO ve LRO parametrelerine sahip olduğu ve elde edilen değerlerin Ni₃Al için olan deneysel değerlerle iyi uyum sağladığı açıkça görülmektedir (RAO et al., 1993).

3.4. Ti-Al Alaşım Sistemi

Ti-Al tabanlı intermetalik alaşımların araştırılması 1950'lere dayanmaktadır ve takip eden yıllarda yüksek sıcaklık özelliklerinin geliştirilmesi ile γ -TiAl alaşımlarının olası mühendislik uygulamalarında kullanımı söz konusu olmuştur (LORIA, 2000). Ancak malzeme biliminin her dalında olduğu gibi, Ti-Al tabanlı intermetaliklerde de uygulanan mühendisliğin en önde gelen kaygıları, her zaman, istenilen malzeme özelliklerini iyileştirmek, malzemenin mahsur kalacağı çevresel koşullara karşı direncini artırmak ve kullanım sürelerini olabildiğince uzatmaktır. Bu kaygıları kontrol altına almak için, fiziko-kimyasal ve mekanik özellikleri, sınır/yüzey enerjilerini, mikroyapısal özellikleri, faz kararlılığını ve ayrışmasını atomik düzeyde etkilemesinden dolayı, alaşımlama ve sonuç olduğu kafes tercihi durumu günümüzde mühendisler tarafından halen intermetaliklerde en çok araştırılan konuların başındadır (HAO et al., 2000). Bu nedenle alaşım elementlerinin Al-zengini, Al-fakiri ve stoikiyometrik γ -TiAl (Şekil 3.6) alaşımlarında kristal örgüde kafes pozisyonu tercihleri günümüze değin hem deneysel hem teorik olarak çok kere çalışılmıştır (DANG et al., 2007).

Zirkonyum, niyobyum, galyum gibi alaşım atomlarının L1₀ yapısına sahip TiAl intermetaliklerinde hangi kafes pozisyonunu tercih ettiği üzerinde genel bir varsayım hakim olsa da (WOODWARD ve KAJIHARA, 1999), günümüze kadar bildirilen çalışmalarda krom, mangan, vanadyum gibi element atomlarının pozisyon seçimleri ile ilgili tutarsız bildirimler olmuştur (WOLF et al., 1996). Buna ek olarak, bakır, çinko, gümüş, altın, vs. gibi elementlerin γ -TiAl içindeki pozisyon tercihleri hiç çalışılmamış veya yeterince tartışılmamıştır. Bu çalışmada, alaşım elementi atomlarının Ti₅₀Al_{50-X}M_X (M = alaşım elementi ve X = 1, 2, 3, 4 ve 5) kompozisyonu dahilindeki kafes pozisyonu tercihleri, düzenlenme enerjisine bağlı olarak işleyen uzun düzenlenme zorlamalı hızlı Monte Carlo (MC) simülasyonu algoritması ile teorik olarak analiz edilmiştir.

Dördüncü periyod geçiş metallere (GM); Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, beşinci periyod GM'lerinden; Y, Zr, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd ve, altıncı periyod GM'lerinden; Hf, Ta, W, Pt, Au alaşım elementlerinin γ -TiAl'deki kafes pozisyonları araştırılmıştır. Bu özellik aynı zamanda II A'dan VI A grubuna kadar Mg, B, Si, P, Ga, Ge, In, Sn, Sb, Te ve Tl elementleri için de tartışılmıştır.

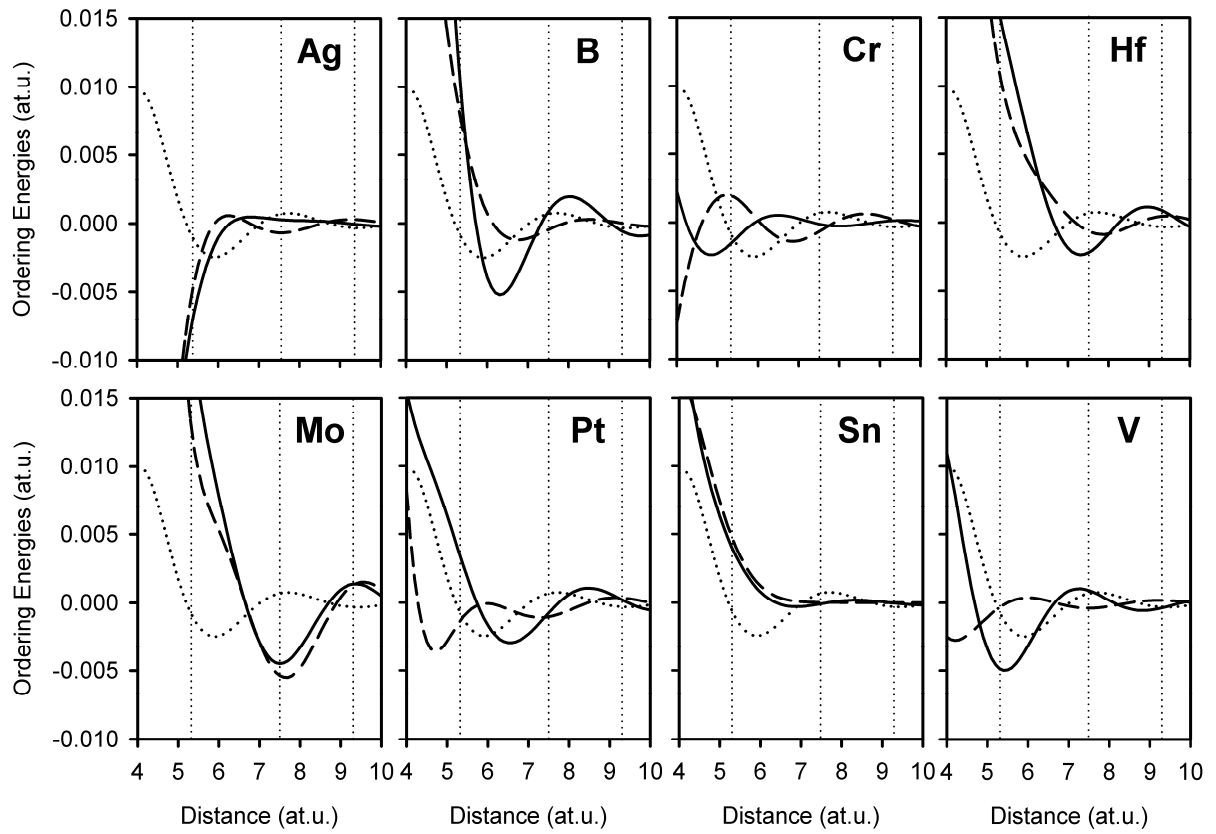


Şekil 3.6. $L1_0$ yapısındaki γ -TiAl alaşımının şematik kafes görünümü. c/a oranı birden büyüktür. Gri ve beyaz küreler Ti ve Al atomlarını göstermektedirler.

3.4.1. TiAl Alaşım Sisteminde Atomik Düzenlenme Enerjilerinin Hesaplanması ve MC Simülasyonu

Kısmi düzenlenme enerjileri Denklem (2) ve (3) kullanılarak, $L1_0$ tipi yapının tetragonalitesi de göz önünde bulundurularak üçüncü koordinasyon kabuğuna değin hesaplanmıştır. Örnek kısmi düzenlenme enerjileri çeşitli elementler için Şekil 3.7’de verilmiştir. Hesaplanan tüm kısmi düzenlenme enerjileri ilk üç koordinasyon küresinin küçük alt küreleri için Tablo 3.2-3.4’te verilmiştir.

Bu çalışmada, alaşım elementlerinin γ -TiAl içerisindeki kafes pozisyonu tercihlerinin belirlenmesi amacıyla Monte Carlo benzetim metodu uygulanmıştır. Oldukça yaygın olarak kullanılan ve bu çalışmada da uygulanan kuralgan (canonical) MC metodunda Ising-tipi Hamiltonian, Denklem (1), kullanılmıştır. Bir çok $L1_0$ yapıyla alaşımın aksine, γ -TiAl alaşımları c-ekseninde bir genişlemeye sahiptir ve c/a oranı 1,02, değerine sahiptir, a boyutu 3,997 Å’dur (PEARSON, 1958). Kristal yapının tetragonalitesinden ötürü, koordinasyon çeperlerindeki (KÇ) atomların merkez atoma uzaklıkları her vektörel yönde eşit değildir. Buna bağlı olarak, ilk üç koordinasyon çeperi toplamda altı parça olacak şekilde ikili-ikili parçalanmış ve, mesafe ilişkileri ile ilgili koordinasyon sayıları Tablo 3.5’de verilmiştir.



Şekil 3.7. Ti-Al (noktalı çizgiler), Ti-M (kesikli çizgiler) ve Al-M (kesiksiz çizgiler) çiftlerinin $Ti_{50}Al_{49}M_1$ alaşımındaki kısmi düzenlenme enerjilerinin mesafe ile değişimi. Birinci, ikinci ve üçüncü KÇ'ler soldan sağa sıralı olarak, dikey, noktalı çizgiler ile belirtilmiştir. Şekli yalınlaştırmak amaçlı, her KÇ'nin sadece daha küçük boyutlu olan alt çeperi belirtilmiştir.

Tablo 3.2. Ti₅₀Al₄₉M₁ alařımındaki ilk KÇ kısmi dzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon eperinin daha kk boyutlu alt eperi iin verilmiřtir.

İlk Koordinasyon Dzenlenme Enerjileri x 10 ⁻³ (at.u.)							
% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^1	ω_{Ti-M}^1	ω_{Al-M}^1	% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^1	ω_{Ti-M}^1	ω_{Al-M}^1
Ag	-0,812	-5,460	-7,599	P	-0,877	-0,785	1,835
Au	-0,813	-3,814	-0,363	Pd	-0,844	14,103	5,700
B	-0,899	7,814	10,236	Pt	-0,843	-1,302	3,213
Cd	-0,814	-1,794	1,108	Rh	-0,870	2,575	7,526
Co	-0,860	0,011	-2,620	Ru	-0,893	9,230	14,634
Cr	-0,879	1,931	-1,498	Sb	-0,840	8,631	8,280
Cu	-0,836	-3,186	-5,697	Sc	-0,820	0,995	-2,370
Fe	-0,879	1,047	-2,490	Si	-0,864	-1,422	0,292
Ga	-0,845	1,454	-0,757	Sn	-0,833	4,493	3,759
Ge	-0,852	0,057	0,157	Ta	-0,896	6,541	13,366
Hf	-0,854	10,690	14,880	Te	-0,846	4,748	5,991
In	-0,816	2,472	2,310	Tl	-0,805	1,287	-0,526
Mg	-0,807	-0,199	0,229	V	-0,913	-0,262	-4,908
Mn	-0,856	-0,171	-2,673	W	-0,927	16,122	22,162
Mo	-0,928	12,515	19,021	Y	-0,784	2,871	7,789
Nb	-0,896	6,966	13,899	Zn	-0,843	-1,324	-1,943
Ni	-0,861	-0,008	-2,643	Zr	-0,850	9,401	14,828

Tablo 3.3. Ti₅₀Al₄₉M₁ alařımındaki ikinci KÇ kısmi dzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon eperinin daha kk boyutlu alt eperi iin verilmiřtir.

İkinci Koordinasyon Dzenlenme Enerjileri x 10 ⁻³ (at.u.)							
% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^2	ω_{Ti-M}^2	ω_{Al-M}^2	% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^2	ω_{Ti-M}^2	ω_{Al-M}^2
Ag	0.701	-0.680	0.281	P	0.716	-0.148	-0.084
Au	0.701	-2.655	-2.033	Pd	0.708	-2.530	-2.351
B	0.721	-0.389	1.055	Pt	0.708	-1.025	-0.594
Cd	0.701	1.592	0.057	Rh	0.715	0.110	-1.488
Co	0.712	-0.364	0.101	Ru	0.720	-0.032	-2.046
Cr	0.716	-0.577	-0.137	Sb	0.707	-0.642	-0.332
Cu	0.707	-0.527	-0.008	Sc	0.702	-0.228	0.437
Fe	0.717	-0.240	0.461	Si	0.713	0.375	-0.053
Ga	0.708	0.064	-0.058	Sn	0.706	0.008	-0.060
Ge	0.710	0.089	0.198	Ta	0.720	-0.272	-2.605
Hf	0.710	-0.686	-2.100	Te	0.708	-0.704	-0.975
In	0.701	-0.419	0.180	Tl	0.699	-0.227	1.296
Mg	0.699	1.069	-0.064	V	0.724	-0.393	0.849
Mn	0.711	-0.206	0.157	W	0.727	-1.582	-3.646
Mo	0.727	-5.439	-4.468	Y	0.694	0.177	-1.526
Nb	0.720	-0.051	-2.540	Zn	0.708	-0.179	0.228
Ni	0.712	-0.372	0.099	Zr	0.709	0.001	-2.082

Tablo 3.4. Ti₅₀Al₄₀M₁ alaşımadaki üçüncü KÇ kısmi düzenlenme enerjileri. Enerjiler her koordinasyon çeperinin daha küçük boyutlu alt çeperi için verilmiştir.

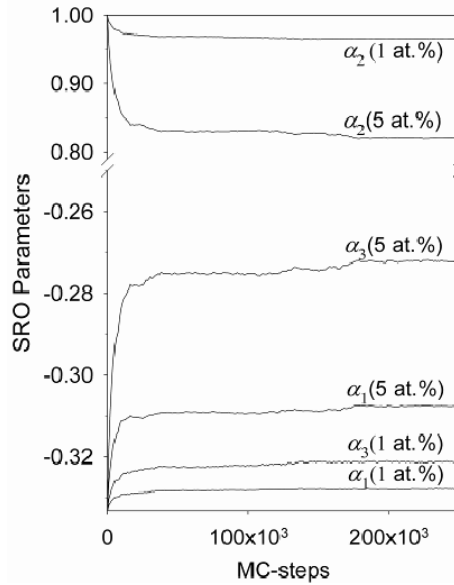
Üçüncü Koordinasyon Düzenlenme Enerjileri x 10 ⁻³ (at.u.)							
% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^3	ω_{Ti-M}^3	ω_{Al-M}^3	% 1 at. M	ω_{Ti-Al}^3	ω_{Ti-M}^3	ω_{Al-M}^3
Ag	-0,319	0,282	-0,059	P	-0,325	0,058	-0,100
Au	-0,319	1,274	0,917	Pd	-0,321	0,810	1,033
B	-0,326	-0,018	-0,630	Pt	-0,321	0,324	0,108
Cd	-0,319	-0,855	-0,097	Rh	-0,324	0,248	0,722
Co	-0,323	0,003	-0,048	Ru	-0,326	0,267	0,814
Cr	-0,325	0,179	0,140	Sb	-0,321	0,182	-0,146
Cu	-0,321	0,019	-0,057	Sc	-0,320	0,062	-0,137
Fe	-0,325	0,070	-0,141	Si	-0,323	-0,137	-0,012
Ga	-0,321	-0,012	0,009	Sn	-0,321	0,001	-0,062
Ge	-0,322	-0,030	-0,126	Ta	-0,326	0,243	0,846
Hf	-0,322	0,483	0,808	Te	-0,321	0,059	-0,079
In	-0,319	0,281	-0,049	Tl	-0,319	0,198	-0,511
Mg	-0,319	-0,617	-0,019	V	-0,327	0,180	-0,314
Mn	-0,323	-0,019	-0,058	W	-0,328	0,469	0,878
Mo	-0,328	1,400	1,386	Y	-0,317	0,233	0,769
Nb	-0,326	0,159	0,822	Zn	-0,321	-0,053	-0,134
Ni	-0,323	0,004	-0,048	Zr	-0,322	0,264	0,848

Tablo 3.5. L1₀ yapısındaki ilk üç koordinasyon çeperi, ikiye-ikiye olacak şekilde toplamda altı alt çepere bölünmüştür. Orijindeki atoma göre ilgili alt çeper mesafeleri ve koordinasyon sayıları altı farklı tür olarak listelenmiştir.

Tür	Yön	Mesafe (R_i)	N
i	<110>	$\frac{a\sqrt{2}}{2}$	4
ii	<101>	$\sqrt{\frac{a^2 + c^2}{4}}$	8
iii	<100>	a	4
iv	<001>	c	2
v	<112>	$\sqrt{\frac{a^2}{2} + c^2}$	8
vi	<221>	$\sqrt{\frac{5a^2}{4} + \frac{c^2}{4}}$	16

İlk olarak, inşa edilen simülasyon hücresindeki her örgü noktası için periyodik sınır koşulları (minimum görüntü konvansiyonu) ve komşu listeleri ilk üç KÇ için hesaplanmıştır. Akabinde, her (002) düzlemindeki örgü noktaları Ti veya Al olacak şekilde “doğru” olarak değerlendirilen örgü tipleri ile ilişkilendirilmiştir. Her kompozisyonda, alaşım elementleri, uygun oranda Al atomu pozisyonlarına yerleştirilmiştir. Atomların ara pozisyonları (interstitial sites) işgal etme olasılığı değerlendirilmeye alınmamıştır. Alaşım elementlerinin örgü noktalarında sebep olduğu deformasyonlar ihmal edilmiştir. Ti ve Al atomları arasında olabilecek herhangi bir koşullu rastgele değişimin serbestlik derecesi (degree of freedom) değeri sıfıra indirilmiş, dolayısı ile direkt Ti-Ti, Al-Al, Ti-Ti ve M-M atom değişimleri yasaklanmıştır. Diğer bir deyişle, γ -TiAl kristalindeki düzenlenme derecesi sadece alaşım elementinin Ti veya Al kafes pozisyonlarından hangisini tercih ettiğine göre değişmiştir (Zorlamalı Uzun Mesafeli Düzenleme (LRO-forced)). Sonuç olarak, her MC basamağında, alaşım elementi atomları rastgele olarak yakın komşu Ti veya Al atomları ile yer değiştirme girişiminde bulunmakta, ve denemenin kabul edilme olasılığı Metropolis algoritması ile tanımlanmaktadır.

Cowley–Warren kısa mesafeli düzenlenme (SRO) parametreleri, $\alpha_l(R_l)$, Denklem (6), TiAl intermetalikindeki niteliksel düzenlenme değerini takip etmek amaçlı kullanılmıştır. Sistemin durumu sırasıyla birinci, ikinci ve üçüncü KÇ’lerine denk gelen α_1 , α_2 ve α_3 SRO parametreleri ile takip edilmiştir. Kompozisyon etkisi SRO parametrelerinin denge değerlerinin kıyaslanmasıyla $Ti_{50}Al_{49}Mo_1$ ve $Ti_{50}Al_{49}Mo_5$ alaşımları için Şekil 3.8’de halihazırda rahatlıkla görülebilmektedir. Ortalamalar sistem dengeye geldikten sonraki minimal dalgalanmalar üzerinden her 10^3 MC-adımında bir hesaplanmıştır. Sistemin dengeye gelmesi için gereken MC-adımı sayısı eklenen alaşım elementine göre 10^4 ile 10^7 arasında çeşitlilik göstermiştir. Her simülasyon üç defa tekrar edilmiş ve pozisyon işgali fraksiyonları bu simülasyonların ortalaması olarak alınmıştır.



Şekil 3.8. Sistemin durum takibinin α_1 , α_2 ve α_3 kısa mesafeli düzenlenme parametreleri ile yapılması, bu şekilde, $Ti_{50}Al_{50-X}Mo_X$, ($X = 1$ ve $X = 5$) alaşımı ile örneklemiştir.

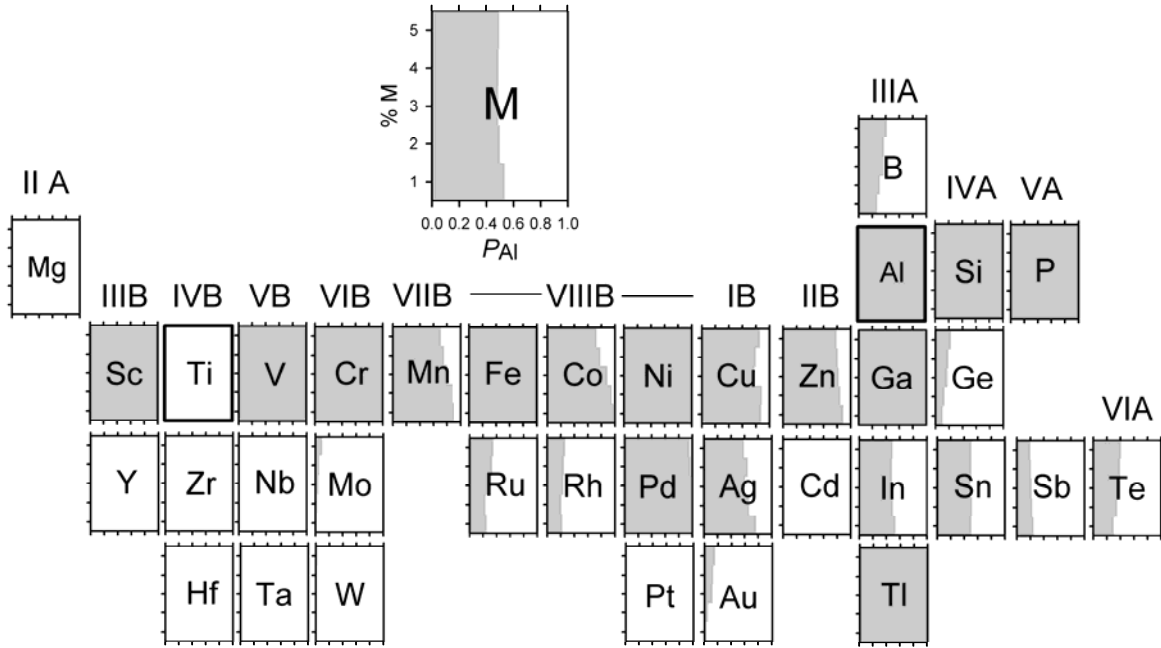
Her sistem $L1_0$ tipi kafes yapısına sahip olarak yerleştirilmiş 8788 atomdan oluşmaktadır. TiAl kristalinin 300 K sıcaklıkta tam düzenli bir yapıya sahip olduğu varsayılmış ve simülasyonlar bu varsayım ile başlatılmıştır. Dikkate alınan en düşük alaşımlama miktarı atomik olarak % 1 (at. %1) şeklinde uygulanmıştır. Bunun sebebi, daha düşük alaşım elementi eklentilerinde, sistemin uygulanabilir maksimum büyüklüğü göz önüne alındığında, gerçekçi bir atomik düzenlenme bilgisine sahip olmanın güç olmasıdır. MC simülasyonu için yaratılan rastgele sayıların niteliği sistemin dengeye yakınsaması açısından çok önemli olduğundan, $2^{19377}-1$ gibi son derece yüksek bir tekrar periyoduna sahip Mersenne-Twister isimli oldukça güçlü harici bir *psödo*-rastgele sayı üretici kullanılmıştır (MATSUMOTO ve NISHIMURA, 1998).

3.4.2. TiAl Alaşım Sisteminde Alaşım Elementlerinin Kafes Pozisyonu Tercihleri

$Ti_{50}Al_{50-X}M_X$ ($X = 1, 2, 3, 4$ and 5) alaşımında M alaşım elementlerinin kafes pozisyonu tercihleri oluşturulan periyodik tablo eşleniği ile Şekil 3.9'da verilmiştir. Her grafiğin yatay ekseni Al pozisyonlarını işgal eden M atomlarının fraksiyonunu, P_{Al} 'yi, ve dikey eksen alaşımda Al yerine konulan alaşım elementinin atomik % değerini göstermektedir (Bkz. Şekil 3.9 içindeki ek). P_{Al} hesabında 95% güven aralığındaki ortalama hata miktarı, normal dağılım varsayımında ± 0.02 olarak belirlenmiştir. Şekil 3.9'da açıkça görülebileceği gibi, bir alaşım elementinin Al ve/veya Ti pozisyonlarını tercih edip etmemesi hem elementin tipine hem de miktarına bağlıdır. Fakat, bazı alaşım elementleri her kompozisyonda tamamen Al ($M_{Al-mevkii} = Si, P, Sc, V, Cr, Fe, Ni, Ga, Pd$ ve Tl) veya tamamen Ti ($M_{Ti-mevkii} = Mg, Y, Zr, Nb, Cd, Hf, Ta, W$ ve Pt) pozisyonlarını tercih edebilmektedirler. İğnç bir şekilde, 4. periyod GM'leri çoğunlukla Al, 5. periyod ve 6. periyod GM'leri ise ağırlıklı olarak Ti mevkilerini işgal etmektedirler. Görülmüştür ki, kafes pozisyonu tercihleri elementlerin periyodik tablodaki pozisyonları ile ilgili bir yönelim ile dağılmışlardır.

Araştırmanın bir gereksinimi olarak, MC simülasyonu ve alaşımların elektronik teorisinde psödopotansiyel yaklaşımın birleşimi ile oluşturulan yöntem ile bulunan; M alaşım elementlerinin $L1_0$ tipi düzenli γ -TiAl kafesindeki pozisyon tercihlerinin, şimdiye değin bildirilen deneysel ve teorik çalışmalar ile kıyaslanması, yöntemin geçerliliğinin ispatı açısından önemli olmaktadır. Fe, Co ve Ni elementleri için tahmin edilen pozisyon tercihleri bildirilen deneysel çalışmalarla uygunluk içerisindedir (SONG et al., 2000). Al-fakiri γ -TiAl alaşımları incelendiğinde, çalışmalarımız Al-mevkisini tercih eden Mn, V, Ga, Si, Pd ve Cr, ile Ti mevkisini tercih eden Y, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W, Ge ve Sb eklentileri için literatürle oldukça iyi bir uyum içerisindedir (SONG et al., 2002).

Fakat, $M = Mn, Cr$ ve V , eklentileri için Ti, Al veya her ikisini tercih ettikleri yönünde bildirilen tamamen çelişkili çalışmalar mevcuttur (REVIERE et al., 1993). Ayrıca çeşitli çalışmalarda Mo ve W atomlarının her iki kafes pozisyonunu tercih ettiğini bildirilmiştir (JINLONG et al., 1992). Mevcut simülasyon çalışmamız Sn alaşım elementinin belirgin bir kompozisyon bağlılığı göstermeksizin Al ve Ti pozisyonlarına eşit sayılacak şekilde dağıldığını gösterse de, literatürde bildirilen bazı çalışmalarda (HAO et al., 2000) Al pozisyonu tercihi vurgulanmıştır.



Şekil 3.9. M alaşım elementlerinin Ti₅₀Al_{50-X}M_X (X = 1, 2, 3, 4 ve 5) içerisindeki kafes pozisyonu tercihleri periyodik bir düzen ile verilmiştir.

3.4.3. TiAl Alaşım Sisteminde Kafes Pozisyonu Tercihlerinin Düzenlenme Enerjileri ile Açıklanması

Alaşımlama elementlerinin TiAl içerisindeki kafes pozisyonu tercihlerini belirleyen tek itici güç, Tablo 3.2-3.4’de listelenen çiftler arasındaki düzenlenme enerjilerinin değerleridir. Tablo 3.2’de ve Şekil 3.7’de açıkça görülebileceği gibi, eğer koşulu sağlamıyorsa, alaşım elementi Al mevkisini, koşulu sağlanıyorsa Ti mevkisini (Şekil 3.9) tercih etmektedir.

Bu yönelim alaşım elementi M ve Al-fakiri γ -TiAl L1₀ yapısının stabilizasyonu arasındaki ilişkiye dayanmaktadır. Öyle görünüyorki, sistem en yüksek düzenlenme enerjisine sahip ikililer arasındaki koordinasyon sayısını ilk KÇ’de maksimize ederek, L1₀ tipi düzenli kristalin iç enerjisini minimize etmeye çalışmaktadır. Burada dikkat edilmesi gereken husus düzenlenme enerjisinin tanımlanması esnasındaki konvansiyonun, termodinamik stabilite ile tam zıt şekilde olduğudur. Bu koşul, diğer bir deyişle, ilk KÇ’de en çok Ti-M (veya Al-M) koordinasyonu sağlanması, M atomlarının (002) kristalografik Al (veya Ti) düzlemlerine yayılması ile sağlanmaktadır. Ancak, M alaşım elementinin γ -TiAl intermetalindeki kafes pozisyonu tercihinin tam olarak karakterize edilebilmesi için, birinci KÇ’den daha uzak KÇ’lerdeki düzenlenme enerjilerinin işaretleri ve değerleride hesaba katılmalıdır. Daha uzak KÇ’lerin M elementinin pozisyon tercihinine olan etkisi en çok birinci çeper Al-M ve Ti-M enerjilerinin birbirlerine yakın değerlere sahip olması durumunda ortaya çıkmaktadır.

Şekil 3.9’de görülebileceği üzere, bu durumda alaşım elementi Al ve Ti pozisyonlarına eşit sayılabilecek miktarda dağılabilmektedirler.

3.4.4. TiAl Alaşım Sisteminde Alaşım Eklentilerinin Kümeleşmesi

Alaşım elementlerinin γ -TiAl intermetalığı içindeki bir başka önemli dağılım karakteride, gösterdikleri farklı kümeleşme davranışlarıdır. Kafes pozisyonu tercihlerinin düzenlenme enerjilerinin göreceli değerleri ile belirlenmesine ek olarak, bu enerjilerin ağırlıklı olarak birinci KÇ'deki işaretleri de M elementinin TiAl matriksindeki çözünme modunu belirlemektedir. M alaşım elementleri için genel kafes pozisyonu tercihi ve çözünme modu karakteri için psödopotansiyel yaklaşımda alaşımların elektronik teorisi ile hesaplanan kısmi düzenlenme enerjileri için genel kriterler Tablo 3.6'de verilmiştir.

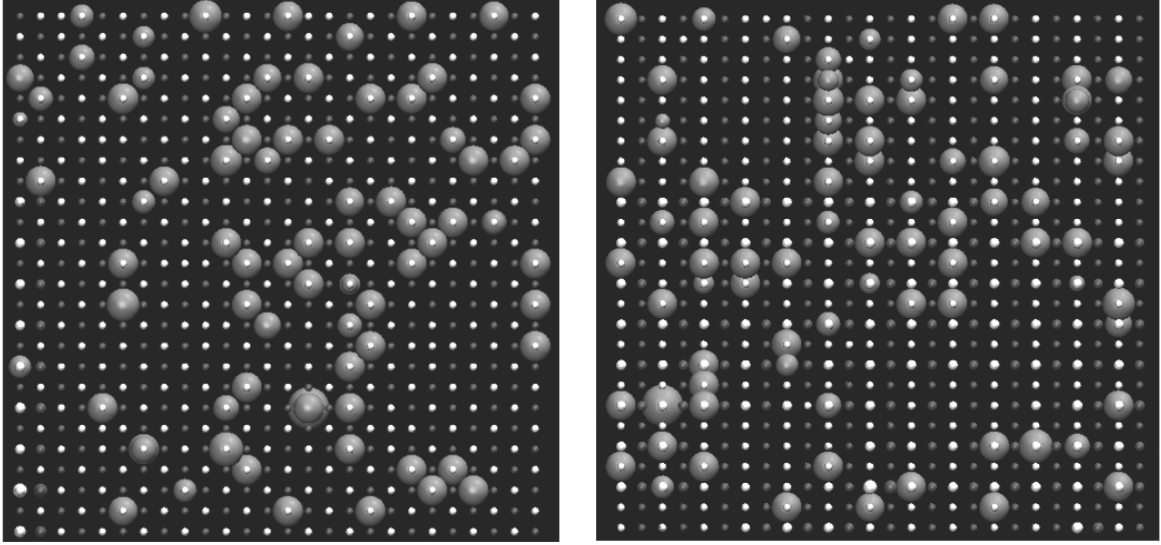
Tablo 3.6 Pozisyon tercihi ve çözünme modu kriterleri

Pozisyon Koşulu	İşgal Edilen Pozisyon	Çözünme Koşulu	Çözünme Modu
$\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$	Al	$\omega_{Al-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$	Al	$\omega_{Al-M}^1 < 0$	II
$\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$	Ti	$\omega_{Ti-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$	Ti	$\omega_{Ti-M}^1 < 0$	II
$\omega_{Al-M}^1 \approx \omega_{Ti-M}^1$	Ti/Al	$\omega_{Al-M}^1 > 0$ ve $\omega_{Ti-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Al-M}^1 \approx \omega_{Ti-M}^1$	Ti/Al	$\omega_{Al-M}^1 < 0$ ve $\omega_{Ti-M}^1 < 0$	III

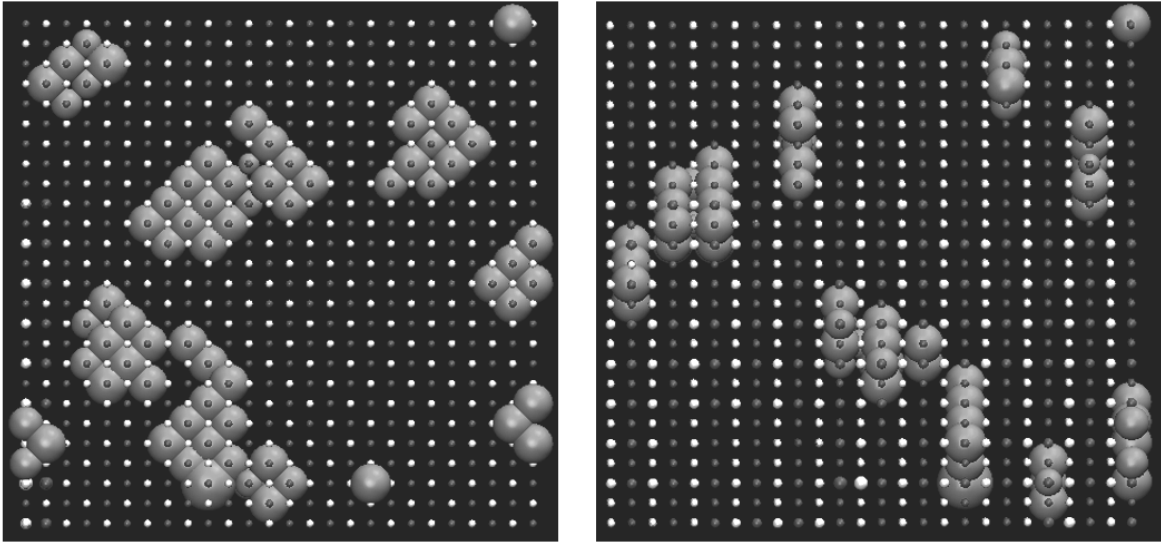
MC simülasyonlarının sonuçları incelendiğinde alaşım elementlerinin üç farklı çözünme modu sergileyebileceği görülmüştür:

- i. rastgele çözünme (Mod I)
- ii. iki-boyutlu (2D) düzlemsel kümeleşme (Mod II)
- iii. üç-boyutlu (3D) kümeleşme (Mod III)

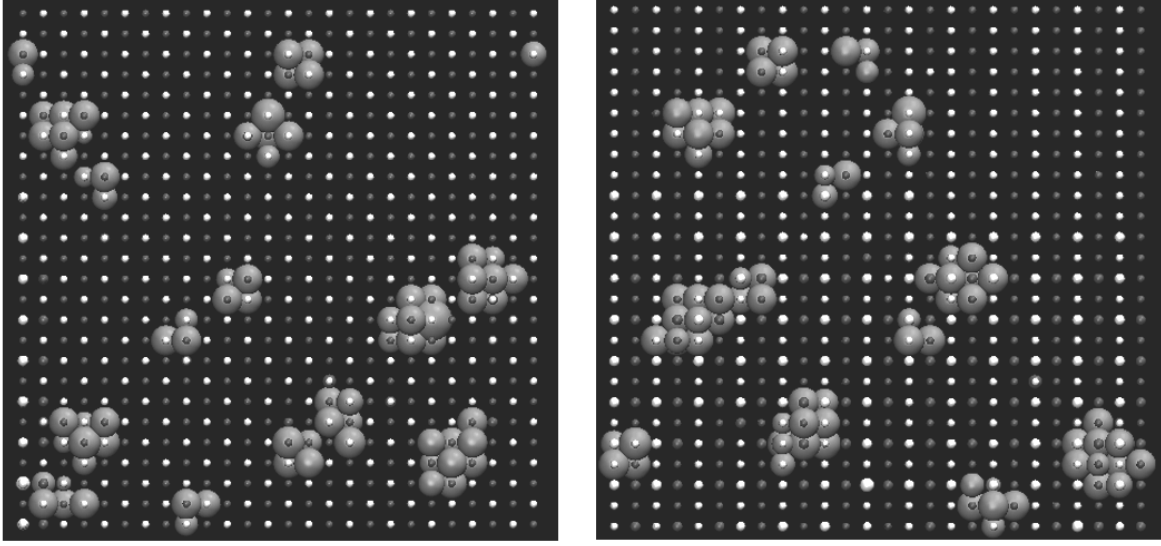
Çözünme modları için çeşitli örnekler Şekil 3.10-3.12'de sırasıyla, Hf (Mod I), Cr (Mod II) ve Ag (Mod III) elementleri için verilmiştir. Şekil 3.10'de açıkça görülebileceği gibi $\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$ ve $\omega_{Ti-M}^1 > 0$ koşullarını sağlayan Hf atomları herhangi bir kümeleşme belirtisi göstermemektedir. Bu bağlamda, Hf ve bu kriterlere uyan M elementleri Ti-mevkilerine rastgele dağılırlar (Mod I). Benzer bir davranış, yani rastgele çözünme (Mod I) Al pozisyonlarını tercih eden M elementleri için de $\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$ ve $\omega_{Al-M}^1 > 0$ kriterleri sağlandığında geçerlidir.



Şekil 3.10. Hf atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde bir kümeleşme göstermeksizin çözünmüştür (Mod I). Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.



Şekil 3.11. Cr atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde düzlemsel bir kümeleşme göstermektedir (Mod II). Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.



Şekil 3.12. Ag atomları (büyük küreler) γ -TiAl içerisinde bir üç boyuta yayılmış bir kümeleşme göstermektedir (Mod III), Görüntüler [001] (sol resim) ve [010] (sağ resim) yönlerinden bakıldığı şekildedir.

Ancak, $\omega_{Al-M}^1 < 0$ (veya $\omega_{Ti-M}^1 < 0$), kriteri sağlandığında M atomu Al (veya Ti) düzlemleri üzerinde kümeleşme eğilimi göstermektedirler (Mod II). Buna örnek olarak Şekil 3.11’de Cr atomlarının Ti düzlemlerini bozmadan, Al düzlemleri üzerinde bir araya geldikleri gösterilmiştir. Oldukça açıktır ki, bu moddaki kümeleşme sadece ilgili (002) düzlemleri üzerinde olmaktadır.

Daha da güçlü bir kümeleşme modu (Mode III), hem Ti hem Al pozisyonlarını işgal edebilen ($\omega_{Al-M}^1 \approx \omega_{Ti-M}^1$) M alaşım elementleri için, $\omega_{Al-M}^1 < 0$ ve $\omega_{Ti-M}^1 < 0$ koşulları eş zamanlı olarak sağlandığında görülebilmektedir. Buna örnek olarak Şekil 3.12’de Ag atomlarının komşu $(002)_{Ti}$ ve $(002)_{Al}$ düzlemlerini işgal ederek kümeleşmesi gösterilebilir.

Alaşım elementlerinin γ -TiAl matriksindeki olası kafes pozisyonu tercihleri ve çözünme modları Tablo 3.1’de verilen ilk KÇ kısmi düzenlenme enerjilerinin kıyaslanması ve Tablo 3.6’de özetlenen genel kriterlerin aranması ile tahmin edilebilir.

3.5. Fe-Al-X Alaşım Sistemi

3.5.1. B2-tip Düzenli Yapıdaki A-B-C üçlü Intermetalliklerde Atomların Düzenlenme Süreçleri

Çoklu-alaşımın istatistik-termodinamik teorisi pseudopotansiyel yaklaşımındaki elektron teorisi ile birleştirilerek B2 kristal yapılı, A-B-C tipli üçlü alaşım sistemlerinde atomların düzenlenme süreçlerini ve düzen-düzensizlik faz dönüşümlerini incelemek için tarafımızca daha önce yeni bir yöntem geliştirilmiş (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 1999) ve bu yöntem Fe-Al-X üçlü alaşım sisteminde bir takım üçüncü X element ilaveleri için uygulamaya konulmuştur.

Bu çalışmada, denge durumundaki üçlü A-B-C alaşımındaki herhangi $\alpha\alpha'$ atomik çiftleri arasındaki $\varepsilon_{\alpha\alpha'}$ korelasyon parametrelerinin aşağıdaki doğrusal olmayan denklemleri çözerek hesaplanabileceği gösterilmiştir (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 1999):

$$\begin{aligned} X^2 + EXY + FXZ &= c_A \\ AXY + Y^2 + DYZ &= c_B \\ FXZ + DYZ + Z^2 &= c_C \end{aligned} \quad (7)$$

öyleki

$$\begin{aligned} E &= \exp\left(\frac{W_{AB}}{2k_B T}\right) ; \quad F = \exp\left(\frac{W_{AC}}{2k_B T}\right) ; \quad D = \exp\left(\frac{W_{BC}}{2k_B T}\right) \\ X &= \left(\frac{2N_{AA}}{ZN}\right)^{1/2} ; \quad Y = \left(\frac{2N_{BB}}{ZN}\right)^{1/2} ; \quad Z = \left(\frac{2N_{CC}}{ZN}\right)^{1/2} \end{aligned} \quad (8)$$

ve

$$N_{AB}^{12} = \frac{ZN}{2} EXY ; \quad N_{AC}^{12} = \frac{ZN}{2} FXZ ; \quad N_{BC}^{12} = \frac{ZN}{2} DYZ \quad (9)$$

Bu denklemlerde W_{AB} , W_{AC} ve W_{BC} üçlü alaşımdaki AB, AC ve BC atomik çiftlerinin kısmi düzenlenme enerjilerini; c_A , c_B ve c_C ise sırasıyla A, B ve C elementlerinin atomlarının konsantrasyonunu göstermektedir. Böylelikle korelasyon parametreleri $\varepsilon_{xx'}$ aşağıdaki denklemlerle tanımlanabilir

$$\varepsilon_{xx'} = [2N_{xx'} / NZ] - C_x C_{x'} \quad (10)$$

Eğer üçüncü bileşen olan C element atomlarının kompozisyonu düşükse ($c_A \approx c_B \approx 0.5, c_C \ll 1$), stokiyometrik kompozisyona yakın bir alaşımın birinci koordinasyon küresindeki kısmi korelasyon parametreleri, ε_{AB} , ε_{AC} ve ε_{BC} sıcaklığa bağlı olarak aşağıdaki denklemler dizisiyle hesaplanabilir:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{AB} &= \left(\frac{1}{4} - \frac{c_C}{2} \right) \tanh \left(\frac{W_{AB}}{4k_B T} \right), \\
\varepsilon_{AC} &= \frac{c_C}{2} \tanh \left(\frac{W_{AB} - W_{BC}}{4k_B T} \right), \\
\varepsilon_{BC} &= \frac{c_C}{2} \tanh \left(\frac{W_{BC} - W_{AC}}{4k_B T} \right).
\end{aligned} \tag{11}$$

Ayrıca, Crowley kısa mesafe düzeni parametrelerinin, $\alpha_{\alpha\alpha'}(R_1)$, (Denklem (5)) Denklem (11)'daki korelasyon parametrelerine, $\varepsilon_{\alpha\alpha'}(R_1)$, aşağıdaki şekilde ilişkilendirildiği bilinmektedir,

$$\varepsilon_{\alpha\alpha'}(R_1) = -C_\alpha C_{\alpha'} \alpha_{\alpha\alpha'}(R_1) \tag{12}$$

Bu denklemdeki R_1 parametresi, l . koordinasyon küresinin yarıçapıdır. Denklem (7) – (12)'den görüldüğü üzere, korelasyon parametrelerini, $\varepsilon_{\alpha\alpha'}(R_1)$ veya kısa mesafe düzeni parametrelerini, $\alpha_{\alpha\alpha'}(R_1)$, hesaplayabilmek için üçlü alaşımların kısmi düzenlenme enerjilerinin, $W_{\alpha\alpha'}(R_1)$, hesaplanması gerekmektedir.

Ayrıca, ikili B2-tipli düzenli kristal yapıları A-B alaşımına çok düşük kompozisyonlu üçüncü C elementi eklendiği zaman kritik düzen-düzensizlik dönüşüm sıcaklığında, $\Delta T = T_{oc} - T_o$ oluşacak değişimin aşağıda verilmiş denklemle değerlendirileceği de gösterilmiştir (CAHN et al., 1987):

$$\frac{\Delta T}{T_o} = 49 \left[1 - \frac{49}{48} \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{W_{AC} - W_{BC}}{4k_B T_o} \right)} \right] c_C \tag{13}$$

Normalize edilmiş, $\Delta T/T_o$, parametresi altında, ikili A-B intermetaliklerinde üçüncül C alaşım eklentisinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığı üzerine etkisini belirten bir parametre olarak değerlendirilebilir.

3.5.2. B2-tip Düzenli Yapıdaki Fe-Al-X üçlü Alaşımlarında Atomların Düzenlenme Süreçleri

Proje çalışmalarında, (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 1999) tarafından geliştirilmiş olan teorik yaklaşım Fe-Al-X üçlü alaşımlarında daha geniş X üçüncü element ilaveleri için yeniden çalışılmış, atomların yerel nizamlanma süreçlerine ve düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarına değişik kompozisyonlu X element ilavelerinin etkisi detaylı bir biçimde araştırılmış ve sınıflandırılmıştır.

Bilindiği üzere, $Fe_3Al(DO_3)$ ve $FeAl(B2)$ intermetalikleri tabanlı demir alüminitlerin eşsiz fiziksel ve mekanik özelliklerine neden olarak uzun-mesafe-düzenli (LRO) süper örgüsü gösterilmektedir (YOO et al., 1993). 37 at. % 'den fazla Al içeren Fe-Al alaşımı hacim-merkezli-kübik (b.c.c.) örgüsü tabanlı tek faz düzenli B2-tip yapı oluşturur, Şekil 2.3.a. (VEDULA et al., 1985). B2-tipi düzenli Fe-Al intermetalikleri ilgi çekici düşük yoğunluk, düşük malzeme maliyeti, mükemmel oksidasyon ve korozyon direnci ve stratejik elementlerin korunması gibi sebeplerden ötürü potansiyel teknolojik ve endüstriyel uygulamalar için araştırılmaktadır (WHANG et al., 1992). Bununla beraber bu intermetaliklerin yapısal komponentler olarak kullanımı ortam sıcaklığında kırılma ve düşük süneklik göstermeleri sebebiyle kısıtlıdır. Fe-Al intermetaliklerinin mekanik özellikleri alaşım stokiometrisinden saptamaya ve üçüncül alaşım ilavesine kuvvetli bir şekilde bağlıdır.

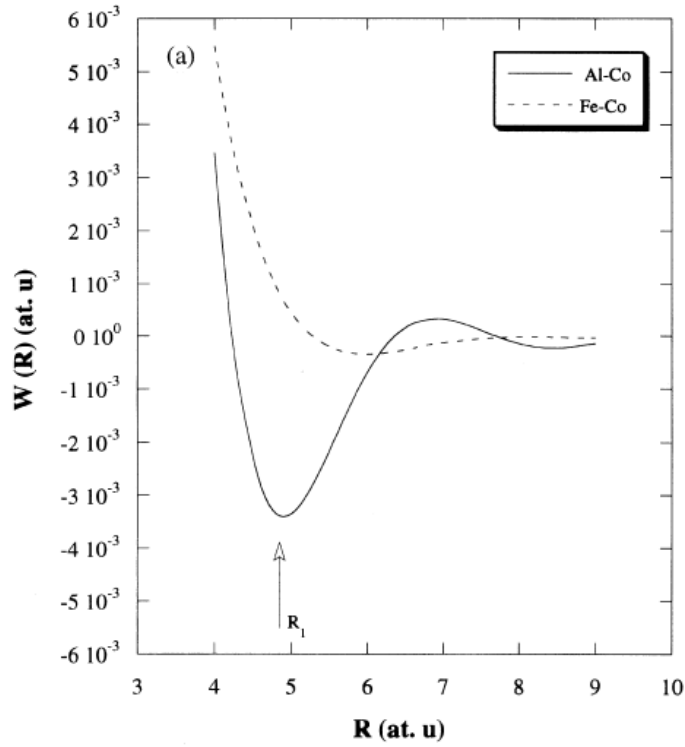
B2 yapılı Fe-Al alaşımlarına 1-5 at.% üçüncül alaşım ilavesinin etkileri üç kategoriye ayrılmıştır (TITRAN et al., 1985):

1. Sınıf I elementleri, $X_I = Ni, Co, Ti, Si, Mn$ yada Cr , homojenizasyondan sonra tekli B2 faza sahip Fe-Al-X alaşımları oluşturur.
2. Sınıf II elementleri, $X_{II} = Zr, Hf, Nb, Ta$ yada Re 175 saat süren ve yüksek sıcaklıkta, 1525 K gerçekleştirilen homojenizasyon işleminden sonra Fe-Al alaşımında tam çözünürlük göstermemektedir. Sınıf II elementlerinin eklenmesinin akış gerilimini ikili Fe-Al alaşımlarına göre üç kat arttırdığı rapor edilmiştir.
3. Sınıf III elementleri, $X_{III} = Mo$ yada W , Fe-Al alaşımları içinde kayda değer çözünürlük göstermedikleri ve yüksek bir sıcaklık olan 1300 K'de akış gerilimini ikili Fe-Al alaşımına göre altı kat arttırdıkları gözlemlenmiştir.

Fe-Al-X alaşımlarının mekanik özellikleri alaşımı meydana getiren elementlerin tipine güçlü bir şekilde bağlıdır. Buna rağmen atomistik açıdan bakıldığında zaman, gözlemlenen mekanik özelliklerin daha çok B2 yapı düzenindeki kristal kafesin mikroaltı hacminde üçlü alaşım elementi atomlarının kristal kafesdeki yerleşimi ile ilgili olduğu görülmektedir. Örnek olarak, Fe-Al intermetaliklerindeki kısa mesafe düzenlenme süreçlerinin enerji ve yapısal özellikleri.

B2 düzenli yapıdaki $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ intermetaliklerde ($X = Ni, Co, Mn, Cr, Ti, Si, Zr, Hf, Nb, Ta, Re, Mo,$ yada W), üçüncül X element ilavelerinin atomik kısa-mesafe düzenlenme süreçlerine ve düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığına etkileri Denklem (7)-(13) sistemi kullanılarak incelenmiştir. Bunları yapabilmek için önce kısmi düzenlenme enerjileri Denklem (2)-(3) kullanılarak hesaplanmıştır. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ üçlü alaşımında atomlararası

mesafenin fonksiyonu olarak hesaplanmış $W^{Fe-X}(R)$ ve $W^{Al-X}(R)$ 'nin kısmi düzenlenme enerjileri Şekil 3.13'te $X=Co$ ve Re elementleri için örnek olarak gösterilmiştir. Şekillerde gösterilen koordinasyon kürelerinin pozisyonları, R_i , verilen ikili alaşımlardakinin aynıdır, Şekil 3.1 (empürite elementlerinin kompozisyonları düşük olduğundan dolayı kafes parametresindeki değişimler dikkate alınmamıştır). Şekil 3.13'ten açıkça görüldüğü gibi kısmi düzenlenme enerjisinin atomlararası mesafe ile değişimi metalik etkileşimler için iyi bilinen yarısalınımsal ve işaret değiştiren özelliğe sahiptir. Bu da gösterir ki kısmi düzenlenme enerji değerleri farklı atom çiftleri ve değişik üçlü ilavesi için yalnız büyüklük olarak değil hem de işaret olarak farklılık göstermektedirler, Tablo 3.7.



Şekil 3.13. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımı için düzenlenme enerjisinin, $W(R_i)$, atomlararası mesafeye, (R) , göre değişimi, $(X \equiv Co)$

$Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için ilk koordinasyon küresindeki kısmi kısa mesafe düzenlenme parametreleri Denklem (7)-(12) sistemi kullanılarak 1273 K sıcaklığında hesaplanmış ve sonuçlar Tablo 3.8'de verilmiştir. Bu parametreler belirlenirken Denklem (7)'de verilen anlamlı doğrusal olmayan eşitlikler 1×10^{-7} 'den az hatayla psödo-Newton metodu kullanılarak çözülmüştür. $\alpha_{aa'}(R_1)$ parametresinin hesaplanmasında Fe-Al atomik çiftleri için Krivoglaç ve Smirnov tarafından belirlenen düzenlenme enerji değeri olarak $W^{Fe-Al}(R_1) = 2,92 \times 10^{-3} a.u.$ kullanılmıştır (KRIVOGLAZ ve SMIMOV, 1964).

Tablo 3.7. $A_{0.5}(B_{1-n}C_n)_{0.5}$ alařımındaki ilk KÇ kısmi düzenlenme enerjileri ($A\equiv Fe$, $B\equiv Al$, $C\equiv X$) ve $n = 0,01$ atomik konsantrasyon

Elements	Düzenlenme Enerjileri (at. u)	
	$W^{BC}(R_1)$	$W^{AC}(R_1)$
Ni	$-3,67 \times 10^{-3}$	$7,18 \times 10^{-4}$
Co	$-3,58 \times 10^{-3}$	$6,94 \times 10^{-4}$
Mn	$-4,84 \times 10^{-3}$	$-7,37 \times 10^{-4}$
Cr	$-2,41 \times 10^{-3}$	$4,00 \times 10^{-4}$
Ti	$3,09 \times 10^{-3}$	$5,89 \times 10^{-4}$
Si	$6,64 \times 10^{-3}$	$-5,09 \times 10^{-3}$
Zr	$2,49 \times 10^{-2}$	$1,44 \times 10^{-2}$
Hf	$2,27 \times 10^{-2}$	$1,40 \times 10^{-2}$
Nb	$2,76 \times 10^{-2}$	$1,26 \times 10^{-2}$
Ta	$2,54 \times 10^{-2}$	$1,06 \times 10^{-2}$
Re	$3,85 \times 10^{-2}$	$1,80 \times 10^{-2}$
Mo	$4,44 \times 10^{-2}$	$2,81 \times 10^{-2}$
W	$4,18 \times 10^{-2}$	$2,41 \times 10^{-2}$

Tablo 3.8. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alařımları için ilk koordinasyon küresindeki kısmi kısa mesafe düzenlenme parametreleri

Elements	Kısmi SRO Parametreleri					
	$\alpha^{AB}(R_1)$		$\alpha^{BC}(R_1)$		$\alpha^{AC}(R_1)$	
	Calc.	Exp. ^[27]	Calc.	Exp.	Calc.	Exp.
Ni	-0,172	(-)	0,265	-	-0,260	-
Co	-0,172	(-)	0,265	-	-0,260	-
Mn	-0,172	(-)	0,245	(+) ^[42,43]	-0,240	(-) ^[42,43]
Cr	-0,172	(-)	0,123	(+) ^[40]	-0,120	(-) ^[40]
Ti	-0,172	(-)	-0,151	(-) ^[41,42]	0,148	(+) ^[41,42]
Si	-0,172	(-)	-0,337	-	0,330	-
Zr	-0,172	(-)	-0,571	-	0,560	-
Hf	-0,172	(-)	-0,490	-	0,480	-
Nb	-0,172	(-)	-0,735	-	0,720	-
Ta	-0,172	(-)	-0,714	-	0,700	-
Re	-0,172	(-)	-0,857	-	0,840	-
Mo	-0,172	(-)	-0,755	-	0,740	-
W	-0,172	(-)	-0,796	-	0,780	-

$Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için düzenlenme parametrelerinin deneysel verileri literatürde çok sınırlıdır. Sadece kısa mesafe düzeni parametreleri işaretine uygun veriler, $Fe_{0.5}(Al,Cr)$, $Fe_{0.5}(Al,Ti)$ ve $Fe_{0.5}(Al,Mn)$ alaşımları için mevcut olup, bizim çalışmalarla uygunluk göstermektedir (KONG ve MUNROE, 1994).

Tablo 3.7 ve Tablo 3.8 'in incelenmesi ve değerlendirmelerden anlaşılacağı gibi, $W^{BC}(R_1)$ ve $W^{AC}(R_1)$ kısmi düzenlenme enerjilerinin sadece değerleri değil, hem de işareti Fe-Al intermetaliklerinde üçlü alaşım elementinin Fe ve Al alt kafeslerine dağılımını belirlemede aynı derecede önem taşımaktadır. $Fe_{0.5}(Al,X)$ sisteminde Al-X ($X_I = Ni, Co, Mn$, veya Cr element atomları) çiftlerinin kısmi SRO parametrelerinin işaretleri pozitifdir ($\alpha^{Al-X}(R_I) > 0$) ve bu gösterir ki X_I atomları temel olarak Al alt-kafes noktalarına yerleşmekte ve Fe atomları tarafından çevrelenmektedirler. Bunun tam tersi olarak, ilave $X_{II} = Ti, Si, Zr, Hf, Nb, Ta, Re, Mo$ veya W element atomları tercihen Fe alt-kafes noktalarında yerleşmekte ($\alpha^{Fe-X}(R_I) > 0$) ve Al atomlarıyla çevrili bulunmaktadır.

İlave element atomlarının Fe-Al intermetaliklerinin alt kafeslerindeki dağılımının düzen-düzensizlik dönüşüm sıcaklığı üzerinde belirgin bir etkisi olduğu bilinmektedir (AKDENİZ et al., 1994). Fe-Al-X üçlü alaşım sistemi için bu etkinin hesaplanması Denklem (13) kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Denklem (12)'nin yakından incelenmesi gösteriyor ki, Fe-Al intermetaliklerine üçüncül alaşım elementinin eklenmesi ile oluşan normalize edilmiş geçiş sıcaklığı değişimi, A, B, C elementlerinin oluşturdukları farklı atom çiftleri arasındaki kısmi düzenlenme enerjilerinin, $W_{aa'}(R)$, mutlak değerlerine yoğun bir şekilde bağlılık göstermektedir.

$Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için normalize edilmiş sıcaklık değişimlerinin, Denklem (13)'de $T_0 = 1523$ K olarak varsayıp (LIU ve KUMAR, 1993) hesaplanmış değerleri Tablo 3.9'de özetlenmiştir.

Tablo 3.9. $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları için normalize edilmiş sıcaklık değişimleri, $\Delta T/T_0$, ($T_0 = 1523$ K).

Impurity	$(\Delta T/T_0) \times 10^{-3}$		
	n=0,0025	n=0,0050	n=0,010
Ni	2,86	6,74	18,47
Co	2,75	6,52	17,29
Mn	2,25	5,52	15,56
Cr	-0,34	0,28	4,65
Ti	-0,82	-0,77	2,12
Si	6,91	14,85	34,02
Zr	25,97	53,40	113
Hf	17,99	37,26	79,80
Nb	47,35	96,78	202,17
Ta	46,40	94,90	198,00
Re	70,60	144	303
Mo	52,50	107	228
W	58,80	120	254

Tablo 3.9'dan görüldüğü gibi, kısmi düzenlenme enerjileri olan $W^{BC}(R_l)$ ve $W^{AC}(R_l)$ 'nin mutlak değerlerinin $W^{AB}(R_l)$ düzenlenme enerjisi değerine yakın veya ondan daha büyük olduğu $X = \text{Si, Zr, Hf, Ta, Nb, Mo, W}$ veya Re elementleri içeren $\text{Fe}_{0.5}(\text{Al}_{1-n}\text{X}_n)_{0.5}$ alaşımları için normalize edilmiş sıcaklık değişimlerinin c_X 'in artmasıyla büyük ve hızlı bir artış göstermektedir. Fakat $W^{BC}(R_l)$ ve $W^{AC}(R_l)$ 'nin mutlak değerlerinin $W^{AB}(R_l)$ düzenlenme enerjisine yakın veya ondan daha düşük olduğu üçüncül alaşım elementleri $X = \text{Ni, Mn, Ti, Cr}$ veya Co için T_{oc} 'de belirgin bir değişim gözükmemektedir. $\text{Fe}_{0.5}(\text{Al}_{1-n}\text{X}_n)_{0.5}$ alaşımları için hesaplanmış düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarının ilave X elementlerinin konsantrasyonuna bağlı olarak değişimi $T_{oc}(c_X)$ nitelik olarak literatüreki deneysel verilerle iyi bir uyum içindedir (MUNROE ve BAKER, 1990).

Mevcut çalışma ikili Fe-Al intermetalğine X alaşım elementleri eklendiğinde, geçiş sıcaklığının farklı atom çiftleri için kısmi düzenlenme enerjilerinin mutlak değerlerine bağlı olarak artacağını ya da değişmeden aynı kalacağını öngörmektedir. Bu da alaşım elementlerinin türü ve miktarının düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığına özel etkileri olduğunu göstermektedir.

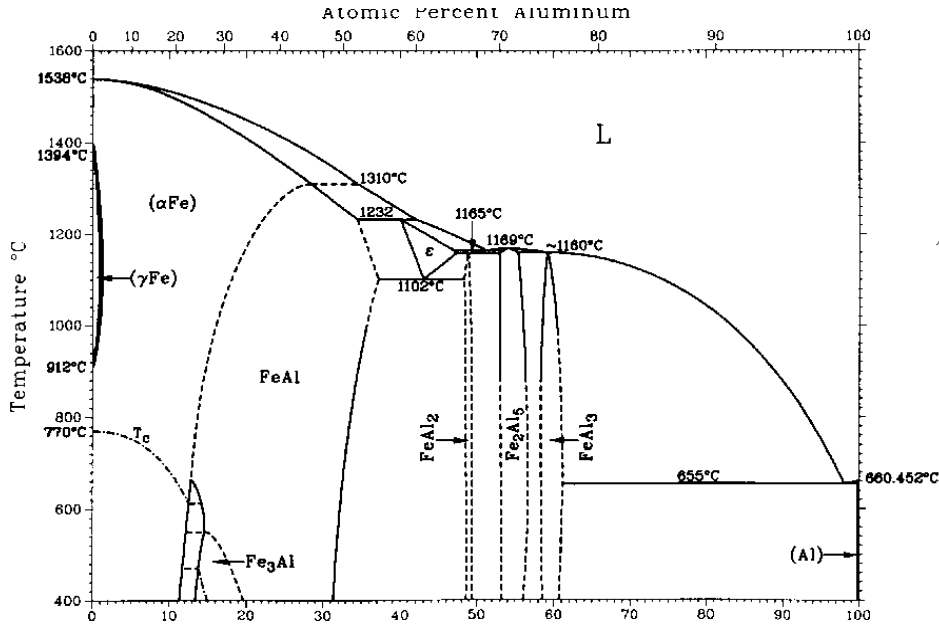
Al-X atomik çiftleri oluşturmak için Fe atomlarının yerini alan safsızlık elementlerinin düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığını arttırma eğiliminde olduğu da üzerinde durulması gereken bir konudur. Örneğin, Ti element atomları Fe- alt kafesinde yerleşmiş olsalar da geçiş sıcaklığındaki artış neredeyse ihmal edilebilir düzeydedir, Tablo 3.8 ve 3.9. Bundan dolayı Fe-Al alaşımlarındaki düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığındaki artışı, Fe alt kafesine yerleşen X alaşım element atomları kadar Al-X çiftlerinin kısmi düzenlenme enerjilerinin büyüklüğü de belirlemektedir. Fe-Al atomik bağının kısmi düzenlenme enerjilerinden daha büyük kısmi düzenlenme enerjisine sahip ve dolayısıyla çok daha güçlü Al-X atomik bağları, $W^{BC}(R_l) \gg W^{AB}(R_l)$, oluşturan X ilave elementlerinin $\text{Fe}_{0.5}(\text{Al}_{1-n}\text{X}_n)_{0.5}$ üçlü alaşımlarında düzen-düzensizlik geçiş sıcaklığını arttırma kapasitesi daha yüksektir.

Alaşımların psüdotansiyel yaklaşımındaki elektronik teorisinin istatistik-termodinamik düzenlenme teorisi ile birleştirilmesi ile yapılan incelemeler sonucunda verilen mevcut öngörüler, Fe-Al intermetaliklere üçüncül alaşım elementleri eklenmesinin, atomik kısa mesafe düzenlenme karakteristiklerine ve düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığına etkisi açısından, Fe-Al intermetalikleri için mekanik özelliklerle ilgili yapılan deneysel gözlemlerle nitelik bakımından uyum göstermektedir (TITRAN et al., 1985).

4. DENEYSEL ÇALIŞMALAR

4.1. Fe-Al-X Intermetaliklerinde Alaşım Elementi İlavesinin Düzen-Düzensizlik Faz Dönüşüm Sıcaklıklarına Etkisi

Fe-Al faz diyagramına göre FeAl, Fe₃Al, FeAl₂, Fe₂Al₅ ve FeAl₃ intermetaliklerinin denge şartlarında oluştuğu gözlenmektedir (KARTNER ve BURTON, 1993). Bu bileşiklerden Fe₃Al ve FeAl yüksek sıcaklık oksidasyon, korozyon ve dayanım özelliklerine sahip olmalarından ötürü gaz türbinleri, konvansiyonel güç santralleri, petrokimya ve nükleer enerji santralleri, otomotiv ve havacılık gibi yapısal ve yüksek sıcaklık uygulamalarında en çok çalışılan metaller arası bileşiklerdendir. Bu özelliklere ek olarak, bu alüminitler yüksek erime noktasına, düşük malzeme maliyetine ve nispeten düşük yoğunluğa sahiptirler ve krom gibi stratejik elementlerin korunumunu sağlamaktadır. Demir alüminitlerin başlıca dezavantajları oda sıcaklığında düşük süneklik ve toklukları, sınırlı üretilebilirlikleri ve 600°C sıcaklığın üzerinde zayıf dayanım ve sürünme direnci göstermeleridir (STOLOFF, 1998).



Şekil 4.1 Fe-Al faz diyagramı [32].

B2 tip (düzenli HMK (Şekil 2.3.a)) kristal yapıya sahip FeAl tabanlı alaşımlar ferritik ve östenitik paslanmaz çeliklere ve diğer birçok Fe esaslı alaşıma kıyasla daha iyi dayanım ağırlık oranı ve daha düşük yoğunluğa (5.56 mg/m³) sahiptirler. Buna ilaveten, bu alaşımlar Fe-Al metaller arası bileşiklerini içerisinde en iyi oksidasyon direncine sahip olan alaşımlardır (JORDAN ve DEEVI, 2003). Ayrıca, B2 tip düzenli yapının Fe-Al faz diyagramında geniş alüminyum konsantrasyon aralığında (36 to ~50 at.%Al) kararlı olması bu alaşımların diğer bir üstünlüğüdür. Bütün bu üstünlüklere ek olarak, FeAl alaşımları birçok metalik ısıtıcı elemana kıyasla sahip olduğu yüksek elektriksel dirençten (130-170μΩ/cm) ötürü son yıllarda ısıtıcı eleman olarak ta kullanılmaktadır (JORDAN ve DEEVI, 2003). Oda sıcaklığındaki zayıf süneklikleri, kırılma direnci, 600°C sıcaklığın üzerinde zayıf dayanım ve sürünme direnci bu tip bileşiklerin başlıca dezavantajlarıdır.

Bu çalışmada, B2 tip düzenli yapıya sahip $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ metaller arası bileşiklerinin, $X=Cr, Ni, Nb, Hf, Ta, Mo, Zr, Mn$ ve W , $n = 0,01, 0,03$ ve $0,05$ at.%, ısıtma işlemi görmüş ve dökülmüş hallerinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıkları, termal analiz ölçümleriyle farklı ısıtma ve soğutma oranlarında belirlenmeye çalışılmış ve $B2 \leftrightarrow A2$ düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıkları bir önceki çalışmamızdaki teorik tahminlerle kıyaslanmış ve bu tahminlerle uygunluğu irdelenmiştir.

4.1.1 Deneysel Yöntem

$Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ alaşımları ($X=Cr, Ni, Nb, Hf, Ta, Mo, Zr, Mn$ ve W ve $n=0.01, 0.03, 0.05$ atomik oranlarda) Fe oranı %50 atomik oranda sabit tutulacak şekilde elemental haldeki saf bileşenlerinden ark ile ergitme yöntemiyle hazırlanmıştır. Bu yöntemde, numuneler tükenmeyen tungsten elektrot aracılığıyla su soğutmalı bakır tabla üzerinde yüksek saflıktaki argon gaz atmosferinde eritilmiştir. Alaşım hazırlanırken yüksek saflık yüzdesine sahip metaller kullanılmıştır (Tablo 4.1). Eritme işlemi sırasında Zr oksijen bağlayıcısı olarak kullanılmış, alaşımların tamamen homojen olmasını sağlamak için numuneler tersine çevrilerek üç veya dört defa tekrar ergitilmiştir. Ark ile ergitme işlemi sonucunda numunelerdeki kütle kaybının ağırlıkça %0,5'ten daha az olduğu tespit edilmiştir.

Fe-Al-X alaşımlarında B2 tip düzenli yapı oluşturmak için eritilen numunelere atmosfer kontrollü fırınlarda ısıtma işlemi uygulanmıştır. Isıtma işlemi sürecinde numuneler ilk olarak seramik veya kuvars tüpler içerisinde homojenleştirme (türdeşleştirme) ısıtma işlemine tabi tutulmuştur. Homojenleştirme işlemi $900^{\circ}C$ 'de 36 saat boyunca gerçekleştirilmiş hemen sonrasında numunelere $400^{\circ}C$ 'de 7 gün boyunca düzenlenme ısıtma işlemi uygulanmış ve son olarak numuneler fırında doğal soğumaya bırakılmışlardır.

Isıtma işlemi görmüş numunelerin bileşenleri (kompozisyonları) Enerji Dağılımlı X-Işınları Analiz (EDS) yöntemi ile doğrulanmıştır, Tablo 4.2'ten de görüldüğü üzere elde edilen sonuçlar numunelerin nominal kompozisyonları ile birebir örtüşmektedir. B2 tip düzenli yapı Cu-K α radyasyonlu X-Işınları Difraksiyonu (XRD) ile RIGAKU D/MAX2200/PC X-ray difraktometre kullanılarak ispatlanmıştır. Alaşımların mikro yapıları optik mikroskop ve taramalı elektron mikroskobu (SEM) kullanılarak karakterize edilmiştir. Metalografik araştırmalar için hacimce %68 gliserin %16 HF ve %16 HNO₃ karışımından oluşan Ti₂ çözeltisi dağılayıcı olarak kullanılmıştır. Taramalı elektron mikroskobu araştırmaları JEOL JSM-6400 model elektron mikroskobuyla gerçekleştirilmiştir. Alaşım elementi ilavesinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığı ve erime noktasına etkisini belirlemek amacıyla SETARAM SETSYS-16/18 DTA/DSC taramalı diferansiyel kalorimetre kullanılarak termal analiz ölçümleri yapılmıştır. Cihazın kalibrasyonu sertifikalı Al, Zn, Ag, Au, ve Ni kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Termal analiz işlemi sırasında numuneler alümina potalar içerisinde argon gaz atmosferinde 10 K/dakika ısıtma hızıyla ısıtılmıştır. Cihazın sıcaklık kalibrasyonunun doğruluğu $\pm 1K$ 'dir.

Tablo 4.1. Alaşımlarda kullanılan elementlerin saflık yüzdeleri

Element	Saflık Yüzdesi (%)	Element	Saflık Yüzdesi (%)
Fe	99,97	Nb	99,6
Al	99,9	Hf	99,7
Cr	99,2	Zr	99,8
Ni	99,9	Ta	99,95
Mn	99,9	Mo	99,95
W	99,95		

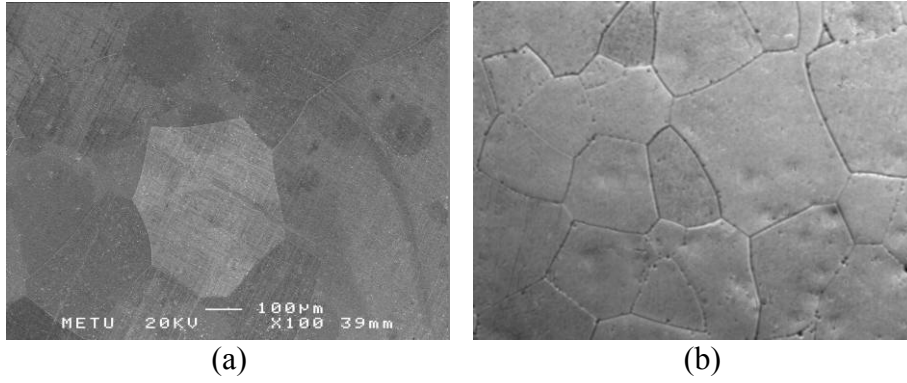
Tablo 4.2. Üçlü Fe-Al-X alaşımlarının elemental analiz sonuçları (at %)

Nominal Kompozisyon	Fe	Al	X
Fe-50Al	50,2	49,8	-
Fe-40Al	60,6	39,4	-
Fe-49Al-1Cr	50,2	48,7	1,1
Fe-47Al-3Cr	50,2	46,7	3,1
Fe-45Al-5Cr	50,2	44,6	5,2
Fe-49Al-1Ni	50,1	48,9	1,0
Fe-47Al-3Ni	50,1	46,7	3,1
Fe-45Al-5Ni	49,3	45,7	5,0
Fe-49Al-1Nb	49,9	49,0	1,1
Fe-47Al-3Nb	50,1	46,8	3,1
Fe-45Al-5Nb	51,1	44,7	4,2
Fe-49Al-1Mo	50,2	48,7	1,1
Fe-47Al-3Mo	49,5	47,4	3,1
Fe-45Al-5Mo	49,2	45,0	5,8
Fe-49Al-1Ta	49,8	49,0	1,2
Fe-47Al-3Ta	50,5	46,4	3,1
Fe-45Al-5Ta	51,6	44,5	3,9
Fe-49Al-1Hf	49,3	48,9	1,3
Fe-47Al-3Hf	52,4	46,1	2,5
Fe-45Al-5Hf	49,7	44,9	5,4
Fe-43Al-7Hf	50,0	43,2	6,8
Fe-41Al-9Hf	51,4	39,8	8,8

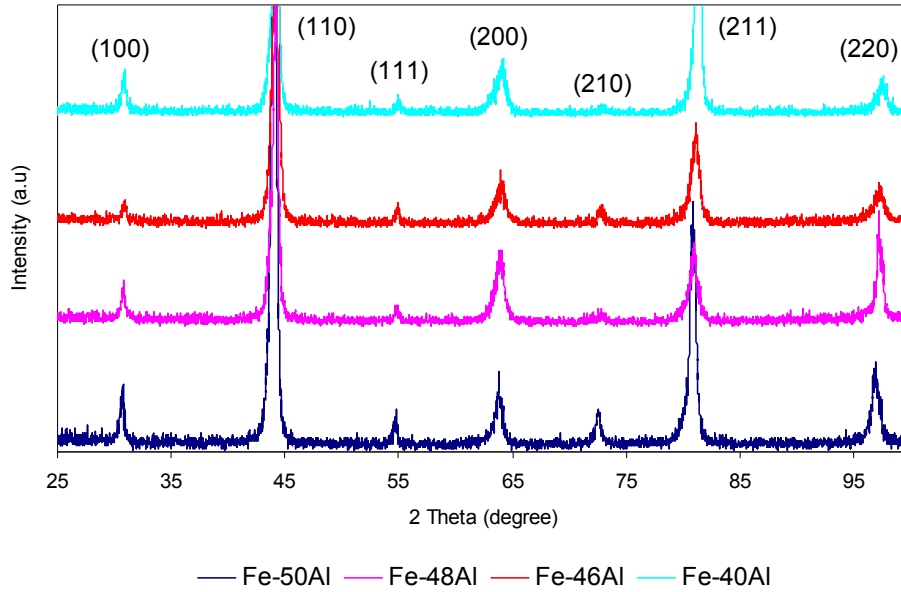
4.1.2 Deneysel Bulgular ve Tartışma

4.1.2.1 İkili Fe-Al Alaşımları

İkili stokiometrik Fe-50Al alaşımı ve stokiometrik olmayan Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarının karakterizasyon işlemlerinde sırasıyla mikro yapı analizleri, X-Işınları analizleri ve termal analiz ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Optik mikroskop ve taramalı elektron mikroskobu ile yapılan mikro yapı analizlerinden alaşımların iri taneli yapıya sahip tek faz mikro yapıda oldukları anlaşılmaktadır (Şekil 4.2).



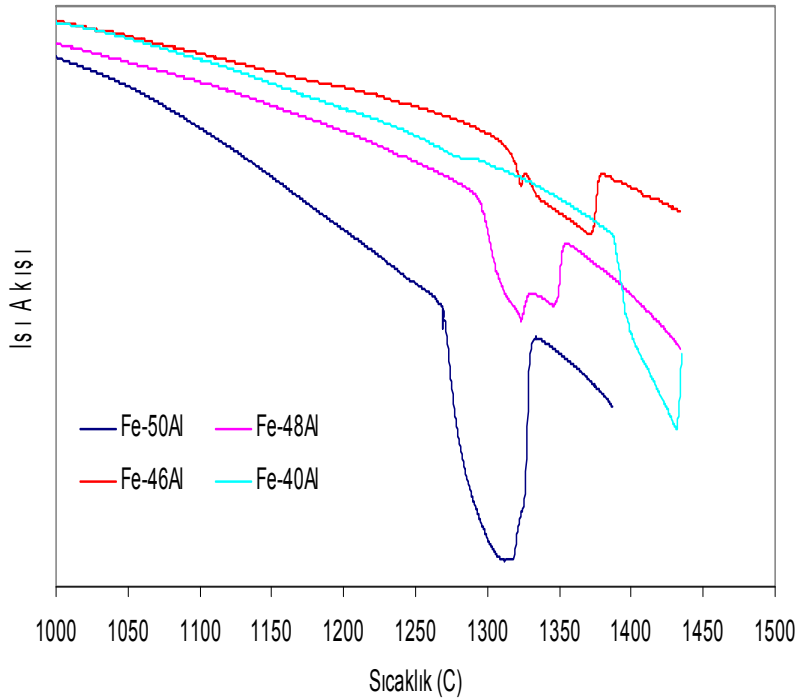
Şekil 4.2. Isıl işlem görmüş ikili Fe-40Al alaşımına ait mikroyapı fotoğrafları; (a) SEM (b) Optik mikroskop



Şekil 4.3. Isıl işlem görmüş ikili Fe-50Al, Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarına ait X-Işınları spektrumu.

Alaşımlar için kalitatif faz analizi gerçekleştirmek amacıyla X-Işını ölçümleri Spektrumlar $2\theta=25^{\circ}-100^{\circ}$ açı aralığında dalga boyu 1.540562\AA olan Cu-K α radyasyonu kullanılarak sürekli kayıtlarla gerçekleştirildi. X-Işınları faz analizi sırasında 7 kırınım yansıması göz önünde bulunduruldu. Elde edilen nümerik diyagram ASTM kart arşivinde B2 tip düzenli yapıya sahip stokiometrik Fe-50Al alaşımı için bulunan standart verilerle kıyaslanmıştır. Bu kıyaslama neticesinde elde edilen deneysel verilerin standart verilerle bire bir uyduğu gözlemlenmiştir. İkili alaşımlara ait X-Işınları analizleri Şekil 4.3’de verilmektedir. B2 tip düzenli yapıya ait temel yapı (miller indisleri toplamı çift sayı, örnek:(110),(200)) ve süper kafes piklerinin (miller indisleri toplamı tek sayı, örnek:(111),(210)) tamamı Fe-50Al, Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarının hepsi için de bulunmaktadır.

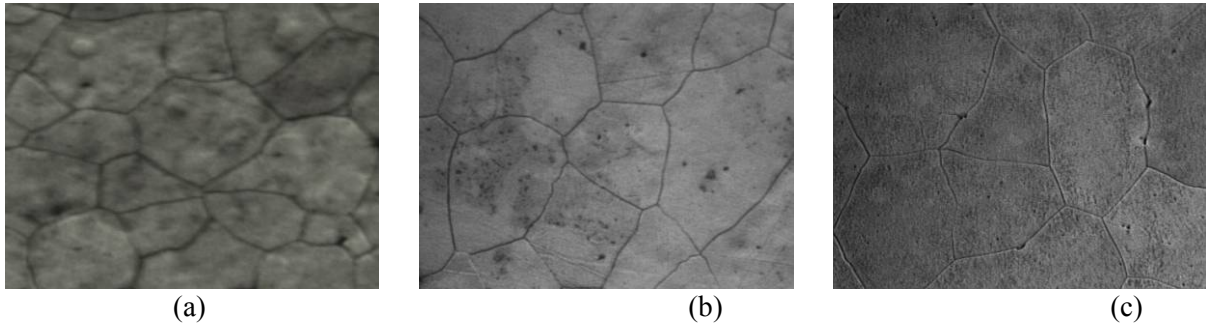
İkili alaşımlarda düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarının tespiti ve bu sıcaklıkların Fe-Al faz diyagramında bulunan sıcaklıklarla uyumunu gözlemlemek için termal analiz ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Bu ölçümler neticesinde, eklenecek üçüncül alaşım elementi ilavesinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarına etkisini gözlemlemek için ısıl işlem görmüş stokiometrik Fe-50Al alaşımına ait termal analiz ölçümü referans olarak kabul edilmiştir. İkili alaşımların termal analiz grafiklerine göre alaşımdaki Al konsantrasyonu azaldıkça düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığının Fe-Al faz diyagramındaki paralel olarak azaldığı gözlemlenmiştir, Şekil 4.4. Ayrıca dört ikili alaşım için de hesaplanan solidus ve likuidus sıcaklıklarının faz diyagramında verilen değerlere yakın olduğu görülmüştür.



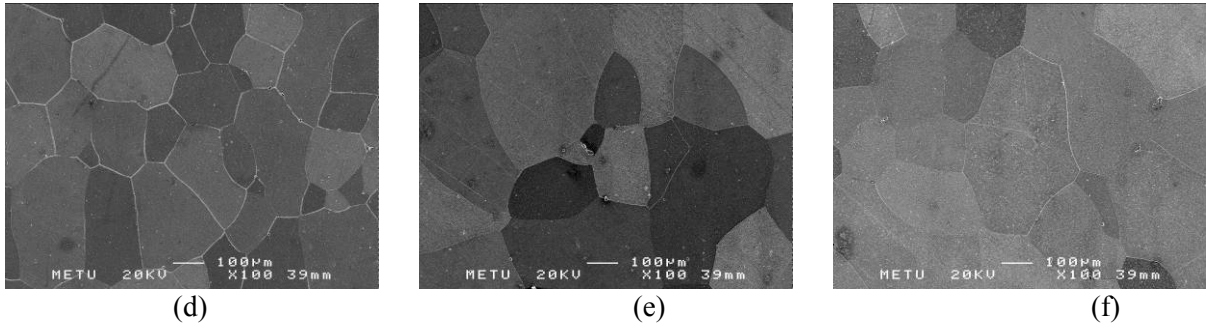
Şekil 4.4. Isıl işlem görmüş ikili Fe-50Al, Fe-48Al, Fe-46Al ve Fe-40Al alaşımlarına ait termal analiz grafikleri.

4.1.2.2. Üçlü Fe-Al-X Alaşımları

Şekil 4.5 ve Şekil 4.6’da sırasıyla ısıl işlem görmüş Fe-Al-Ni ve Fe-Al-Cr üçlü alaşımlarının mikro yapı fotoğrafları gösterilmektedir. %1, 3 veya 5 atomik oranda Cr veya Ni ilaveli üçlü alaşımların tek faz katı çözelti oldukları optik mikroskop ve taramalı elektron mikroskobu araştırmalarında gözlemlenmiştir. Tek fazlı mikro yapı Cr ve Ni’in B2 fazı içerisindeki çözünürlüğünden kaynaklanmaktadır. Ayrıca, B2 tip düzenli Fe-Al alaşımlarına %1-5 atomik oranda Cr veya Ni ilavesinin yalnızca B2 fazına sahip Fe-Al-Cr(Ni) alaşımları oluşturduğu (TITRAN et al., 1985) tarafından da belirtilmiştir.



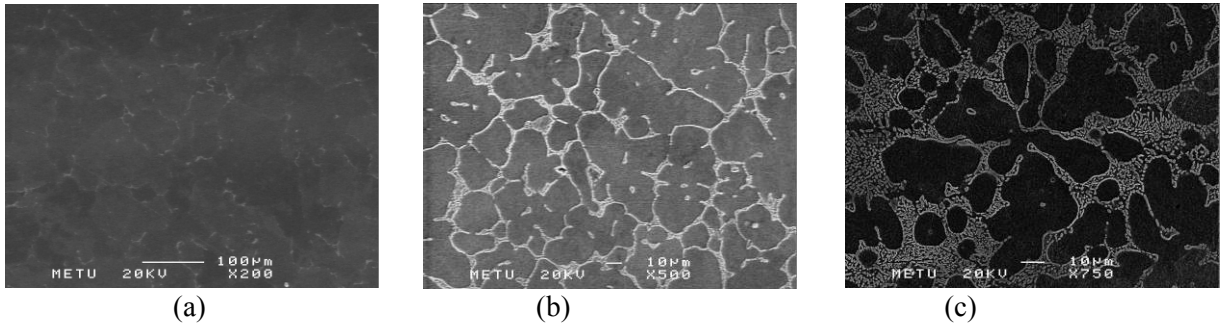
Şekil 4.5. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ni üçlü alaşımlarının optik mikroskop mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Ni (b) Fe-47Al-3Ni (c) Fe-45Al-5Ni



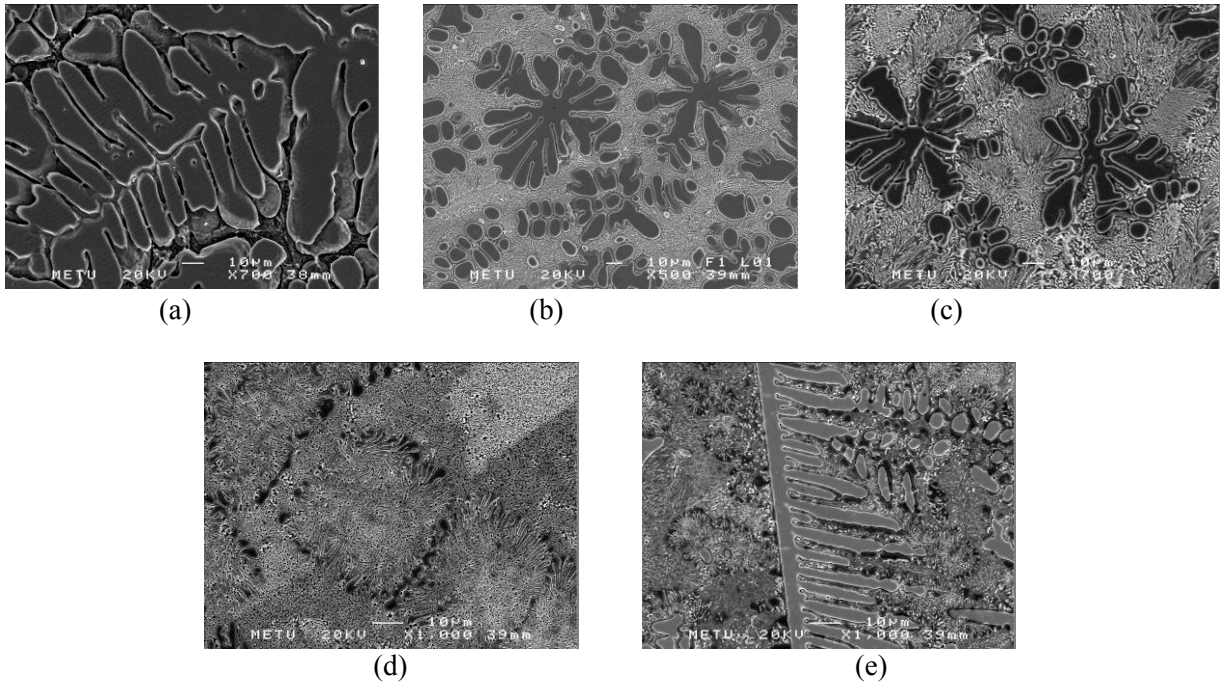
Şekil 4.6. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Cr üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Cr (b) Fe-47Al-3Cr (c) Fe-45Al-5Cr

Isıl işlem görmüş Nb ilaveli üçlü alaşımların mikro yapı fotoğrafları Şekil 4.7’te gösterilmektedir. Fe-Al-Nb üçlü alaşımlarında $(Fe,Al)_2Nb$ Laves fazının çökmesiyle ikinci bir fazın oluştuğu gözlemlenmektedir. Fe-49Al-1Nb alaşımının mikro yapısı iri taneli Fe-Al tabanlı matris fazı ve az miktarda tane sınırlarında çökelen küçük Laves fazı çökeltilerinden oluşmaktadır. Bununla birlikte, %3 veya 5 atomik oranda Nb ilaveli üçlü alaşımların mikro yapıları ise birincil kristalleşmiş FeAl esaslı faz ile birlikte Laves fazı ve FeAl esaslı fazdan oluşan ötektik karışımdan oluşmaktadır. Nb ilaveli FeAl esaslı alaşımlarda iki fazlı mikro yapı ortaya çıkmasının temel nedeni Nb’un bu tip yapı içerisinde sınırlı miktardaki çözünürlüğüne bağlanabilir (TITRAN et al., 1985).

Hf'un B2 tip düzenli FeAl içerisindeki sınırlı çözünürlüğünden ötürü oluşan çift fazlı yapı Şekil 4.8.'de gösterilmektedir. Isıl işlem görmüş Fe-49Al-1Hf üçlü alaşımının tane sınırlarında çökelmeye başlayan ikinci faz Hf konsantrasyonu arttıkça iyice belirgin hale gelmiştir. Ayrıca, SEM fotoğraflarından açıkça görüldüğü üzere Hf miktarı arttıkça ötektik karışım miktarı da artmaktadır. Hf miktarını %7 atomik orana çıkarttığımız zaman Şekil 11(d)'den de görüldüğü üzere yapının tamamına yakın bir kısmının ötektik karışımdan oluştuğu gözlemlenmektedir.



Şekil 4.7. Değişik bileşime sahip üçlü ısıl işlem görmüş alaşım mikro yapı fotoğrafları
(a) Fe-49Al-1Nb (b) Fe-47Al-3Nb (c) Fe-45Al-5Nb



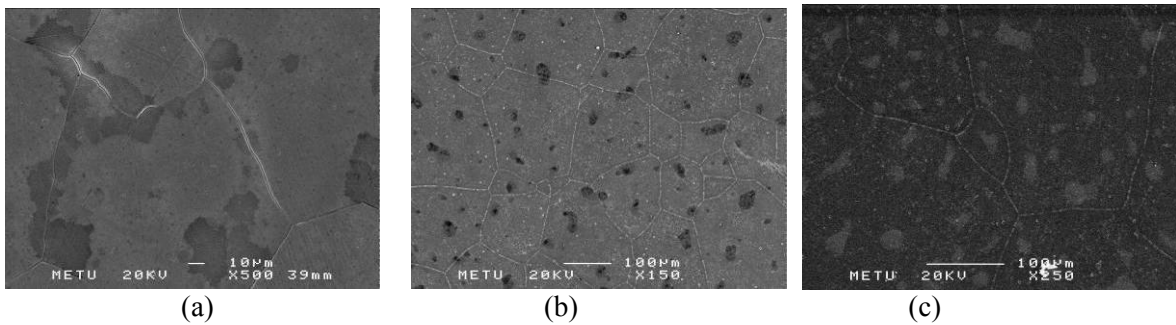
Şekil 4.8. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Hf (b) Fe-47Al-3Hf (c) Fe-45Al-5Hf (d) Fe-43Al-7Hf (e) Fe-41Al-9Hf

Bununla birlikte, %9 atomik oranda Hf içeren Fe-41Al-9Hf alaşımında tekrar belirgin bir şekilde FeAl esaslı dendritlerin oluştuğu görülmüştür. Özet olarak, Hf ilaveli üçlü alaşımların mikro yapıları FeAl esaslı faz ve Laves fazı karışımından oluşan ötektik karışım ile beraber birincil kristalleşmiş FeAl esaslı fazın bileşiminden oluştuğu söylenebilir.

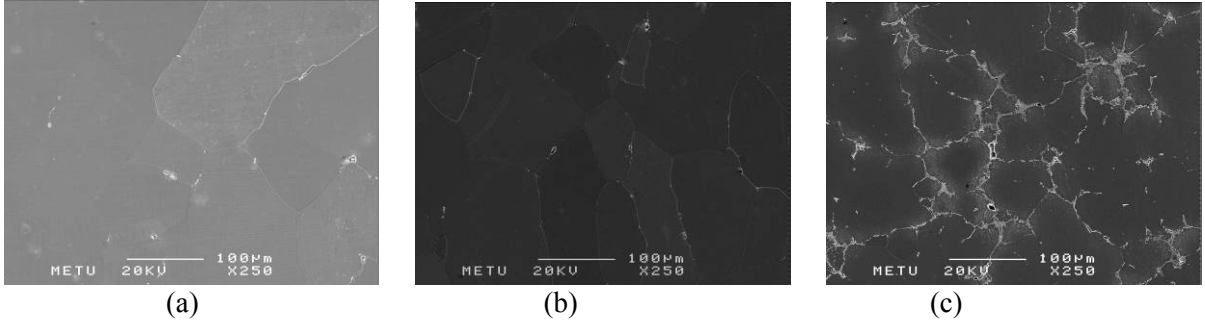
Şekil 4.9-4.11'de sırasıyla ısıtıl işlem görmüş Fe-Al-Mo, Fe-Al-Ta ve Fe-Al-Zr üçlü alaşımlarına ait taramalı elektron mikroskobu mikroyapı fotoğrafları gösterilmektedir. Şekil 4.9.'da görüldüğü üzere her üç Fe-Al-Mo alaşımının da yapısı tek faz katı çözüldür. Literatürde molibdenin Fe-Al alaşımlarındaki çözünürlüğünün az olması ve alaşımdaki Al miktarı arttıkça bu çözünürlüğün artmasından bahsedilmektedir, bizim hazırladığımız alaşımlarda Al yüzdesi yüksek olduğu için molibdenin çökelti oluşturmaksızın tek faz katı çözelti yapısı gayet doğaldır.

Öte yandan, Fe-Al-Ta üçlü alaşımlarında Fe-49Al-1Ta ve Fe-47Al-3Ta alaşımları tek faz katı çözelti yapıda iken Fe-45Al-5Ta alaşımının yapısında tane sınırlarında çökelen Laves fazı bulunmaktadır, Şekil 4.10. Çökelen faz tantalın B2 tip düzenli FeAl alaşımındaki sınırlı çözünürlüğünden kaynaklanmaktadır.

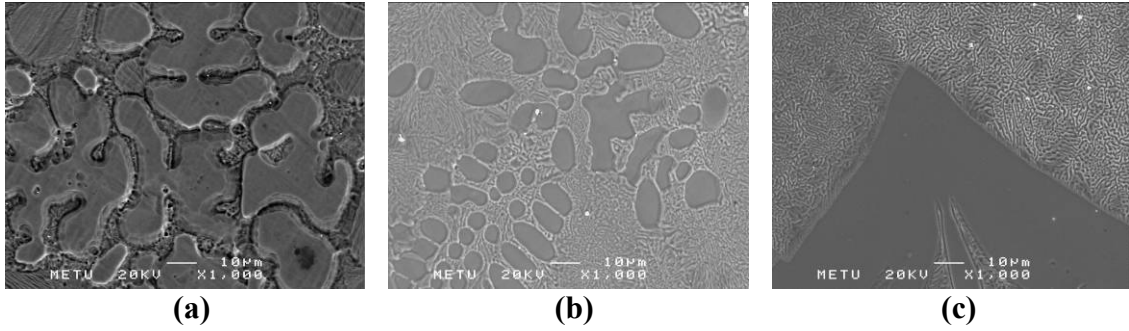
Şekil 4.11'de görüldüğü üzere her üç Fe-Al-Zr üçlü alaşımı çift fazlı mikro yapıya sahiptir. Bu tip alaşımlarda görülen çift fazlı mikro yapı Zr'un Fe-Al alaşımlarındaki çözünürlüğünün bütün Al miktarlarında % 0,1 atomik oranın altında olmasıdır (STEIN et al., 2005). % 1 atomik orandaki Zr ilavesi ile bile Fe-Al-Zr faz diyagramında (STEIN et al., 2004) bulunan τ_1 adı verilen $Zr(Fe, Al)_{12}$ Laves fazının çökeldiği görülmüştür. Zr oranı artırılıp % 3 atomik orana çıkarıldığında mikro yapıda birincil kristalleşmiş Fe-Al esaslı faz ve bu fazla Laves fazının karışımından oluşan ötektik karışım görülmektedir. Şekil 4.11(b)'de koyu renkle gösterilen birincil kristalleşmiş fazın Fe-Al esaslı faz olduğu elemental analiz ölçümleri ile de doğrulanmıştır, Şekil 4.12. % 5 Zr içeren Fe-45Al-5Zr alaşımı da yine çift fazlı yapıya sahipken yalnızca bu alaşımda birincil kristalleşen faz Laves fazıdır. Bu sonuç Şekil 4.13'te verilen elemental analiz ölçümleri ile de doğrulanmıştır.



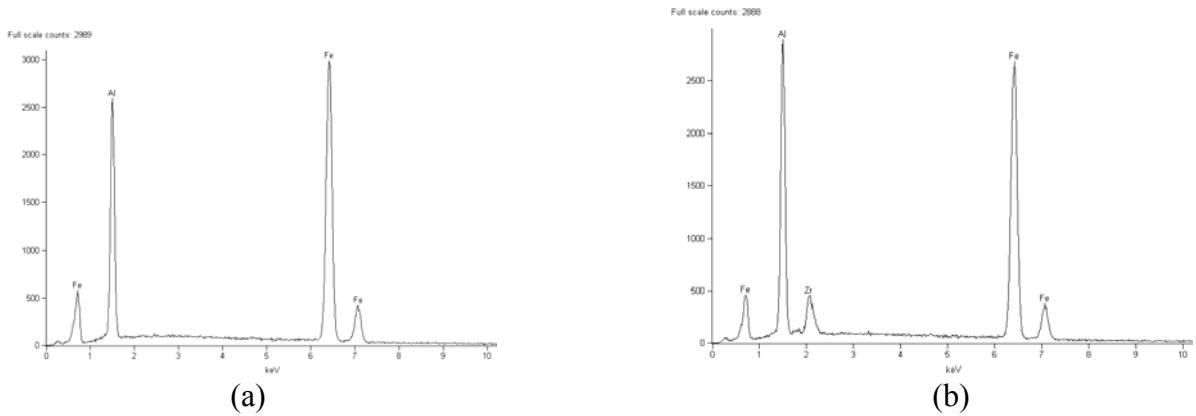
Şekil 4.9. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Mo (b) Fe-47Al-3Mo (c) Fe-45Al-5Mo



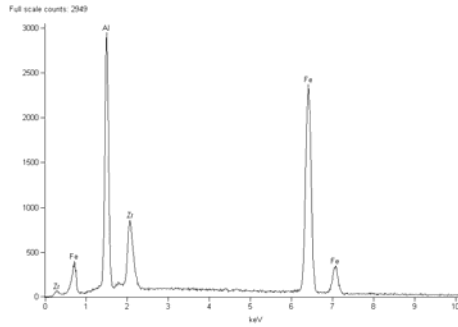
Şekil 4.10. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta üçlü alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Ta (b) Fe-47Al-3Ta (c) Fe-45Al-5Ta



Şekil 4.11. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Zr alaşımlarının taramalı elektron mikroskobu mikro yapı fotoğrafları (a) Fe-49Al-1Zr (b) Fe-47Al-3Zr (c) Fe-45Al-5Zr.



Şekil 4.12 Fe-47Al-3Zr alaşımı mikro yapı fotoğrafında görülen (a) koyu renkli birincil kristalleşmiş Fe-Al esaslı faza ait elemental analiz (b) açık renkli Laves fazına ait elemental analiz.



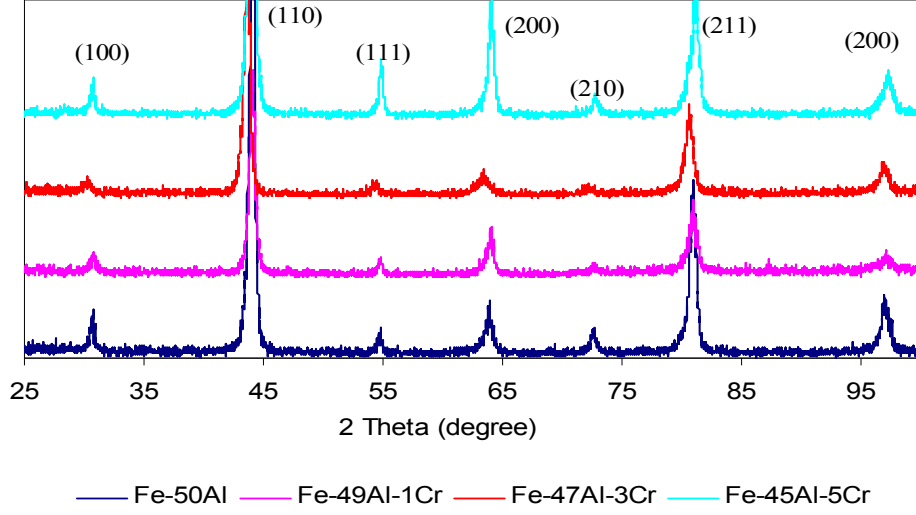
Şekil 4.13. Fe-45Al-5Zr alaşımı mikro yapı fotoğrafında görülen koyu renkli birincil kristalleşmiş Laves fazına ait elemental analiz.

Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-X (X=Cr, Ni, Nb, Hf, Mo, Ta, Mn, W ve Zr) alaşımlarına ait X-Işınları spektrumları sırasıyla Şekil 4.14-4.22' te verilmektedir.

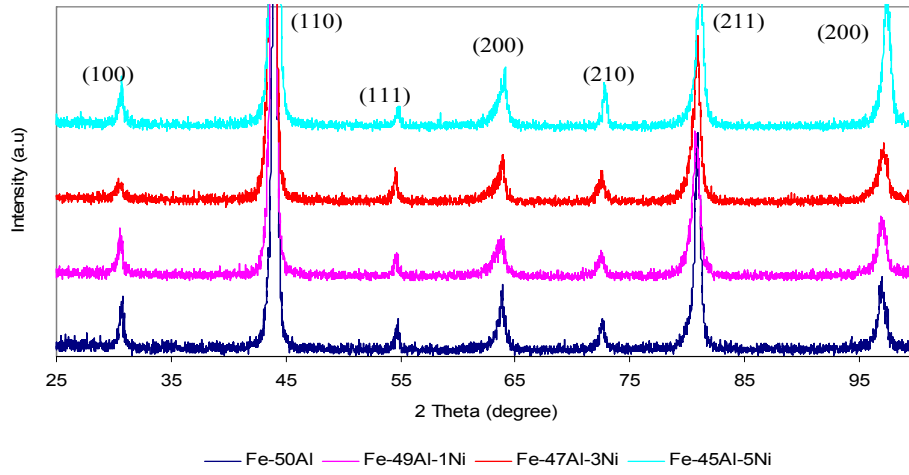
Şekil 4.14. - Şekil 4.16'da verilen ısıl işlem görmüş X=Cr, Ni, Mo içeren Fe-Al-X alaşımlarına ait X-Işınları örneğinde sadece B2 tip yapıya ait temel yapı ve süper kafes pikleri görülmektedir. Elde ettiğimiz bu sonuç yukarıda bahsedilen mikro yapı analizlerinde elde edilen sonuçlarla birebir uyuşmaktadır. Bu sonuç, mikro yapı analizlerinde de bahsedildiği gibi Cr, Ni veya Mo ilavesinin sadece B2 fazına sahip Fe-Al-Cr(Ni) alaşımları oluşturduğu sonucunu doğrulamaktadır.

Öte yandan Mikro yapı analizinde belirtilen Fe-Al-Nb alaşımlarının çift fazlı yapısı X-Işınları sonuçları ile de doğrulanmıştır. Fe-49Al-1Nb alaşımına ait XRD eğrisinde B2 yapıya ait temel yapı ve süper kafes piklerinden başka herhangi bir pik görülmemektedir, Şekil 4.17. Fe-47Al-3Nb alaşımının XRD örneğinde ise Fe₂Nb bileşiğine ait ilave piklerin ortaya çıktığı görülmektedir. Bununla birlikte, alaşım içerisindeki Nb oranı %5'e çıkarıldığı zaman Fe₂Nb bileşiğine ait piklerde hem sayıca hem de şiddetçe artışın olduğu açıkça görülmektedir. Fe-Al-Nb alaşımları için elde edilen X-Işınları sonuçları mikro yapı analizinde görülen Fe₂Nb Laves fazının oluşmasını tekrar doğrulamaktadır.

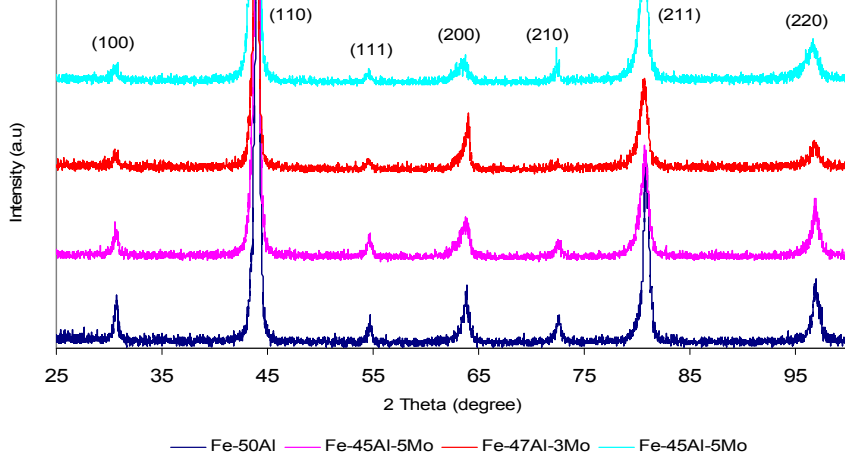
Hf'un B2 tip düzenli FeAl metallar arası bileşiklerinde çözünürlüğünün az olması nedeniyle görülen çift faza sahip yapı X-Işınları analizleri ile de görülmektedir. Fe-49Al-1Hf alaşımına ait XRD örneğinde B2 yapı piklerine ilave bazı piklerin olduğu Şekil 4.18.'den açıkça görülmektedir. Bununla birlikte alaşım içerisindeki Hf miktarı arttıkça ilave piklerin hem sayıca hem de şiddetçe arttığı hatta Fe-45Al-5Hf alaşımı için bazı süper kafes ve temel yapı piklerinin kaybolduğu görülmektedir. Ortaya çıkan ilave pikler Fe₂Hf Laves fazı ve HfFeAl üçlü metallar arası bileşiğine aittir. Elde edilen bu sonuç Vedula ve Stephens tarafından geçmiş yıllarda yapılan bir çalışmada da belirtilmiştir (VEDULA ve STEPHENS, 1987). Hf miktarının %7 ve 9 atomik orana çıkarılması mikroyapı analizlerinde olduğu gibi değişik sonuçların ortaya çıkmasına yol açmıştır. Yukarıda bahsedilen süper kafes ve temel yapı piklerinin sayısındaki azalmasına ek olarak var olan piklerinde şiddetlerinde önemli bir azalma meydana gelmiştir.



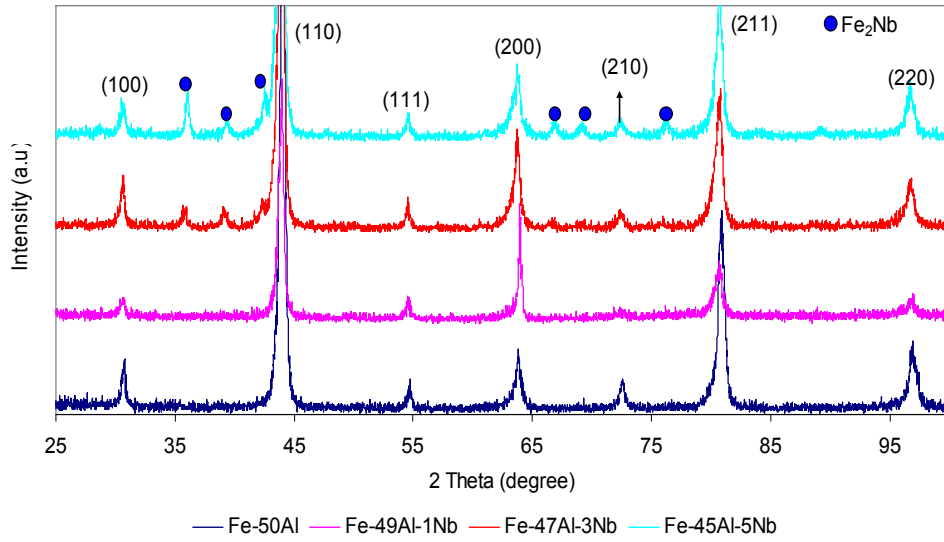
Şekil 4.14. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Cr alaşımlarının XRD örnekleri.



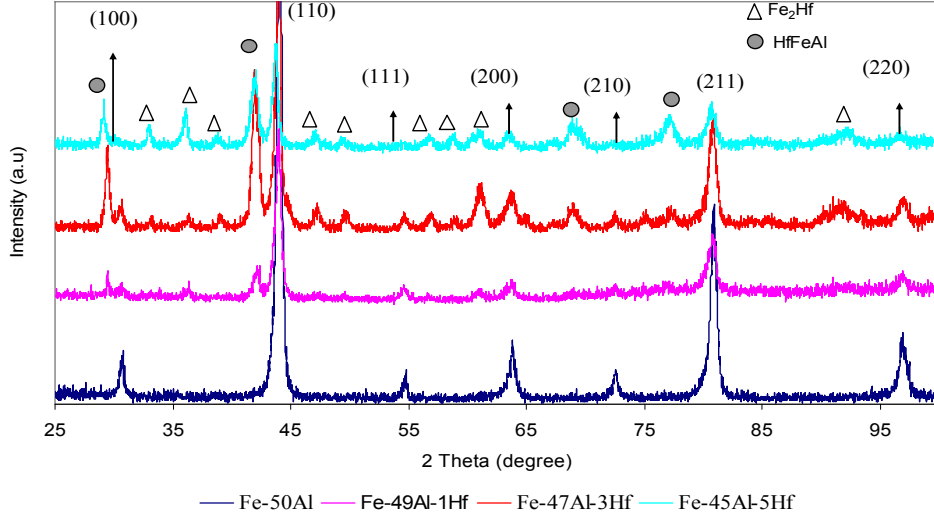
Şekil 4.15. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Ni alaşımlarının XRD örnekleri.



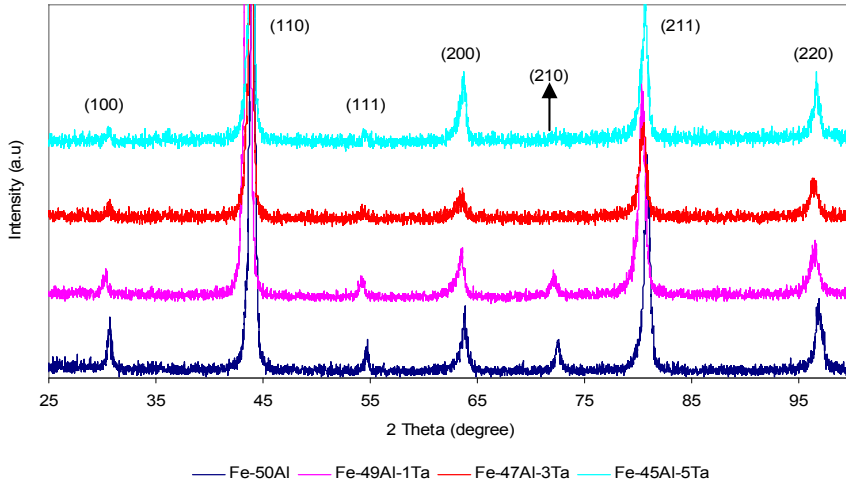
Şekil 4.16. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.



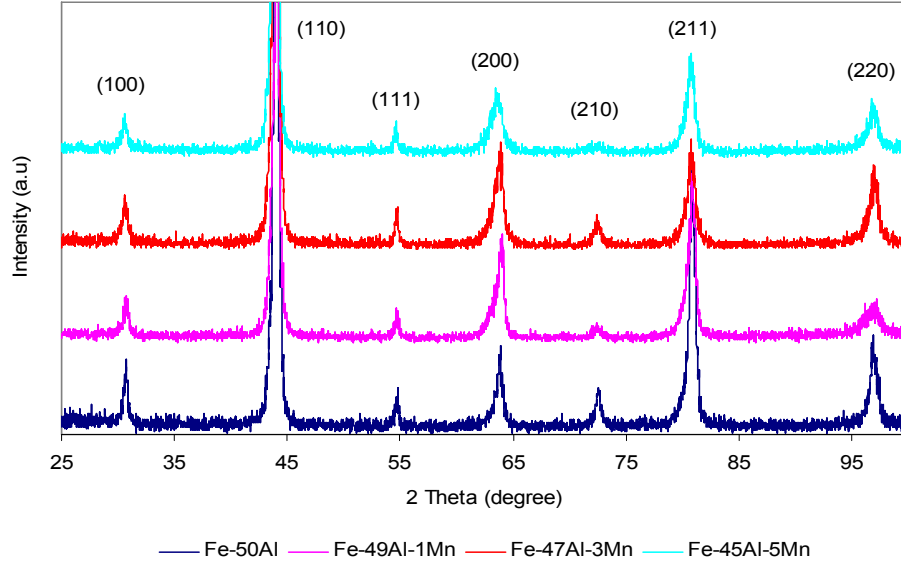
Şekil 4.17. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Nb üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.



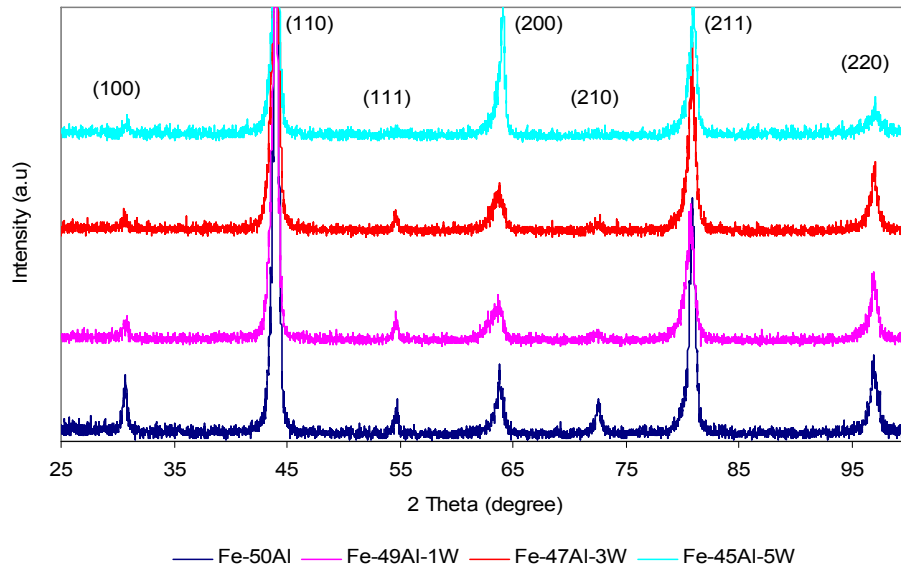
Şekil 4.18. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.



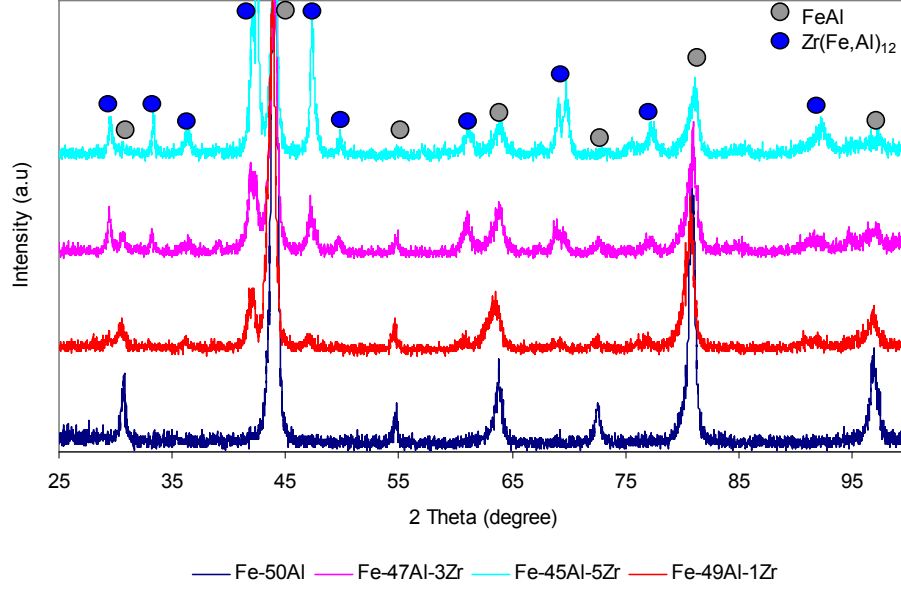
Şekil 4.19. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta üçlü alaşımlarının XRD örnekleri.



Şekil 4.20. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Mn alaşımlarının XRD örnekleri.



Şekil 4.21. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-W alaşımlarının XRD örnekleri.



Şekil 4.22 Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Zr alaşımlarının XRD örnekleri.

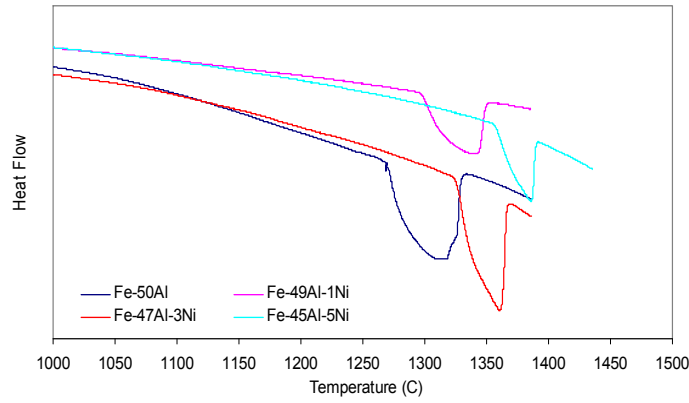
Şekil 4.19.'da verilen üçlü Fe-Al-Ta alaşımlarına ait X-Işınları örnekleri, her üç alaşım için de tek faz katı çözelti yapısı olduğunu göstermektedir. Fakat Fe-45Al-5Ta alaşımı için mikroyapı analizlerinde tane sınırlarında gözlenen Laves fazı çökmesi X-Işınları analizlerinde görülmemiştir.

Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Mn ve Fe-Al-W alaşımlarına ait X-Işınları spektrumları sırasıyla Şekil 4.20 ve Şekil 4.21'de verilmiştir. Bu spektrumlara bakılarak üçlü alaşım sisteminin her ikisi için de tek faz katı çözelti yapıya sahip oldukları söylenebilir. Bu durum Mn'ın FeAl metaller arası bileşiklerinde yüksek çözünürlüğünden kaynaklanmaktadır. Bununla birlikte W'in FeAl bileşiği içerisindeki çözünürlüğü ile ilgili literatürde kesin bir bilgi olmamasına karşın Al oranı yüksek olan Fe-Al esaslı alaşımlarda daha yüksek olduğu söylenmektedir.

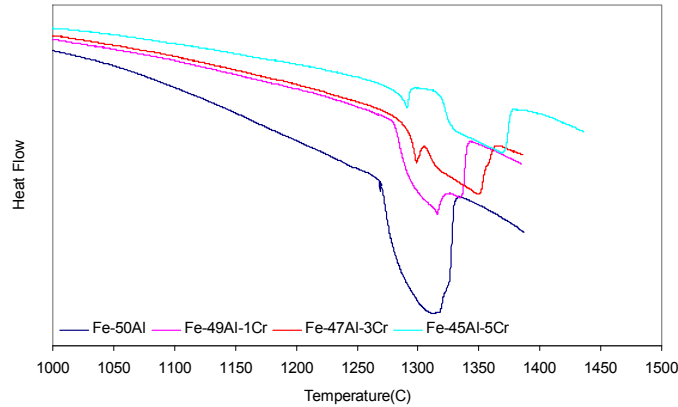
Şekil 4.22'de ise ısıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-Zr alaşımlarına ait X-Işınları spektrumu gösterilmektedir. Mikro yapı incelemelerinde ortaya çıkan çift fazlı yapıya X-Işınları analizlerinde de rastlanmıştır. B2 tip düzenli yapıya ait temel yapı ve süper kafes piklerine ilaveten τ_1 fazına ait pikler de bulunmaktadır. Alaşım içerisindeki Zr miktarı arttıkça τ_1 fazına ait piklerin hem sayıca hem şiddetçe arttığı görülmüştür. Bu durum tane sınırlarında çökmeye başlayan τ_1 fazının Zr miktarı arttıkça alaşım içerisindeki yüzdesinin arttığının bir göstergesidir.

Öte yandan, bir önceki bölümde değinilen ve teorik olarak hesaplanan alaşım elementi ilavesinin Fe-Al-X alaşımlarının düzen-düzensizlik faz dönüşüm ve erime sıcaklıklarına etkisinin deneysel yöntemlerle kıyaslanması ve irdelenmesi için 20-30 mg'lık numuneler kullanılarak yüksek saflıktaki Ar gaz atmosferi altında termal analiz ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Bu ölçümler esnasında 5 ile 40 K/dakika arasında farklı ısıtma hızları uygulanmıştır ve 10K/dakika optimum ısıtma hızı olarak uygun görülmüştür. Ölçümlerin doğruluğunun ispatlanması aynı numune tekrar analiz edilerek ya da aynı alaşımın hem dökülmüş haldeki hem de ısıl işlem görmüş haldeki numuneleri analiz edilerek gerçekleştirilmiştir. Isıl işlem görmüş üçlü Fe-Al-X (X=Cr, Ni, Mo, Nb, Hf, Ta, Mn, W ve Zr) alaşımlarına ait DSC termogramları sırasıyla Şekil 4.23-4.31' te verilmektedir.

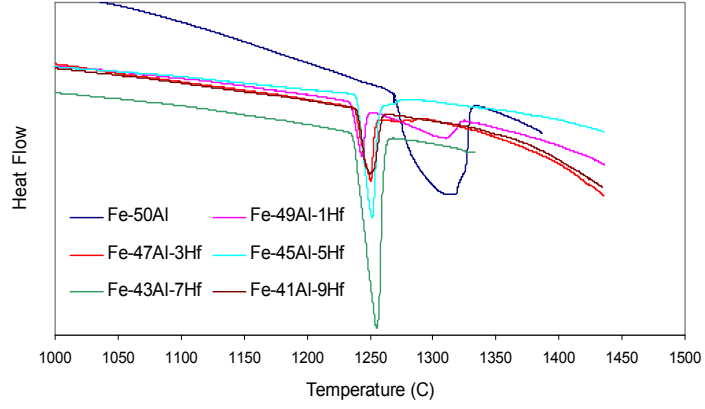
Birinci mertbe dönüşüm reaksiyonlarının (örnek; erime) sıcaklıkları (HOHNE et al., 1997) çalışmasında verilen ekstrapole edilmiş pik-başlangıç tanımına göre belirlenmiştir. B2↔A2 düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıkları gibi ikinci mertbe dönüşümlerde ise pik sıcaklığı dönüşüm sıcaklığı olarak kabul edilmiştir (STEIN ve PALM, 2007). DSC termogramlarından bu şekilde belirlenen tüm faz dönüşüm sıcaklıkları proje konusu Fe-Al-X alaşımları için Tablo 4.3 te verilmektedir.



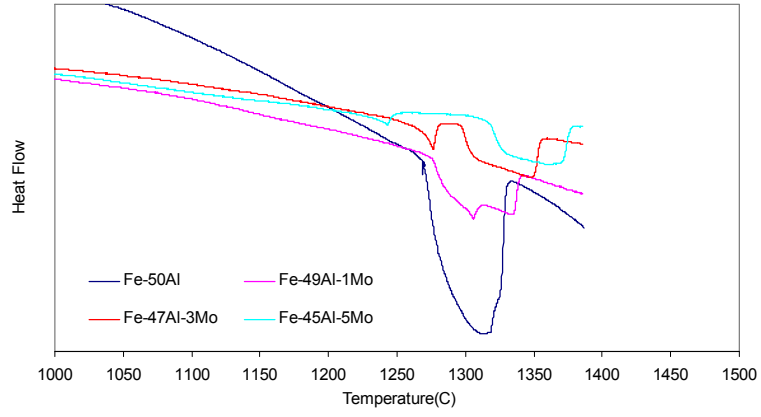
Şekil 4.23. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ni alaşımlarının DSC eğrileri.



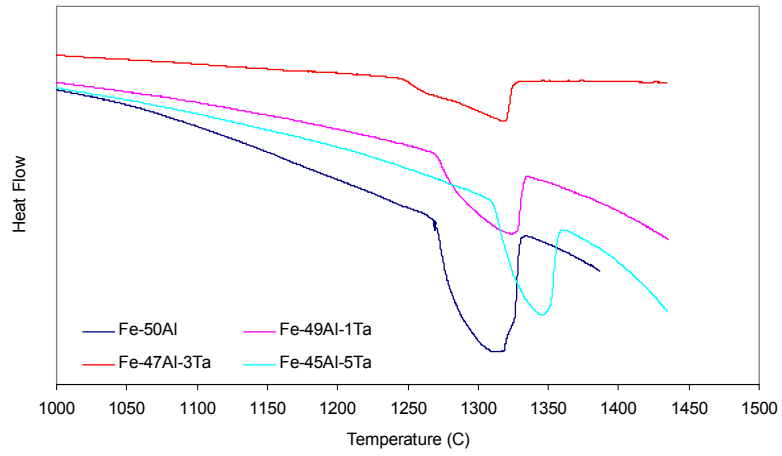
Şekil 4.24. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Cr alaşımlarının DSC eğrileri.



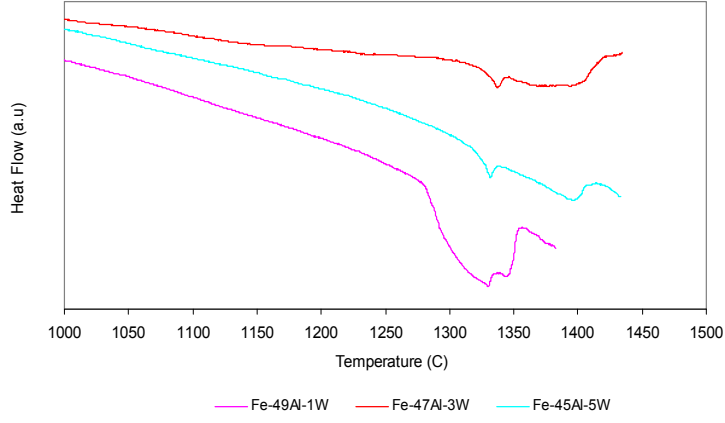
Şekil 25. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Hf alaşımlarının DSC eğrileri.



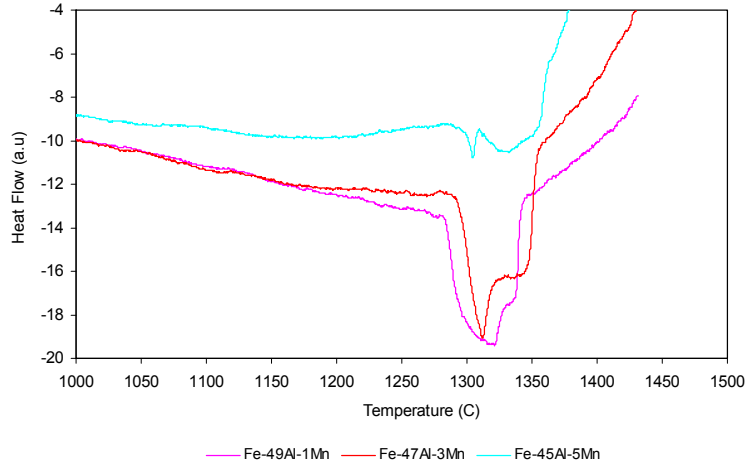
Şekil 4.26. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mo alaşımlarının DSC eğrileri.



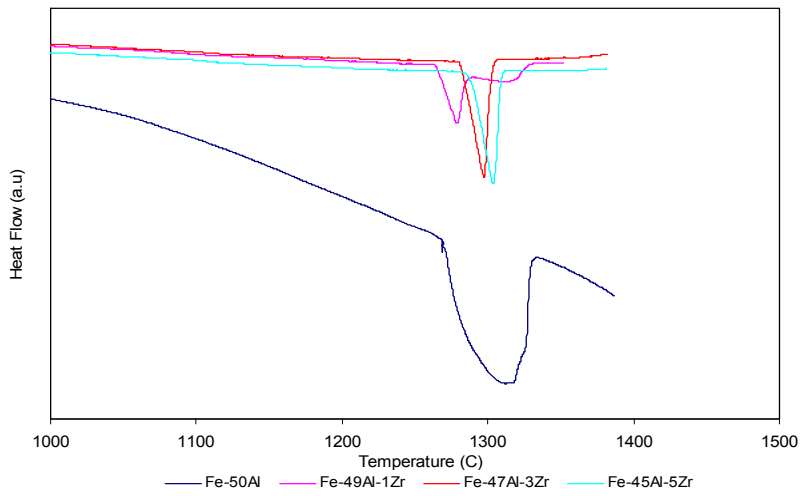
Şekil 4.27. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Ta alaşımlarının DSC eğrileri.



Şekil 4.28. Isıl işlem görmüş Fe-Al-W alaşımlarının DSC eğrileri.



Şekil 4.29. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Mn alaşımlarının DSC eğrileri.

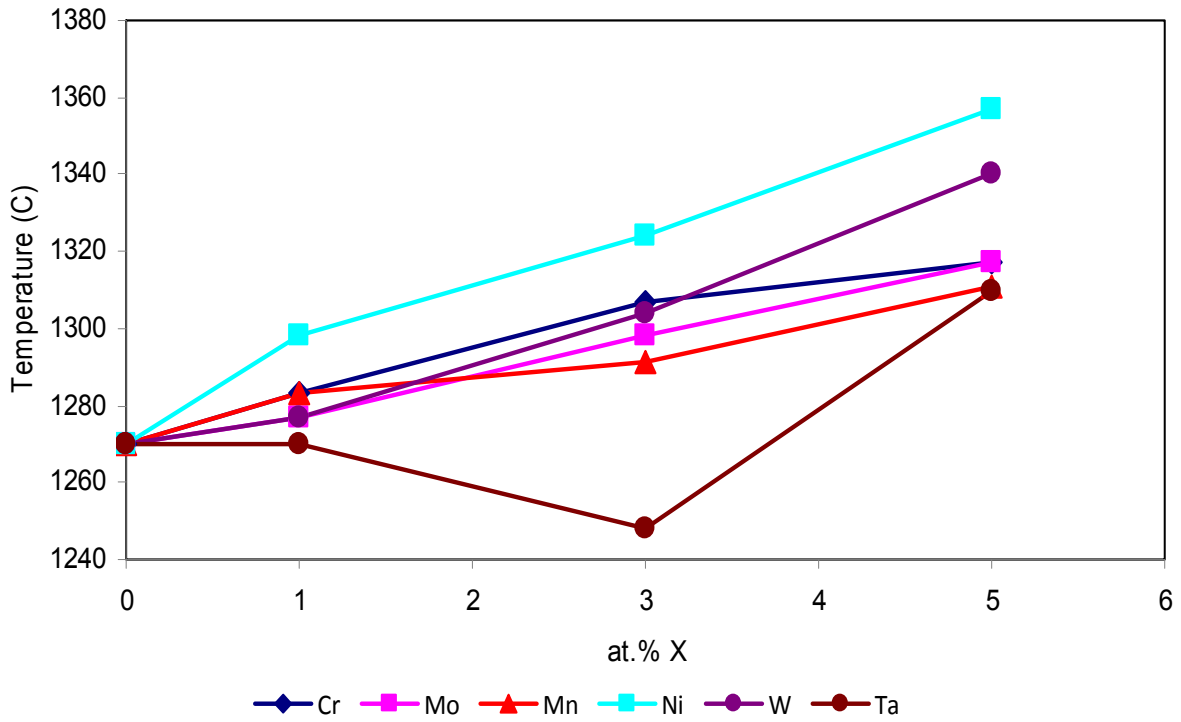


Şekil 4.30. Isıl işlem görmüş Fe-Al-Zr alaşımlarının DSC eğrileri.

Tablo.4.3. Fe-Al-X alaşımlarının deneysel olarak belirlenen faz dönüşüm sıcaklıkları

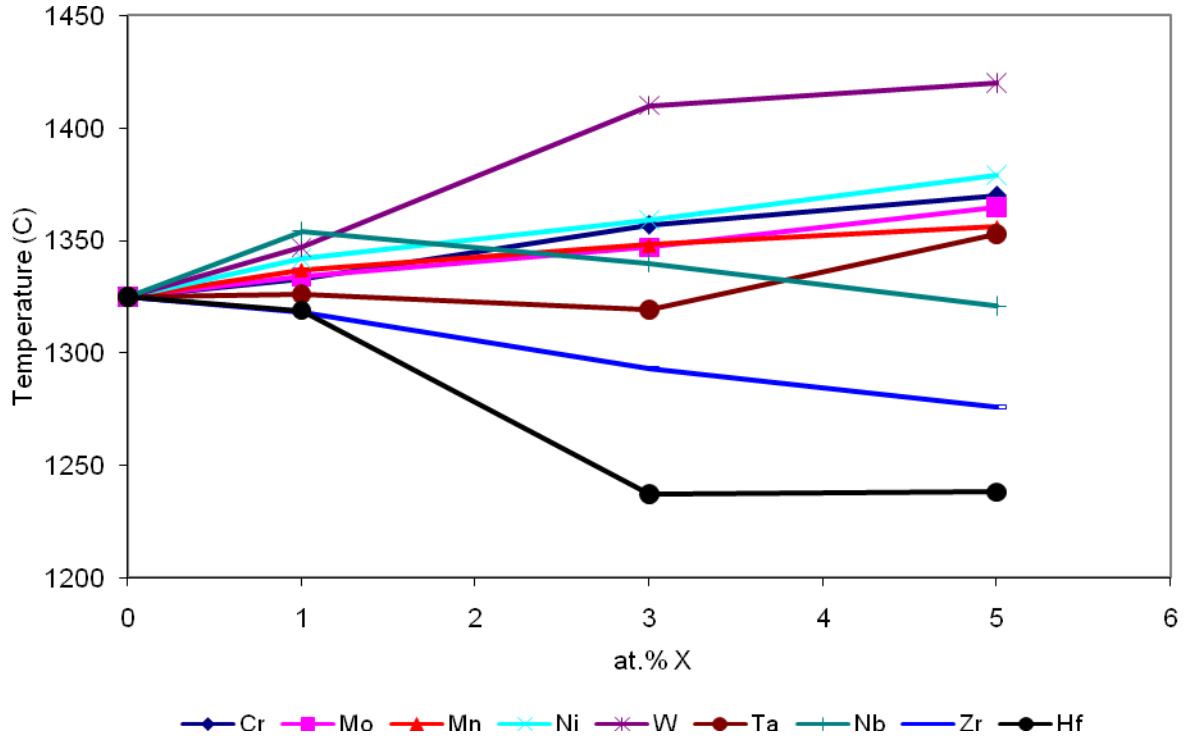
Alaşım	T_{solidus}/T_{ötektik} (°C)	T_{liquidus} (°C)	düzen-düzensizlik faz dön. sıc.
Fe-50Al	1270	1325	1318
Fe-49Al-1Ni	1298	1342	1337
Fe-47Al-3Ni	1324	1359	1360
Fe-45Al-5Ni	1357	1379	1385
Fe-49Al-1Nb	1225	1354	1327
Fe-47Al-3Nb	1221	1340	1337
Fe-45Al-5Nb	1265	1321	*
Fe-49Al-1Mo	1277	1334	1335
Fe-47Al-3Mo	1298	1347	1274
Fe-45Al-5Mo	1317	1365	1240
Fe-49Al-1Cr	1283	1333	1327
Fe-47Al-3Cr	1307	1357	1299
Fe-45Al-5Cr	1317	1370	1292
Fe-49Al-1Hf	1245	1319	*
Fe-47Al-3Hf	1247	1237	*
Fe-45Al-5Hf	1250	1238	*
Fe-43Al-7Hf	1254	1239	*
Fe-41Al-9Hf	1248	1246	*
Fe-49Al-1Mn	1283	1337	1329
Fe-47Al-3Mn	1291	1348	1322
Fe-45Al-5Mn	1311	1356	1303
Fe-49Al-1Zr	1277	1318	*
Fe-47Al-3Zr	1302	1293	*
Fe-45Al-5Zr	1303	1276	*
Fe-49Al-1Ta	1270	1326	1329
Fe-47Al-3Ta	1248	1319	1321
Fe-45Al-5Ta	1310	1353	1341
Fe-49Al-1W	1277	1347	1337
Fe-47Al-3W	1304	1410	1335
Fe-45Al-5W	1340	1420	1330

Tüm termal analiz sonuçları birlikte düşünüldüğü zaman değişik sonuçların ortaya çıktığı gözlemlenmektedir. Elde edilen solidus sıcaklıklarına bakıldığında zaman tek faz katı çözümlü mikro yapıya sahip alaşımların (Fe-Al-X, X= Ni, Cr, Mn, Mo ve W) solidus sıcaklığı alaşım elementinin miktarına bağlı olarak artmaktadır, Şekil 4.31. Bununla birlikte, tane sınırlarında çökelme meydana getiren Ta ilavesinde bu durum söz konusu değildir. Atomik oranda % 1 Ta içeren üçlü alaşımın solidus sıcaklığı ikili alaşımınki ile yaklaşık olarak aynı iken % 3 Ta içeren alaşımın solidus sıcaklığı minimum, % 5 içeren alaşımın solidus sıcaklığı ise maksimum değerine ulaşmıştır. Bu eğilim Ta ilavesinin ikili alaşımın likvidus sıcaklıklarına etkisinde de ortaya çıkmaktadır.



Şekil 4.31. İkili FeAl alaşımının solidus sıcaklığının üçüncül alaşım ilavesinin türü ve miktarı ile değişimi.

Buna ilaveten tek faz katı çözümlü mikro yapıya sahip alaşımların (Fe-Al-X, X= Ni, Cr, Mn, Mo ve W) likvidus sıcaklığı da solidus sıcaklığı gibi alaşım elementinin miktarına bağlı olarak artmaktadır, Şekil 4.32. Çift faz içeren numunelere bakıldığında Zr ve Hf ilaveli tüm alaşımlarda likvidus sıcaklığı alaşım elementi miktarı ile ters orantılıdır. Bunun sebebi olarak ötektik karışım meydana getiren üçüncül alaşım elementi ilavesinin ötektik reaksiyondan ötürü alaşımların erime sıcaklıklarını daha düşük sıcaklıklara getirmesidir. Nb ilaveli alaşımların likvidus sıcaklığının önce artıp sonra azalmaya başlaması Nb'un FeAl içerisindeki çözünürlüğü ile ilgilidir. % 1 Nb içeren alaşımın likvidus sıcaklığının fazla olması bu alaşımın sahip olduğu B2 tip düzenli tek faz yapısıdır. % 3 ve/veya % 5 Nb içeren alaşımlarda likvidus sıcaklığının azalması aynen Hf ve/veya Zr içeren alaşımlarda olduğu gibi sahip olduğu çift fazlı yapıdan kaynaklanmaktadır. Fe-47Al-3Hf, Fe-45Al-5Hf ve Fe-41Al-9Hf alaşımlarının likvidus sıcaklıklarının aynı olması ötektik karışım kompozisyonunun yaklaşık olarak bu üç kompozisyon civarında olduğunun bir göstergesidir.



Şekil 4.32. İkili FeAl alaşımının likuidus sıcaklığının üçüncül alaşım ilavesinin türü ve miktarı ile değişimi.

Üçüncül alaşım elementinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığına etkisi incelendiğinde daha önce yapmış olduğumuz ve bir önceki bölümde verilen/özetlenen teorik tahminlerle (MEKHRABOV ve AKDENİZ, 1999) uyum gösterdiği görülmektedir (Tablo.4.4). Titrin tarafından (TITRAN et al., 1985) üç sınıfa ayrılan Fe-Al alaşımlarına ilave edilen üçüncül alaşım elementine göre 1. Grup olarak bahsedilen Fe-Al alaşımları içerisinde yüksek çözünürlüğe sahip Ni, Co, Ti, Si, Mn veya Co teorik çalışmalarda da olduğu gibi düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığını az da olsa artırdığı termal analiz ölçümleri neticesinde (Tablo.4.3) de bulunmuştur. Bu alaşım elementlerinden Ni miktarı arttıkça düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığının arttığı Cr ve Mn ilavesinin % 1 atomik oranda arttırdığı % 3 ve % 5 oranlarda ise azalma eğilimine geçtiği gözlemlenmiştir.

3.Grup olarak nitelendirilen Mo ve W ilavelerinin teorik çalışmalarda olduğu gibi 1.Grup elementlerine kıyasla düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığını daha fazla arttırdıkları termal analiz ölçümleri ile de bulunmuştur. Belirli orandan sonra Cr ve Mn ilavesine benzer azalma eğilimi Mo ve W ilavesinde de görülmüştür.

Nb, Hf ve Zr gibi çözünürlüğü çok az olan elementler erime sıcaklıklarını azalttıklarından ötürü düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıkları hakkında net bir bilgi verilemez. Ta ilavesinin solidus ve likuidus sıcaklıklarına yaptığı benzer etki düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklığına etkisine benzemektedir. Ta ilavesinin bu etkisini tam olarak yorumlayabilmek için birkaç çalışmaya daha ihtiyaç duyulmaktadır.

Tablo 4.4. Üçüncül alaşım elementi ilavesinin düzen-düzensizlik faz dönüşüm sıcaklıklarına etkisinin teorik tahminler (Tablo 3.9.) ve proje kapsamında elde edilen deneysel sonuçlarla kıyaslanması ($T_0=1523K$).

Impurity	$(\Delta T/T_0) \cdot 10^{-3}$	
	Teorik [111]	Deneysel
Ni	18,47	17,42
Cr	4,65	11,36
Mn	15,56	18,18
Ta	198	63,2
W	254	76,8
Mo	228	68,8
Hf	79,8	*
Zr	113	*
Nb	202	62,4

4.2. Hızlı Soğutulmuş Fe-Al-Cr-C Alaşımlarındaki Katılma Mikroyapıları ve Karbür Biçimleri

Fe₃Al ve FeAl alaşımlarının sünekliğini geliştirmek amacıyla uygulanan projeler, yüzey koşullarının kontrolünü, alaşım eklemeleriyle hidrojen çözünürlüğünü ve difuzyonu azaltmayı, termomekanik yaklaşımla tane yapısını inceltmeyi, mikroalaşımlamayla tane sınırı yapışmasını arttırmayı, ve tane şeklini ve yeniden kristallenme koşullarını kontrol etmeyi içermekte iken (PANG ve KUMAR, 1998), yüksek sıcaklık mekanik özelliklerinin geliştirilmesi, ince dağılmış çökelti gibi termal kararlı güçlendirme fazlarının oluşumunu ve bulunuşunu gerektirmektedir. Bu açıdan bakıldığında, MC-karbürleri, perovskit tipi κ -fazı (Fe₃AlC), Laves fazları, boritler ve oksitler, Fe₃Al bazlı alaşımların güçlendirilmesinde kullanılmaya uygun bulunmuştur (SCHNEIDER et al., 2005). Ancak, Fe₃Al bazlı alaşımlara karbon eklenmesinin tane sınırı karbür fazlarının oluşumuna sebep olarak, ikili alaşımda kırılma biçimini tane boyunca yarılmadan tanelerarası dayançsızlığa çevirip sünekliği azalttığı gözlenmiştir (KERR, 1986).

Fe-Al intermetaliklerinin oda sıcaklığı sünekliğini iyileştirmek için yapılan araştırmalar asıl olarak bir çok metal ve metal dışı elementleri kullanarak alaşım tasarımı ve geliştirmesine odaklanmıştır. Yapılan çalışmalarda, bu amaçlar için kromun en etkili element olduğu gözlenmiş ve krom içeren Fe₃Al alaşımlarının oda sıcaklığı süneklik-mukavemet birleşiminin krom içeren benzer alaşımlara kıyasla daha iyi olduğu gösterilmiştir (ZHANG et al., 1998). İlk başlarda, kromun faydalı etkisinin artan yarıma mukavemetine, düşük antifaz sınır enerjisine ve katı yumuşamasına bağlı olarak daha kolay çapraz sekmeye, ve sonraki devrelerde de çevresel gevreklemeye olan direncin artmasına bağlanmıştır (McKAMEY ve LIU, 1990). Oda sıcaklığı sünekliğine ek olarak, krom eklenmesinin Fe-Al intermetaliklerinin yüksek sıcaklık mekanik özelliklerine olan etkileri de göz önüne alınmış ve hem alaşım miktarına hem de sıcaklığa (PALM, 2005) bağlı olup McCamey ve diğerlerinin (McKAMEY et al., 1989) sonuçlarıyla çelişkide olduğu gözlemlenmiştir.

Son kalınlığına yakın tabakaların ekonomik ve hızlı olarak tek bir adımda üretilmesini sağlayan, intermetaliklerin mukavemet ve sünekliklerini alaşım geliştirerek ilerletmenin yanı sıra, tane inceltme ve homojen olarak dağılmış parçacıkların mikroyapıya sokulması, hızlı katılma işlemi oldukça detaylı bir şekilde uygulanmış bir metoddur (MORRIS ve MORRIS, 1990). Sonuç olarak, alaşım kompozisyonu, üretim teknikleri ve termo-mekanik işlemler, yüksek sıcaklık özellikleri ve kolay üretimi sağlayacak oda sıcaklığı sünekliği arasında bir denge sağlayacak şekilde ayarlanmalıdır.

Dolayısı ile, bu çalışmada, alaşım elementi eklentilerinin ve ısıl işlemin, Fe₃Al-tabanlı Fe-Al-Cr-C alaşımlarının mikroyapılarının gelişimi ve geliştirilmesi üzerine olan bütünleşik etkileri ilgi odağıdır. Bu çalışmanın amacı, bahsedilen alaşımların konvansiyonel ve hızlı soğuma durumlarındaki katılma mikroyapıları hakkında bilgi vermektir. Hızlı katılmış ve ısıl işlem görmüş Fe-Al-Cr-C alaşımlarındaki karbürlerin dağılımı ve morfolojisi üzerinde özellikle durulmuştur.

4.2.1 Deneysel Yöntem

İkili Fe-26 at.% Al ve Fe₃Al-tabanlı Fe-Al-Cr-C alaşımlarının hazırlanmasında düşük karbonlu çelik (0,045 wt% C, 0,22 wt% Mn), ticari saflıkta (99,8 wt.%) Al, ve ticari olarak tedarik edilebilen Fe-64 wt.%Cr ana alaşımları kullanılmıştır. Alaşımlar bileşenlerin uygun oranlarda karıştırılması ve grafit bir potada indüksiyon ile ısıtılarak ergitilmesi ile üretilmiştir. Bu çalışmada incelenen alaşımların nominal kompozisyonları (at.%) Tablo 4.5'de verilmiştir.

Malzemenin tabaka şeklinde üretilmesi emme döküm yöntemi ile tek bir adımda gerçekleştirilmiştir. Kullanılan cihaz, konveksiyonu minimumda tutarken, bir soğuma duvarına karşı hızlı katılma sağlayabilecek şekilde tasarlanmıştır. Bu deneyde, sıvı metal 25 mm eninde ve 60 mm boyunda olan kalıp boşluğunun ince kısmına kısmi vakum ile çekilmiştir. İstenilen proses parametrelerine erişildiği anda, vakum rezervuarına bağlı bulunan bir bakır kalıp, sıvı metal yüzeyinin üzerine konulmuştur. Ergimiş metal ve kalıp yüzeyi arasında temas olduğu anda, sıvı metalin kalıp boşluğunun içine çekilmesini sağlayan bir vana açılmıştır. Daha sonra, iki grup A serisi alaşım (A1-A3) 1200 °C'de , 2 saat argon atmosferi altında ısıl işlem görmüştür. Takiben, karbür oluşumunun ve dağılımının yapısal karakterini inceleyebilmek için her bir gruptan birer numuneye su verilmiş, diğer numunelerde havada soğutulmuştur.

Hızlı katılmış tabakaların, kalınlık boyunca katılma hızları oldukça önemli farklılıklar gösterdiği için, numunelerden hem yüzey hem kalınlık boyunca örnekler alınarak standart metalografik tekniklerle hazırlanmış ve 80 vol% HCl ve 20 vol% HNO₃ ile dağlanmış. Mikroyapılar optik mikroskop altında incelenmiş olup, yüksek büyütmelelerdeki detaylı yapısal gözlemler bir X-ışını enerji dağılımlı spektograf ünitesinde bulunan bir taramalı elektron mikroskobu yardımı ile yapılmıştır. Fazların kimyasal kompozisyonları ve kompozisyonların mikroyapı boyunca gösterdiği değişiklikler EDX yöntemi ile analiz edilmiştir. Cr-K α radyasyonu kullanarak fazları tanımlamak ve düzenlenme derecesini bulabilmek adına, temas yüzeylerinin düz kısımlarında ve numunelerin orta kısımlarına yakın bölgelerde X-ışını difraksiyonu (X-ray Diffraction; XRD) analizi yapılmıştır. Sabit argon akışı altında çeşitli ısıtma ve soğutma hızlarındaki geçiş sıcaklıklarını belirleyebilmek amacıyla diferansiyel termal analiz yöntemi kullanılmıştır.

Table 4.5. Deneysel çalışmalarda kullanılan alaşımların nominal kompozisyonları (at.%)

Alloy	Fe	Al	Cr	C
A	73,95	26,05	-	-
A1	70,80	27,55	1,05	0,6
A2	64,85	27,25	5,62	2,28
A3	57,67	25,86	11,11	5,36

4.2.2 Deneysel Bulgular ve Tartışma

Konvansiyonel yöntemle dökülmüş ve işlem görmemiş alaşımların optik mikrografları Şekil 4.33'de verilmiştir. İkili alaşım A'nın mikroyapısı (Şekil 4.33.a) yüzeyden merkeze doğru; diğer bir deyişle ısı akışı yönünde uzayan iri ve sütunsu Fe₃Al fazı tanelerinden oluşmaktadır. İkili alaşımın düşük miktarda Cr ve C ile modifiye edilmesi (A1 alaşımı), tane içlerinde gelişmiş güzel dağılmış ve tane sınırları boyunca bir ağ oluşturma eğilimi gösteren büyük uzamış ikincil partiküllerin oluşarak sütunsal tane yapısının incelmeye sebep olmuştur (Şekil 4.33.b). Daha yüksek miktarda Cr ve C eklenmesi, karbürlerin dendritler arasındaki bölgelerde çökmesi ile, A3 alaşımında daha küçük dendritik yapılar ve A2 alaşımında hücrel-dendritik yapılar oluşmasına sebep olmuştur (Şekil 4.33.c ve 4.33.d).

Eriyik emme yöntemi ile hızlı katılaştırılmış ve işlem görmemiş tabakalar, konvansiyonel yöntemlerle dökülmüş malzemelere göre oldukça incelenmiş mikroyapılar göstermişlerdir (Şekil 4.34.). Eriyik halde emilmiş A alaşımında, temas yüzeylerinde, tabakanın içine ~150-200 µm kadar girmiş sütunsal bir bölge görülmektedir. Sırasıyla Şekil 4.34.a ve 4.34.b'de gösterilen A ve A1, numunelerinde, numunenin ortalarına doğru, ortalama tane boyutu ~40 µm olan eş-yönlü bir tane yapısı görülmüştür.

Ayrıca alaşım ilaveleri (Cr>6 at% ve C>2 at%) büyüme levhaya doğru ilerledikçe sonra daha çok hücrel (gözeli) yapıya olacak levhanın temas yüzeylerinde hücrel-dendritik yapıya sonuçlanır. Ortalama tane boyutu A2 alaşımı için 13 µm ve A3 alaşımı için 5 µm'dir.

Metalografik analizlerle birlikte X ışınları çalışmaları A1 ve A2 numunelerinde Cr<6 at% ve C<2 at% içeren alaşımlarda Fe₃AlC perovskit karbürlerin oluştuğu ve A3 numunelerinde Cr>6 at% içeren alaşımlarda da Cr₇C₃ tipi karbürlerin oluştuğu gözlenmiştir, Şekil 4.35. Fe-Al alaşımlarının uygun miktarda karbon ile alaşımlandırılmasında perovskit tipi Fe₃AlC_x κ-fazının çökelmesi bilinmektedir (PALM ve INDEN, 1995).

Hızlı katılaştırılmış alaşımlar geleneksel olarak dökülmüş alaşımlarla aynı tip karbür içermesine rağmen boyut ve morfoloji değişmiştir, Şekil 4.36. Geleneksel olarak dökülmüş A1 alaşımında büyük uzamış Fe₃AlC parçacıkları varken sıvı emme yöntemiyle dökülmüş alaşımlarda bu parçacıkların boyutu 1-3 µm'ye kadar düşmüştür. Bu karbürler/çökelmeler düzensiz şekilli olup gelişmiş güzel tane sınırlarında olduğu kadar tane içlerinde de dağılmışlardır. Karbür morfolojisi Cr ve C miktarı artmasıyla matris içinde iğneye benzer

şekle deęişmiş (A2 alaşımında) ve hücre sınırlarında daha sürekli bir aę oluşturmuştur. Buna rağmen hücre duvarları boyunca sadece Cr_7C_3 tipi karbürlerin bulunduğu A3 alaşımında matris parçacıkları görülmemiştir. A3 alaşımına yapılan EDX analizlerinde hücre duvarlarının matristen iki kat daha fazla Cr içerdiği görülmüştür. Buna rağmen karbonun tane sınırı segregasyon mekanizması belirgin deęildir, bu tane sınırı karbürlerinin varlığı ile ilgili birçok açıklama mümkündür (WITTIG et al., 1987).

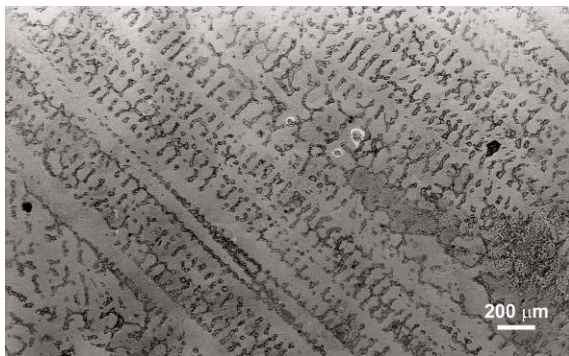
Deęişik tipteki karbürlerin Fe-Al-Cr-C alaşımalarında oluşumu faz dengesindeki deęişikliğe ve matrisin Cr ile aşırı doygun hale gelip genişlemesine bağlanabilir. Buna rağmen, üçlü Fe-Al-C sistemlerinin faz dengesini araştırmak için harcanan çabaya karşın (SHANKAR, 2004) dörtlü Fe-Al-C-Cr sisteminin mikro yapıları ve bileşenleri halen açıklanabilmiş deęildir. Bu yüzden dörtlü Fe-Al-C-Cr sisteminin faz dengesi üzerine daha detaylı ve sistematik çalışmalar katılaşma yapılarını daha iyi anlamak ve deęişik tipteki karbürlerin oluşum mekanizmasını tam olarak tanımlamak için gereklidir.



(a)



(b)

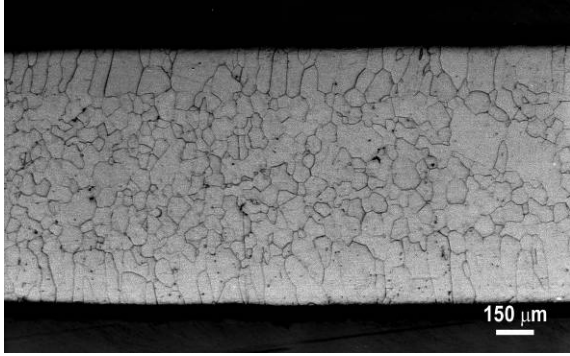


(c)



(d)

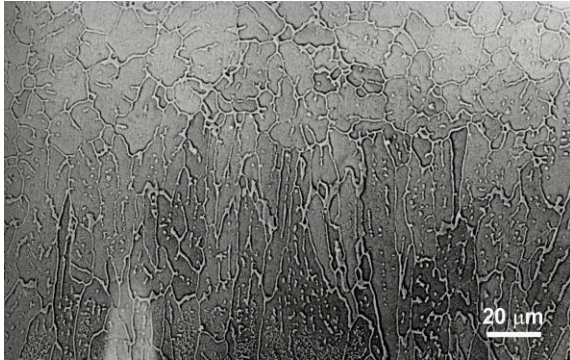
Şekil 4.33. Geleneksel ingot döküm yöntemiyle üretilmiş numunelerin katılaşma yapıları (a) Alaşım A, (b) Alaşım A1, (c) Alaşım A2 ve (d) Alaşım A3



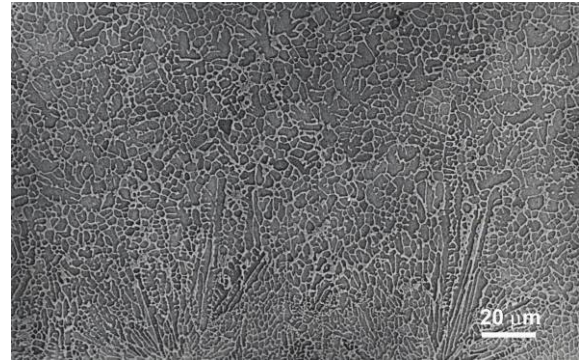
(a)



(b)

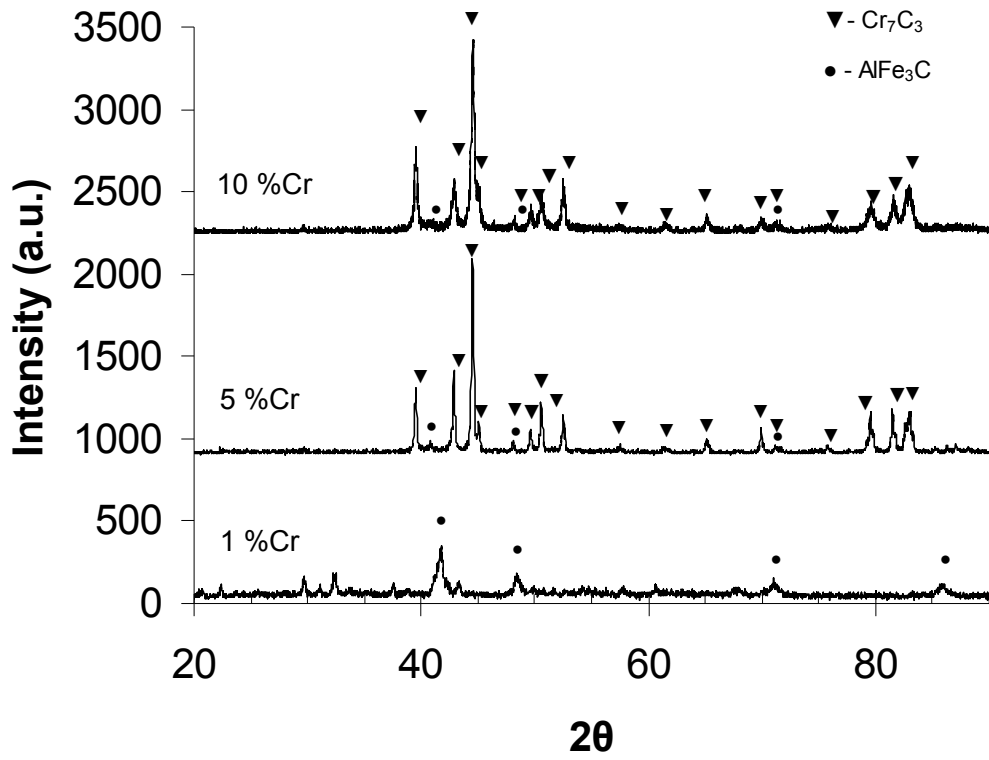


(c)

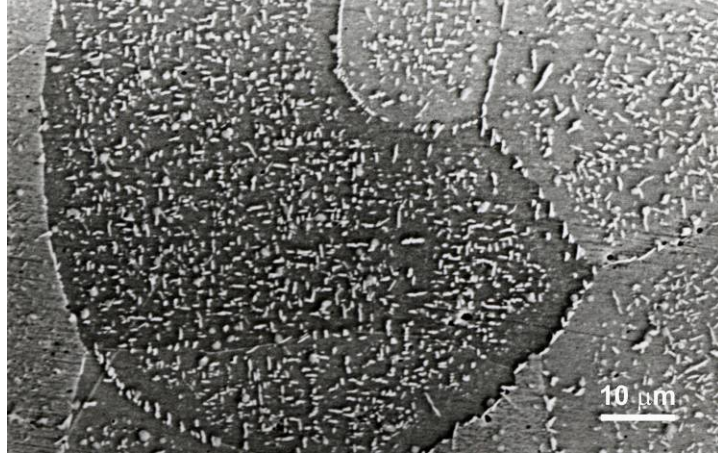


(d)

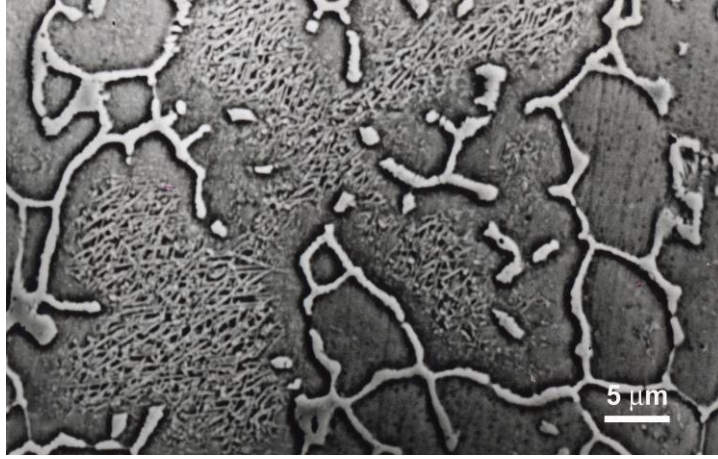
Şekil 4.34. Eriyik emme yöntemiyle hızlı katılaştırılmış numunelerin katılaşma yapıları
(a) Alaşım A, (b) Alaşım A1, (c) Alaşım A2 ve (d) Alaşım A3



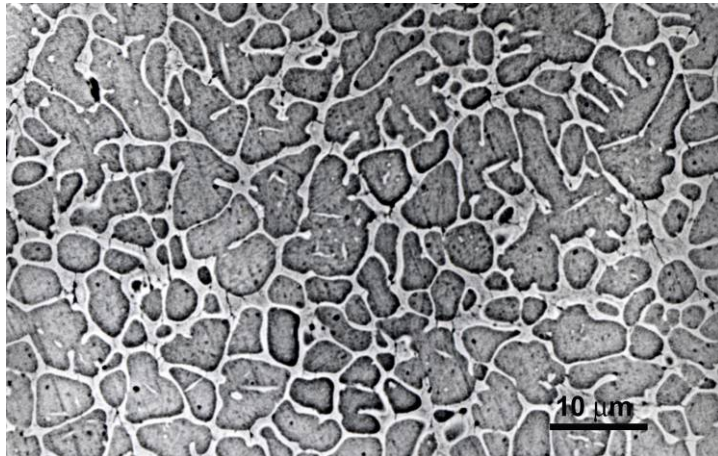
Şekil 4.35. Geleneksel ingot döküm yöntemiyle üretilmiş numunelerdeki karbürlerin X-ışınları kırınım analizi



(a)



(b)



(c)

Şekil 4.36. Fe_3AlC karbürlerinin dağılımı ve morfolojisinin SEM görüntüleri (a) Alaşım A1, (b) Alaşım A2 ve Cr_7C_3 karbürleri ve (c) Alaşım A3

Aslında tercihen tane sınırları boyunca bulunan sert ve kırılğan Cr_7C_3 ve Fe_3AlC tipi karbürlerin oluşumu bu alaşımların zayıf sünekliklerinin ana sebeplerinden biri olarak görülmektedir (PANG et al., 2002). Nispeten sünek Cr alaşımlı ve Al zengin Fe_3Al tabanlı düzenli alaşımlarda oda sıcaklığındaki temel kırılma mekanizması olarak kristaller arası kırılmadır (KARLIK et al., 2000). Bu anlamda Fe_3Al tabanlı alaşımların sünekliklerini geliştirmek için karbürlerin oluşum ve dağılım mekanizmalarını bu karbürlerin/parçacıkların çözünme sıcaklıklarını belirlemek için değişik ısıl işlem yöntemleriyle kontrol etmek önemli bir işlemdir.

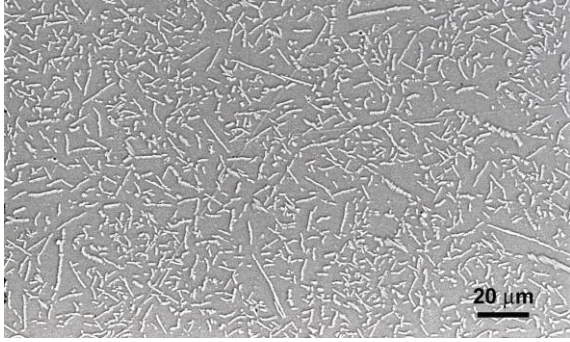
Bununla birlikte bu çalışmada diferansiyel termal analiz yöntemi ile elde edilmiş ısıl diyagramlar değişik ısıtma ve soğutma hızlarında karbür fazlarının oluşumu ve çözünmesi ile ilgili bir pik bulunmaktadır. Bunun sebebi muhtemelen literatürde belirtildiği gibi karbürlerin düşük hacim oranlarıdır (KOBAYASHI et al., 2005). Buna rağmen Fe_3AlC çökeltilerinin B2 $FeAl$ matris içerisinde yaklaşık $450^\circ C$ sıcaklıkta çözündüğü görülmüştür (KOBAYASHI et al., 2005). Fe-Al metaller arası bileşiklerinde karbür fazlarının oluşumunu araştırmaya yönelik çalışmalara rağmen (PANG ve KUMAR, 1997) dönüşüm kinetikleri detaylı olarak çalışılmamıştır.

Araştırma yapılan alaşımlarda ısıl işlem prosedürlerinin karbürlerin morfolojileri ve dağılımlarında değişikliğe sebep oldukları görülmüştür, Şekil 4.37. Mikroskopik çalışmalara göre Al alaşımında genellikle normal soğuma şartlarında düzenli dağılmış levha veya iğne şekilli Fe_3AlC (perovskit) bulunmaktadır, Şekil 4.37.a. Hızlı katılaştırılmış dökülmüş haldeki mikro yapılarla kıyaslandığında Fe_3AlC çökeltilerinin boyutlarının önemli ölçüde arttığı aşikârdır. Bu gözlem son zamanlardaki Fe-Al-C alaşımları ile ilgili çalışmalarla uyumludur ve Fe_3Al matrisi içerisindeki arayer atomlarının yüksek yayılma gücünden dolayı Fe_3AlC çökeltilerinin irileşme kinetiğine bağlanabilir (SCHNEIDER et al., 2005). Bununla birlikte bu numuneye $1200^\circ C$ 'den su vermek Fe_3AlC çökeltilerinin morfolojilerinin iğne şeklinden matris içerisinde düzgün dağılmış $1 \mu m$ 'den daha az ortalama parçacık büyüklüğüne sahip ince taneli parçacıklara değiştiği görülmektedir.

A2 numunesi için daha çok kaba küresel Fe_3AlC parçacıklarının hem havada soğumuş hem de su verilmiş numunelerinde tane sınırları boyunca yer aldığı görülmektedir, Şekil 4.37.b. Bununla birlikte matris içersinde hücre sınırları boyunca sürekli ağla birlikte ince ve düzenli iğne şeklindeki çökelmeler sıvı emme metoduyla üretilmiş dökülmüş haldeki numunelerde görüldüğü halde ısıl işlem görmüş numunelerde görülmemiştir.

Yüksek Cr ve C (11 at% Cr ve 5,3 at% C) içeren numunenin (A3 numunesi ısıl işlemi Cr_7C_3 karbürlerinin morfolojisini etkilemiş ve tane sınırı boyunca sürekli Cr_7C_3 karbür ağını yıkmıştır, Şekil 4.37.c. Isıl işlem sonucunda gerçekleşen ağın fragmentasyonu, hava ile soğutulan ve su verilen numunelerin her ikisinde de daha iri taneli Cr_7C_3 taneciklerinin tane sınırlarına yerleşmeleri ile sonuçlanmıştır. Çok hızlı presipitasyon kinetiği sebebiyle karbürlerin oluşması kaçınılmazdır. Bu durum Karbon' un difüzyon hızını yüksek olduğu düşük sıcaklıklarda C' un α -(Fe,Al)/FeAl içindeki oldukça düşük katı çözünürlüğü ile açıklanabilir (HERRMAN et al., 2004).

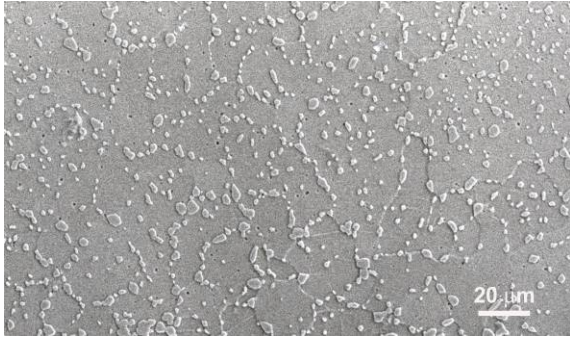
HAVADA SOĞUMA



(a)

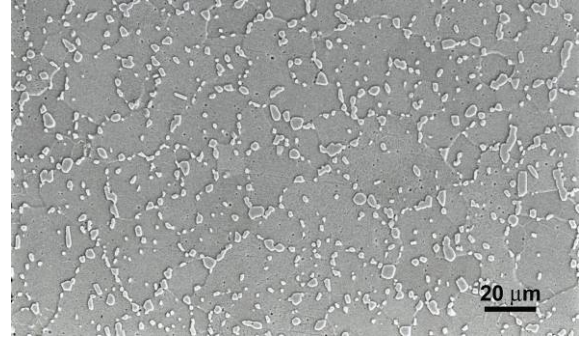
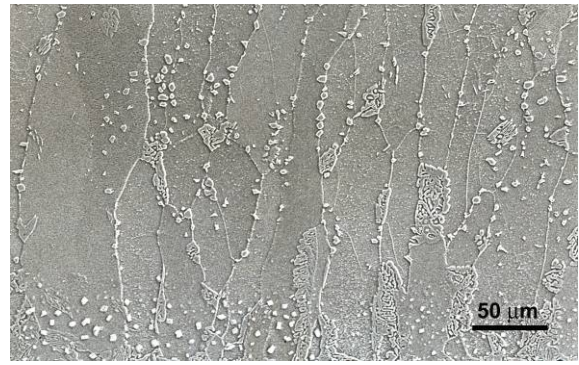


(b)



(c)

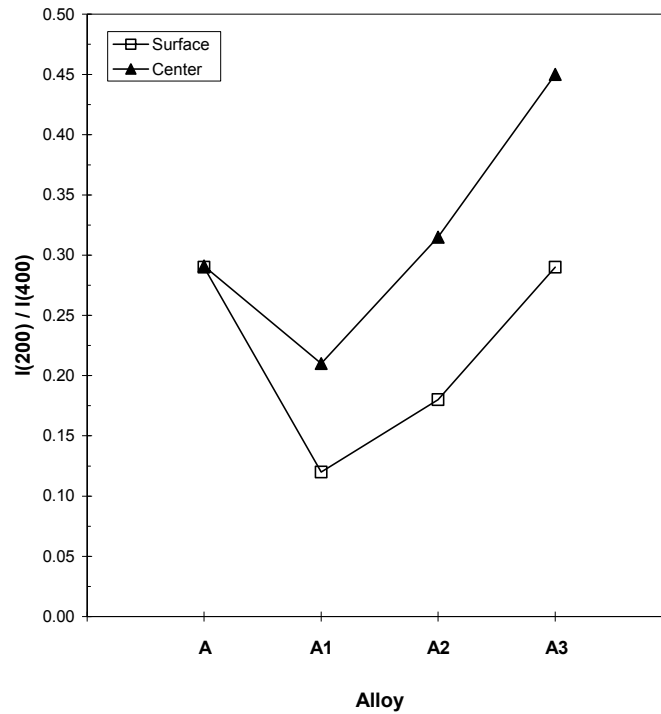
SU VERME



Şekil 4.37. Hızlı katılaştırılmış ve 1200 °C de 2 saat ısıl işlem gördükten sonra havada ve suda soğutulmuş numunelerin SEM görüntüsü (a) Alaşım A1, (b) Alaşım A2 ve (c) Alaşım A3

Bu alařım sistemlerinde atomik dzenlenme ile daha ileri seviyede mukavemetlendirme sađlandıđı için [174], alařımlamanın (Cr ve C) ve sođutma hızının Fe-Al tabanlı intermetaliklerde dzenlenme davranıřına etkisi arařtırmanın kapsamı dahilindedir. Bu amaç için X-ıřınları kırınımı ile dzenlenme derecesinin alařımlamanın ve sođutma hızının fonksiyonu olarak deđiřimi incelenmiřtir. Hızlı sođumuř tabakalardan alınan kırınım paterni Fe₃Al alařımı için ikili alařımda DO₃ ve B2 tipi siperorgu piklerinin ve A1-A3 alařımları için sadece B2 siperorgu piklerinin varlıđını gstermektedir. DO₃ yapısındaki dzenlenmenin derecesinin tayini (111) siperorgu ve (444) temel piklerin karřılařtırılması ile gerçekteřirilir. (444) piki bu olçümde mevcut olmadıđından yalnızca B2 dzenlenmesinin derecesi, yüzey ve yaklaşık olarak orta-kalınlık için hızlı katılařtırılmıř A-A3 alařımlarında toplam yođunluk deđerlerinin oranından I(200)/I(400) bulunmuřtur (řekil 4.38). řekil 4.38' den ađıkça görüldüđu üzere B2 dzenlenmesi azalmakta ve A1 alařımı için minimum deđere ulařmaktıktan sonra yüksek alařımlama oranları için yavař bir artıř sergilemektedir. C' un etkileriyle ilgili yayınlanan verilerde çeliřkiler bulunmasına rađmen, bazı çalıřmalarda (STEIN et al., 2003) Cr' un DO₃→B2 ve B2→dzensizlik dönüřüm sıcaklıklarına çok az etkisi olduđu rapor edilmiřtir. Bizim fikrimize göre, dzenlenme derecesindeki bu deđiřim, C yada Cr' un tek olarak alařımlanmasıyla yada kombine olarak alařımlanma etkisiyle ve daha detaylı bir analiz için incelenmesi gerekli olan farklı katılařma kořullarında mikroyapının deđiřimiyle ađıklanabilir.

B2 dzenlenmesinin alařımlamanın fonksiyonu olarak izlediđu genel trendin yanında, řekil 4.38' de verilen yüzeyden tabakaların iç kısımlarına ilerledikçe yođunluk oranlarında meydana gelen artıř tabakaların merkezinde katılařmanın yüzeye göre düşük derecede altođuma ile izotermal olarak düşük sođutma hızına ulařılmasıyla ađıklanabilir.



řekil 4.38. Hızlı katılařtırılmıř A-A3 alařımlarında I(200)/I(400) X-ıřınları toplam yođunluk deđerlerinin oranı

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, Fe₃Al temelli düzenli alaşımlar için önceki çalışmamızda önerilen Monte Carlo metoduna psödopotansiyel yaklaşımındaki alaşımların elektronik teorisinin kombinasyonu, L1₂ tip düzenli Ni₃Al temelli alaşımlar için atomik düzenlenme süreçleri analizi ve düzen-düzensizlik faz dönüşümleri olgusuna da başarıyla uygulanabilirliği gösterilmiştir.

Literatürde yeralan diğer MC çalışmalarının aksine, bu çalışmada ilk defa, alaşımların elektronik teorisinin psödopotansiyel yaklaşımında düzenlenme enerjilerinin 4. koordinasyon küresi dahil olmak üzere hesaplanan değerleri, Ni₃Al intermetaliklerinde atom düzenlenmelerinin oluşum mekanizmalarını karakterize etmek ve atomların düzenlenme süreçlerini değerlendirmek için kullanılmış MC simülasyon yönteminde girdi verileri olarak kullanılmıştır. Elde edilen başarılı sonuçlar, göreceli olarak kolay kabul edilebilir bu simülasyon yaklaşımının, elektron teorisinin psödopotansiyel yaklaşımıyla sadece birinci ve ikinci için değil daha yüksek koordinasyon küreleri için de hesaplandığı düzenlenme enerji değerlerinin, MC ve/veya diğer simülasyonlar yöntemleri için girdi verisi olarak kullanılabileceği gibi, başka intermetallik sistemler için de uygulanabileceğini göstermektedir.

Literatürde ilk defa, MC simülasyon metodu ve psödopotansiyel yaklaşımda alaşımların elektronik teorisi birleştirilerek, M alaşım elementlerinin Ti₅₀Al_{50-X}M_X (X = 1, 2, 3, 4 ve 5) intermetalliği içerisindeki kafes pozisyonu tercihleri teorik olarak çalışılmıştır. Pozisyon tercihleri ilk KÇ'deki Ti-M ve Al-M kısmi düzenlenme enerjilerinin göreceli değerlerine, çözünme modları ise bu enerjilerin işaretlerine bağlıdır. Bu bağlamda üç farklı tip kümeleşme gözlemlenmiş, ve ilgili üç farklı çözünme modu öne sürülmüştür:

- i. rastgele çözünme (Mod I)
- ii. iki-boyutlu (2D) düzlemsel kümeleşme (Mod II)
- iii. üç-boyutlu (3D) kümeleşme (Mod III)

Bu çalışmada belirlenen kafes seçimleri literatürde Al-fakiri γ -TiAl alaşımları için bildirilenler ile oldukça uyuşmakta ve öne sürülen modelin çok-yönlülüğünü ve işlevselliğini onaylamaktadır.

Literatürde ilk defa, çoklu-alaşım sistemlerinde atom düzenlenmelerinin istatistik-termodinamik teorisi ve psödopotansiyel yaklaşımda alaşımların elektronik teorisi birleştirilerek, B2 kristal yapılı A-B-C üçlü alaşım sistemlerinde atom düzenlenmelerinin hem enerji, hem de yapısal özelliklerini incelemek için yeni bir yöntem geliştirilmiştir. Geliştirilmiş yeni yöntemin Fe(Al,X) üçlü alaşımında üçüncü X element ilavelerinin atomik kısa mesafe düzenlenmelerine SRO ve düzen-düzensizlik dönüşüm sıcaklığına etkilerinin kalitatif ve/veya yarı-kuantitatif analizinde başarıyla uygulanabileceği gösterilmiştir. Kısmi düzenlenme enerjileri, $W_{aa'}(R_1)$, düzen-düzensizlik faz dönüşümü sıcaklığı, T_{OC}, ve kısmi kısa mesafe düzen parametreleri, $\alpha_{aa'}(R_1)$, üçüncü alaşım X = Ni, Co, Mn, Cr, Ti, Si, Zr, Hf, Nb, Ta, Re, Mo ve W elementlerinin %1 at. konsantrasyona kadar katılımıyla Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5} alaşımları için hesaplanmıştır.

$Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ intermetaliklerindeki atom düzenlenme özellikleri ile ilgili olan hesaplamaların sonuçları aşağıdaki gibi özetlenmektedir:

1. Safsızlık, X, elementlerinin alt-kafes düğüm noktalarındaki yerleşme özellikleri (kısa mesafe düzeni) göz önünde bulundurularak X elementleri iki gruba ayrılabilir:
 - *Grup I safsızlık elementleri*, $X_I = Ni, Co, Mn$ veya Co elementleri için Al-X çiftlerinin kısmi kısa mesafe düzen parametreleri, $Fe_{0.5}(Al,X)_{0.5}$ sisteminde pozitif işaretlidir, yani $\alpha^{Al-X}(R_I) > 0$ ve $\alpha^{Fe-X}(R_I) < 0$, böylelikle X_I atomları çoğunlukla Al altkafesindeki yerlere gider ve Fe atomlarıyla çevrilir.
 - *Grup II safsızlık elementleri*, $X_{II} = Ti, Si, Zr, Hf, Nb, Ta, Re, Mo$ veya W element atomları tercihen Fe altkafesindeki yerlere yerleşir, başka bir deyişle $\alpha^{Fe-X}(R_I) > 0$ ve $\alpha^{Al-X}(R_I) < 0$, ve genellikle FeAl üstkafesindeki (B2) Al atomlarıyla çevrilir.
2. İkili Fe-Al intermetalliklerine üçüncü X alaşım elementinin eklenmesiyle, farklı atomik çiftlerin kısmi düzenlenme enerjilerinin kesin değerlerine bağlı olarak Fe-Al-X üçlü alaşımının dönüşüm sıcaklığı ya artar, ya da değişmeden kalır.
3. Fe-Al alaşımlarındaki düzen-düzensizlik dönüşüm sıcaklığındaki artış miktarı, Fe-altkafesine X alaşım element atomlarının yerleşmesi ve Al-X çiftlerinin kısmi düzenlenme enerjilerinin büyüklüğüyle belirlenmektedir.

Çalışmada elde edilen sonuçlar literatürde bulunan deneysel verilerle kalitatif olarak iyi bir uyum göstermektedir.

Öte yandan B2 tip düzenli yapıya sahip $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ metaller arası bileşikler için teorik çalışmalarda kullanılan/önerilen yaklaşımlar ve elde edilen sonuçlar deneysel yöntemler ile test edilerek teorik tahminlerle kıyaslanmış ve bu tahminlerle uygunluğu proje çalışmaları sonucunda gösterilmiştir.

Deneysel çalışmalar tek faz B2 tip yapıya sahip $Fe_{0.5}(Al_{1-n}X_n)_{0.5}$ intermetaliklerin hem solidus hem de likvidus sıcaklıklarını arttırdıkları, çift faz yapıya sahip alaşımların likvidus sıcaklıklarını azalttıklarını söylemek mümkündür (çift fazlı alaşımlarda ötektik reaksiyondan ötürü solidus sıcaklığı yerine ötektik reaksiyon sıcaklıkları tablolarda gösterilmiştir). Mikro yapı ve alaşımların erime sıcaklıkları arasındaki bu bağlantı ilk olarak bu projede bulunmuştur.

Mevcut araştırmada, sıvı emme işlemi ile üretilen ve hızlı katılaştırılan Fe_3Al tabanlı intermetaliklerde alaşımlamanın ve ısıl işlemin katılma mikroyapısına, özellikle karbürlerin dağılımı ve morfolojisi üzerine etkisini incelemeye yönelik girişimlerde de bulunulmuştur.

Fe_3AlC (perovskit) $Cr < 6$ at% ve $C < 2$ at% içeren alaşımlarda, Cr_3C_3 tipi karbür ise $Cr > 6$ at% içeren alaşımlarda oluşmaktadır. Hızlı katılaştırılmış, sıvı emme metoduyla hazırlanmış alaşımlar boyut ve morfoloji değiştirildiğinde geleneksel alaşımlarda gözlenen tipte karbür oluşumu göstermektedir. Bu karbürler, yüksek Cr ve C içeren alaşımlarda tercihen daha sürekli ve iri bir ağa sahip tane/hücre sınırlarında oluşma eğilimindedirler. $1200\text{ }^\circ\text{C}$ ' de gerçekleştirilen ısıl işlemi takiben uygulanan su verme işlemi ağın fragmentasyonu ile sonuçlanmaktadır.

KAYNAKÇA

- AKDENİZ M.V. and Mekhrabov A.O., The Effect of Substitutional Impurities on the Evolution of Fe-Al Diffusion Layer, *Acta mater.*, 46(4), 1185, (1998).
- AKDENİZ M.V., Mekhrabov A.O. and Yilmaz T., The Role of Si Addition on the Interfacial Interaction in Fe-Al Diffusion Layer, *Scripta metall. mater.*, 31(12), 1723, (1994),
- ANIMALU A. O. E., Electronic Structure of Transition-Metals 1. Quantum Defects and Model Potential, *Phys. Rev. B*, 8, 3542, (1973).
- ANTON D.L., Shah D.M., Duhl D.N, Giamei A.F, *Selecting High-Temperature Structural Intermetallic Compounds: The Engineering Approach*, JOM, 12-17, (1989).
- AOKI K. and Izumi O., Improvement in Room-Temperature Ductility of the Intermetallic Compound Ni₃Al by Ternary Trace-element Addition, *J. Jpn. Inst. Met.*, 43, 1190, (1979).
- AUSTIN C. M. and Kelly, T. J., in *Structural Intermetallics*, ed. Darolia R., Lewandowski J. J., Liu C.T., Martin P. L., Miracle D. B. and Nathal. M. V., TMS, Warrendale, PA, (1993), pp: 143.
- AUSTIN C. M., Kelly, T. J., McAllister, K. G. And Chesnutt, J. C., in *Structural Intermetallics 1997*, ed. Nathal M. V., Darolia R., Liu C. T., Martin P. L., Miracle, R. Wagner D. B. and Yamaguchi M., TMS, Warrendale, PA, (1997), pp: 413.
- BINDER K. (ed), *Applications of the Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, vol. 36 (Berlin: Springer) (1987).
- BOETTNER R.C., Stoloff N.S. and Davies R.G., Effect of Long-Range Order on Fatigue, *Trans. AIME*, 236, 131, (1966).
- BOZZOLO G.H., Khalil J. and Noebe R.D., Modeling of the Site Preference in Ternary B2-Ordered Ni-Al-Fe Alloys, *Comput. Mater. Sci.*, 24, 457, (2002).
- BRAGG W.L. and Williams E.J., *Proc. R. Soc. Lond.*, A 145, 699, (1934).
- BURSIK J. Quantitative Analysis of Atomic Configurations of Two-Phase Ni-based Alloys Generated by Monte Carlo Simulation, *J. Alloys Compounds*, 378, 66, (2004).
- CAHN R.W., Siemers P.A., Gieger J.E. and Bardhan P., The Order-Disorder Transformation in Ni₃Al and Ni₃Al-Fe Alloys 1. Determination of the Transition-Temperatures and Their Relation to Ductility, *Acta Metall.*, 35, 2737, (1987).
- COLINET C., Bessoud A. and Pasturel A., A Tight-Binding Analysis of Cohesive Properties in the Ni-Al System, *J. Phys. Condens. Matter.*, 1, 5837, (1989).
- COWLEY J.M., X-Ray Measurement of Order in Single Crystals of (Cu₃Au), *J. Appl. Phys.*, 21, 24, (1950).
- DANG H.L., Wang C.Y., Yu T., First-Principles Investigation of 3d Transition Elements in L1(0) TiAl, *J. Appl. Phys.*, 101, 083702, (2007).
- ENOMOTO M. and Harada H. Analysis of Gamma'/Gamma-Equilibrium in Ni-Al-X Alloys by the Cluster Variation Method with the Lennard-Jones Potential, *Metall. Trans.*, A 20, 649, (1989).
- FLINN P.A., Theory of Deformation in Superlattices, *Trans. TMS-AIME*, 218, 145, (1960).

- HAO Y.L., Yang R., Cui Y.Y., Li D. The Influence of Alloying on the Alpha(2)/(Alpha(2)+Gamma)/Gamma Phase Boundaries in TiAl Based Systems, *Acta Mater.*, 48, 1313, (2000).
- HAO Y.L., Yang R., Cui Y.Y., Li D., The Effect of Ti/Al Ratio on the Site Occupancies of Alloying Elements in Gamma-TiAl, *Intermetallics*, 8, 633, (2000).
- HERRMAN J., Inden G., Sauthoff G., Deformation Behaviour of Iron-Rich Iron-Aluminium Alloys with Ternary Transition Metal Additions, *Steel Res. Int.*, 75, 343, (2004).
- HIGGINS R.A., *Engineering Metallurgy Applied Physical Metallurgy*, London, (1973).
- HÖHNE G.W.H, Cammenga H.K., Eysel W., Gmelin E., Hemminger W., Metrologically Based Procedures for the Temperature, Heat and Heat Flow Rate Calibration of DSC, *J. Thermal Anal.*, 49, 1125, (1997).
- HUBBARD J., The Description of Collective Motions In Terms Of Many-Body Perturbation Theory, *Proc. R. Soc. Lond.*, A240, 539, (1957).
- ISING E.Z., *Z. Phys.* 31, 253, (1925).
- JINLONG Y., Chuanyun X., Shangda X., Kelin W., Site Preference of Ternary Additions in γ -TiAl: A Density-Functional Cluster-Model Study, *Phys. Rev. B* 46, 13709, (1992).
- JORDAN J.L., Deevi S.C., Vacancy Formation and Effects in FeAl, *Intermetallics*, 11, 507, (2003).
- KARLIK M., Kratochvil P., Janecek M., Siegl J., Vodickova V., Tensile Deformation and Fracture Micromorphology of an Fe-28Al-4Cr-0.1Ce Alloy, *Mater. Sci. Eng.*, A289, 182, (2000).
- KARTNER U.R., Burton B.P., In: Okamoto H., editors, *Phase Diagrams of Binary Iron Alloys*, ASM International, Materials Park (OH) 12, (1993)
- KERR W.R., Fracture of Fe₃Al, *Metall. Trans.*, 17A, 2298, (1986).
- KHACHATURYAN A.G., *Theory of Structural Transformation in Solids*. John Wiley, New York, (1983).
- KOBAYASHI S., Schneider A., Zaefferer S., Frommeyer G., Raabe D., Phase Equilibria Among Alpha-Fe(Al, Cr, Ti), Liquid and TiC and the Formation of TiC in Fe₃Al-based Alloys, *Acta Mater.*, 53, 3691, (2005).
- KOCH C.C., Liu C.T., and Stoloff N.S., ed., *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys*, Mater. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 39, MRS, Pittsburgh, (1985).
- KONG C.H. and Munroe P.R., The Effect of Ternary Additions on the Vacancy Hardening of FeAl, *Scripta Metall. Mater.*, 30, 1079, (1994).
- KRIVOGLAZ M.A. and Smirnov, A., *The Theory of Order-Disorder in Alloys*, MacDonald, London, (1964).
- LIPSITT H.A., Shechtman D., and Schafrik R.E., Deformation and Fracture of TiAl at Elevated-Temperatures, *Met. Trans. A*, 6A, 1991, (1975).
- LIU C.T. and Kumar K.S., Ordered Intermetallic Alloys 1. Nickel and Iron Aluminides, *J. Min. Metals Mater. Soc.*, 45, 38, (1993).
- LIU C.T., Steigler, J.O., and Froes, F.H., *Ordered Intermetallics*, Metals Handbook, 10th ed., Vol. 2, ASM, 913, (1990).

LIU C.T., White C.L., Koch C.C. and Lee E.H., *Preparation of Ductile Nickel Aluminides for High Temp. Use*, Conference on High Temperature Materials Chemistry, New Jersey, (1984).

LORIA E.A., Gamma Titanium Aluminides as Prospective Structural Materials, *Intermetallics*, 8, 1339, (2000).

MARCINKOWSKI M.J., Taylor M.E. and Kayser F.X., Relationship Between Atomic Ordering and Fracture in Fe-Al Alloys, *J. Mat. Sci.* 10, 406, (1975).

MATSUMOTO M., Nishimura T., Mersenne Twister: a 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator, *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8, 3, (1998).

MCKAMEY C.G., and Liu C.T., Chromium Addition and Environmental Embrittlement in Fe₃Al, *Scripta Metall.*, 24, 2119, (1990).

MCKAMEY C.G., Horton J.A., Liu C.T., Effect of Chromium on Properties of Fe₃Al, *J. Mater. Res.*, 4, 1156, (1989).

MEKHRABOV A.O and Akdeniz M.V., Modeling of the Atomic Ordering Processes in Fe₃Al Intermetallics by the Monte Carlo Simulation Method Combined with Electronic Theory of Alloys, *Metall. Mater. Trans.*, A 34, 721, (2003).

MEKHRABOV A.O., Akdeniz M.V. and Arer M.M., Atomic Ordering Characteristics of Ni₃Al Intermetallics with Substitutional Ternary Additions, *Acta mater.*, 45(3), 1077, (1997).

MEKHRABOV A.O., Akdeniz M.V., Effect of Ternary Alloying Elements Addition on Atomic Ordering Characteristics of Fe-Al Intermetallics, *Acta Mater.*, 47, 2067, (1999).

MORRIS M.A., Morris D.G., Dispersoid Additions and Their Effect on High-Temperature Deformation of FeAl, *Acta Metall. Mater.* 38, 551, (1990).

MUNROE P.R. and Baker I., Microstructure and Mechanical Properties of Fe-40Al+Cr Alloys, *Scripta Metall. Mater.*, 24, 2273, (1990).

ORAMUS P., Kozlowski M., Kozubski R., Pierron-Bohnes V., Cadeville M.C. and Pfeiler W. Dynamics of Atomic Ordering in Intermetallics, *Mater. Sci. Eng. A* 365, 166, (2004).

PALM M., Concepts Derived From Phase Diagram Studies for the Strengthening of Fe-Al-based Alloys, *Intermetallics*, 13, 1286, (2005).

PALM M., Inden G. Experimental determination of Phase-Equilibria in the Fe-Al-C System, *Intermetallics*, 3, 443, (1995).

PANG L., Han S.M., Kumar K.S., Tensile Response of an Fe-40Al-0.7C-0.5B Alloy, *Acta Mater.* 50, 3623, (2002).

PANG L., Kumar K.S., Mechanical Behavior of an Fe-40Al-0.6C Alloy, *Acta Mater.*, 46, 4017, (1998).

PANG L., Kumar K.S., Precipitation in an Extruded Fe-40 at.% Al-5 at.% B-7 at.% C Alloy, *Phil. Mag. Lett.* 76, 323, (1997).

PEARSON W.B., *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*. New York: Pergamon, (1958).

POPE D.P. and Garin J.L., Temperature-Dependence of Long-Range Order Parameter of Ni₃Al, *J. Appl. Crystallogr.*, 10, 14, (1977).

- PRAKASH U., Buckley R.A., Jones H. and Sellars C.M., Structure and Properties of Ordered Intermetallics Based on the Fe-Al System, *ISIJ International*, 31, 1113, (1991).
- RAO P.V.M., Murty K.S., Suryonarayana S.V. and Naidu S.V.N., X-Ray Determination of the Debye-Waller Factors and Order Parameters of Ni₃Al Alloys, *J. Appl. Crystallogr.*, 26, 670, (1993).
- RAY R., Panchanathan V., and Isserow S., Microcrystalline Iron-base Alloys Made Using a Rapid Solidification Technology, *J. of Metals*, 35 (6), 30, (1983).
- REVIERE R.D., Chen X.F., Oliver B.F., Brooks C.R., Dunlap J.R., Substitution Behavior of Mn, Cr, and Zr in Ternary and Quaternary Alloys of TiAl, *Mater. Sci. Eng.*, A172, 95, (1993).
- SCHNEIDER A., Falat R., Sauthoff G., Frommeyer G., Microstructures and Mechanical Properties of Fe₃Al-based Fe-Al-C Alloys, *Intermetallics* 13, 1322, (2005).
- SHAM L.I., A Calculation of Phonon Frequencies in Sodium, *Proc. R. Soc.*, A283, 33, (1965).
- SHANKAR R.V., Fe₃Al-Fe₃AlC Intermetallics for High Temperature Applications: An Assessment, *J. Mater. Sci.*, 39, 4193, (2004).
- SIKKA V. K., in *Physical Metallurgy and Processing of Intermetallic Compounds*, ed. Stolof N. S. and Sikka V. K., Chapman & Hall, London, (1996) , pp: 561.
- SLUITER M., Turchi P.E.A, Pinski F.J and Stocks G.M., A 1st Principles Study of Phase – Stability in Ni-Al and Ni-Ti Alloys, *Mater. Sci. Eng.*, A 152, 1, (1992).
- SONG Y., Guo Z.X., Yang R., First principles Studies of TiAl-based Alloys, *J. Light Met.*, 2, 115, (2002).
- SONG Y., Yang R., Li D., Hu Z.Q., Guo Z.X., A First Principles Study of the Influence of Alloying Elements on TiAl: Site Preference, *Intermetallics*, 8, 563, (2000).
- STEIN F., Palm M., Re-Determination of Transition Temperatures in the Fe-Al System by Differential Thermal Analysis, *Int. J. Mat. Res.* 7, 98, (2007).
- STEIN F., Palm M., Sauthoff G., Structure and Stability of Laves Phases. Part I. Critical Assessment of Factors Controlling Laves Phase Stability, *Intermetallics*, 12, 469, (2004).
- STEIN F., Palm M., Sauthoff G., Mechanical Properties and Oxidation Behaviour of Two-Phase Iron Aluminium Alloys with Zr(Fe,Al)₂ Laves Phase or Zr(Fe,Al)₁₂ tau(1) Phase, *Intermetallics*, 13, 1275, (2005).
- STEIN F., Schneider A., Frommeyer G., Flow Stress Anomaly and Order-Disorder Transitions in Fe₃Al-based Fe-Al-Ti-X Alloys with X = V, Cr, Nb, or Mo, *Intermetallics*, 11,71, (2003).
- STOCKS G.M. *et al.*, *Statics and Dynamics of Alloy Phase Transformations (NATO ASI Series B Physics)* vol. 319 ed. Turchi P.E.A. and Gonis A. (New York: Plenum) (1994), pp: 305.
- STOLOFF N.S., Iron Aluminides: Present Status and Future Prospects, *Mater. Sci. Eng.* A258, 1, (1998).
- STOLOFF N.S., Koch C.C., Liu C.T. and Izumi O., ed., *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys II*, Mater. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 81, MRS, Pittsburgh, (1987).

- TAUB A.I., Huang S.C., Improved Strength and Ductility of Ni₃Al by Boron Modification and Rapid Solidification, *Met. Trans. A*, 15A, 399, (1984).
- TETSUI T., Gamma Ti Aluminides for Non-Aerospace Applications, *Current Opinion in Solid State & Materials Science*, 4, 243, (1999).
- TITRAN R.H., Vedula, K.M. and Anderson, G.G., in *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys*, MRS Symp. Proc., Vol. 39, ed. C. C. Koch, C. T. Liu and N. S. Stoloff. MRS, Pittsburgh, PA, (1985), pp: 309.
- VEDULA K. and Stephens, J.R., in *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys II*, MRS Symp. Proc., Vol. 81, ed. Stoloff N.S., Koch C.C., Liu C.T. and Izumi O., MRS, Pittsburgh, PA, (1985), pp: 381.
- VEDULA K., Stephens J.R., Compressive Creep Behavior of Alloys Based on B2 FeAl, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* 81, 381, (1987).
- WANG Y., Liu Z.K. and Chen L.Q., Thermodynamic Properties of Al, Ni, NiAl, and Ni₃Al From First-Principles Calculations, *Acta Mater.*, 52, 26, (2004).
- WARREN B.E., Averbach B.L. and Roberts B.W., Atomic Size Effect in the X-Ray Scattering by Alloys, *J. Appl. Phys.*, 22, 1493, (1951).
- WHANG S.H., Pope D.P. and Liu C.T., Proceedings of the 2nd International ASM Conference on High-Temperature Aluminides and Intermetallics, September 16-19, 1991, Ssn-Diego, CA, USA .1. Preface, *Mater. Sci. Eng.*, A152/153, 322, (1992).
- WILSON A., Bozzolo G., Noebe R.D. and Howe J.M., Experimental Verification of the Theoretical Prediction of the Phase Structure of a Ni-Al-Ti-Cr-Cu Alloy, *Acta Mater.*, 50, 2787, (2002).
- WITTIG J.E., Wogt E., Möller R., Frommeyer G., Brittle Low-Temperature Fracture Behavior of Rapidly Quenched Fe-40 at% Al by Melt Spinning, *Scripta Metall.*, 21, 721, (1987).
- WOLF W., Podloucky R., Rogl P., Erschbaumer H., Atomic Modelling of Nb, V, Cr and Mn Substitutions in Gamma-TiAl .2. Electronic Structure and Site Preference, *Intermetallics*, 4, 201, (1996).
- WOODWARD C., Kajihara S., Density of Thermal Vacancies in Gamma-Ti-Al-M, M = Si, Cr, Nb, Mo, Ta or W, *Acta Mater.*, 47, 3793, (1999).
- YAMAGUCHI M., Inui H. ve Ito K., High-temperature structural intermetallics *Acta Mater.*, 48, 307, (2000).
- YOO M.H., Sass S.L., Fu C.L., Mills M.J., Dividuk D.M. and George E.P., Deformation and Fracture of Intermetallics, *Acta Metall. Mater.*, 41(4), 987, (1993).
- ZHANG Z., Sun Y., Shen G., Improvements of Tensile Strength and Creep Resistance of Fe-28 Al Alloy with Tungsten Addition, *Scripta Mater.*, 38, 21, (1998).

TÜBİTAK

PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje No: MAG-COST535-104M323
Proje Başlığı: Yüksek Sıcaklık ve Yapısal Uygulamalar için Alüminit Tabanlı Çok Bileşenli İntermetaliklerin Geliştirilmesi, Modellenmesi ve Karakterizasyonu
Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Prof. Dr. M. Vedat Akdeniz Prof. Dr. Amdulla O. Mekhrabov
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Metalurji ve Malzeme Müh. Böl. Orta Doğu Teknik Üniversitesi 06531-Ankara
Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1 Haziran 2005-1 Haziran 2008
Öz (en çok 70 kelime) <p>Bilimsel programın merkezinde çok bileşenli Al-Fe-Ni-Ti sistemi bulunan projenin ana hedefi bu dört bileşenli sistemin tamamen anlaşılması ve sistemin güvenilir bir termodinamik açıklamasının yapılmasıdır. Bu amaçla, seçilen dördü sistem alt sistemleri olan Fe-Al, Ni-Al ve Ti-Al bazlı ikili ve üçlü intermetalik sistemlerinde kısa ve uzun erimli düzen karakteristiklerinin eklenen alaşım elementinin çeşidi ve miktarına bağlı olarak nasıl değiştiği, teorik ve atomistik hesaplamalarla birleştirilerek, Monte Carlo gibi modelleme ve simülasyon yöntemleri kullanılarak incelenmiş ve modelleme çalışmaları, fazların ve faz dengelerinin fiziksel özellikleri ve karakterizasyonu ile ilgili yoğun deneysel çalışmalarla desteklenmiştir.</p>
Anahtar Kelimeler: İntermetalik bileşikler, alüminitler, Fe-Al, Ni-Al, Ti-Al, alaşım sistemleri
Projeden Yapılan Yayınlar: <p>M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2008). <i>Solidification Microstructures and Carbides Morphology in Rapidly Solidified Fe-Al-Cr-C Alloys</i>, <u>METALS AND MATERIALS International</u>, vol. 14, No: 4, pp. 397-403</p> <p>A.O. Mekhrabov and M.V. Akdeniz (2007). <i>Modelling and Monte Carlo Simulation of Atomic Ordering Processes in Ni₃Al Intermetallics</i>, <u>Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.</u>, vol. 15, pp. 1-12</p>

M. Yıldırım, M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2007). *Thermal analysis of order-disorder phase transformations in B2-type ordered Fe-Al-X intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 25

M. Aykol, Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2007). *Effect of impurities on the lattice site occupancy characteristics of TiAl intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 61

Ş. Talaş, Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2007). *Long range ordering characteristics of Fe-26Al-X (X=Cu, Ti) intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 61

A. O. Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2006). *Lattice site occupancy and order-disorder phase transition characteristics of B2-type ordered Fe-Al-X intermetallics*, 3rd Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, January 2006, Mettmann-Dusseldorf, Germany, Book of Abstract, pp. 51

M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2005). *The Carbide Morphology in Chromium Alloyed Fe-Al Based Intermetallics*, European Congress on Advanced Materials and Processes: EUROMAT 2005, Federation of European Materials Societies (FEMS), Prague, Czech Republic, September 2005, Web published at <http://www.euromat2005.fems.org/>

A. O. Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2005). *Modelling and Monte Carlo Simulation of the Atomic Ordering Processes in Ni₃Al Intermetallics*, European Congress on Advanced Materials and Processes: EUROMAT 2005, Federation of European Materials Societies (FEMS), Prague, Czech Republic, September 2005, Web published at <http://www.euromat2005.fems.org/>

TÜBİTAK

PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje No: MAG-COST535-104M323
Proje Başlığı: Yüksek Sıcaklık ve Yapısal Uygulamalar için Alüminit Tabanlı Çok Bileşenli İntermetaliklerin Geliştirilmesi, Modellenmesi ve Karakterizasyonu
Proje Yürütücüsü ve Araştırmacılar: Prof. Dr. M. Vedat Akdeniz Prof. Dr. Amdulla O. Mekhrabov
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: Metalurji ve Malzeme Müh. Böl. Orta Doğu Teknik Üniversitesi 06531-Ankara
Destekleyen Kuruluş(ların) Adı ve Adresi:
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1 Haziran 2005-1 Haziran 2008
Öz (en çok 70 kelime) <p>Bilimsel programın merkezinde çok bileşenli Al-Fe-Ni-Ti sistemi bulunan projenin ana hedefi bu dört bileşenli sistemin tamamen anlaşılması ve sistemin güvenilir bir termodinamik açıklamasının yapılmasıdır. Bu amaçla, seçilen dördü sistem alt sistemleri olan Fe-Al, Ni-Al ve Ti-Al bazlı ikili ve üçlü intermetalik sistemlerinde kısa ve uzun erimli düzen karakteristiklerinin eklenen alaşım elementinin çeşidi ve miktarına bağlı olarak nasıl değiştiği, teorik ve atomistik hesaplamalarla birleştirilerek, Monte Carlo gibi modelleme ve simulasyon yöntemleri kullanılarak incelenmiş ve modelleme çalışmaları, fazların ve faz dengelerinin fiziksel özellikleri ve karakterizasyonu ile ilgili yoğun deneysel çalışmalarla desteklenmiştir.</p>
Anahtar Kelimeler: İntermetalik bileşikler, alüminitler, Fe-Al, Ni-Al, Ti-Al, alaşım sistemleri
Projeden Yapılan Yayınlar: <p>M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2008). <i>Solidification Microstructures and Carbides Morphology in Rapidly Solidified Fe-Al-Cr-C Alloys</i>, <u>METALS AND MATERIALS International</u>, vol. 14, No: 4, pp. 397-403</p> <p>A.O. Mekhrabov and M.V. Akdeniz (2007). <i>Modelling and Monte Carlo Simulation of Atomic Ordering Processes in Ni₃Al Intermetallics</i>, <u>Modelling Simul. Mater. Sci. Eng</u>, vol. 15, pp. 1-12</p>

M. Yıldırım, M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2007). *Thermal analysis of order-disorder phase transformations in B2-type ordered Fe-Al-X intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 25

M. Aykol, Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2007). *Effect of impurities on the lattice site occupancy characteristics of TiAl intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 61

Ş. Talaş, Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2007). *Long range ordering characteristics of Fe-26Al-X (X=Cu, Ti) intermetallics*, Final Conference COST Action 535 THALU and 4th Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, EMPA, Materials Science & Technology and MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, October 2007, Interlaken, Switzerland, Book of Abstract, pp. 61

A. O. Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2006). *Lattice site occupancy and order-disorder phase transition characteristics of B2-type ordered Fe-Al-X intermetallics*, 3rd Discussion Meeting on the Development of Innovative Fe-Al Alloys, MPI für Eisenforschung GmbH, Dusseldorf, January 2006, Mettmann-Dusseldorf, Germany, Book of Abstract, pp. 51

M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov (2005). *The Carbide Morphology in Chromium Alloyed Fe-Al Based Intermetallics*, European Congress on Advanced Materials and Processes: EUROMAT 2005, Federation of European Materials Societies (FEMS), Prague, Czech Republic, September 2005, Web published at <http://www.euromat2005.fems.org/>

A. O. Mekhrabov and M. V. Akdeniz (2005). *Modelling and Monte Carlo Simulation of the Atomic Ordering Processes in Ni₃Al Intermetallics*, European Congress on Advanced Materials and Processes: EUROMAT 2005, Federation of European Materials Societies (FEMS), Prague, Czech Republic, September 2005, Web published at <http://www.euromat2005.fems.org/>