

Ti₃Al Yapısal ve Elastik Özelliklerinin Teorik Araştırılması*

Tahsin Özer**^a, Muhammet Karataşlı^b, Süleyman Çabuk^c

^a Osmaniye Korkut Ata University Bahçe Vocational High School, Osmaniye, Turkey

^b Çukurova University Faculty of Arts and Sciences, Adana, Turkey

^c Çukurova University Faculty of Arts and Sciences, Department of Physics, Adana, Turkey

MAKALE BİLGİSİ

Alınma: 12.01.2018
Kabul: 04.04.2018

Anahtar Kelimeler:
Elastik sabit,
Yoğunluk fonksiyoneli
teorisi, Ti₃Al.

**** Sorumlu
Yazar: Selvin Yeşilay**
e-posta: tahsinozer@
osmaniye.edu.tr

[^]IAREC 2017
sempozyumunda
sunulmuş ve
genişletilmiş bildiridir

ÖZET

Ti₃Al bileşiğinin yapısal ve elastik özellikleri genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımı (GGA) kullanılarak yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) dayalı ab initio metoduyla incelendi. Ti₃Al bileşiğinin bağımsız elastik sabitleri hesaplandı ve sonuçlar Ti₃Al bileşiğinin mekanik olarak kararlı olduğunu gösterdi. Ti₃Al bileşiğinin örgü sabiti, elastik sabitler, hacim ve kayma modülü, Young modülü ve Poisson oranı gibi bazı polikristal büyüklükler hesaplanan elastik sabitlerden türetilmiştir. Elde edilen sonuçlar mevcut deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırıldı.

DOI: <https://dx.doi.org/10.30855/gmbd.2018.04.01.006>

A Theoretical Study on Structural and Elastic Properties of Ti₃Al

ARTICLE INFO

Received: 12.01.2018
Accepted: 04.04.2018

Keywords:
Elastic constant,
Density functional
theory, Ti₃Al.

**** Corresponding
Authors**
e-mail: tahsinozer@
osmaniye.edu.tr

ABSTRACT

The structural and elastic properties of Ti₃Al compound were investigated using the generalized gradient approximation (GGA) with ab initio method based on density functional theory (DFT). The independent elastic constants of Ti₃Al compound were calculated and the results show that Ti₃Al compound is mechanically stable. Some polycrystalline quantities such as the lattice constant, elastic constants, bulk and shear modulus, Young's modulus, and Poisson's ratio of Ti₃Al compound were derived from calculated elastic constants. The obtained results were compared with the existing experimental and other theoretical data.

DOI: <https://dx.doi.org/10.30855/gmbd.2018.04.01.006>

1. Giriş

Titanyum esaslı intermetalik Ti_3Al , yüksek erime sıcaklığı, düşük yoğunluk ve iyi oksidasyon direnci nedeniyle, uçak motorlarında yüksek sıcaklıkta yapısal uygulamalar için umut vericidir [1-3]. 1954'te J57 Turbojet rotorlarının piyasaya sunulmasından bu yana, titanyum bazlı alaşımlar, gaz türbini motorlarında elde edilen performans iyileştirmelerinde önemli bir rol oynadı[2]. Bununla birlikte, Ti-Al alaşımlarının pratik uygulamalarında, oda sıcaklığında süneklik ve tokluğun olmayışı nedeniyle hâlâ aksamalar vardır. Bu aksama, elektronik yük yoğunluğunun ayarlanması ile bağlanmayı değiştirebilen üç elementli mikro alaşımlar yoluyla geliştirilmelidir [4]. Chu ve ark. (1996) tarafından yeni tahribatsız değerlendirme yöntemi, resonant ultrasound spectroscopy- RUS, kullanılarak intermetalik fazların elastik özelliklerinin tanımlanmasına vurgu yapılarak bu özellikler gözden geçirildi [5]. Zhang ve ark. (2013) gömülü-atom yöntemini kullanarak, katkıli Ti_3Al alaşımlarının elastik sabitlerini ve mekanik özelliklerini incelemişlerdir. Tian ve ark. (2013) VASP yazılımı ile GGA-PW91 ve GGA-PBE yaklaşıklığında L12 yapıda Al tabanlı alaşımların elastik özelliklerini araştırmışlardır[6]. Soufen ve ark. (2015) APW+lo metodu ile FP LAPW (fullpotential) kullanarak Ti_3Al intermetalik bileşiğin elastik özelliklerini çalışmışlardır[7].

Bu çalışma ile Ti_3Al bileşiğinin yapısal optimizasyonu yapılarak örgü sabiti, hacim modülü ve mekanik özelliklerinin araştırılması amaçlanmıştır.

2. Materyal ve Metot

Hesaplamalar açık-kaynak Quantum ESPRESSO (QE)'nin bir parçası olan PW[8] programı ile yapılmıştır. QE, yoğunluk fonksiyonel teorisine, düzlem dalgalarına ve psödo potansiyellere dayanır[9]. Hesaplamalarda ultrasof psödo potansiyeller ve Perdew - Burke-Ernzerhof(PBE)[10] tipi değiş tokuş-koralezyon fonksiyoneline genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımı(GGA) kullanıldı. Yapılan hesaplamalarda, düzlem dalgaların kesilim kinetik enerji değeri 100 Ry, yük yoğunluğu için kesilim kinetik enerji değeri 300 Ry ve k-noktaları için $4 \times 4 \times 4$ Monkhorst-Packörgü ağı seçilmiştir.

Elastik sabitler ElaStic[11] yazılımı kullanılarak hesaplanmıştır. ElaStic, ab initio total-enerji ya da stres hesaplamalarından verilen herhangi bir yapı için

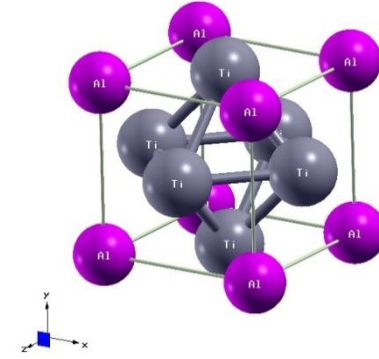
ikinci dereceden elastik sabitleri hesaplamaya bir araç sunar. Bu çalışmada toplam (total)-enerji tercih edilmiştir.

3. Bulgular ve Tartışma

Standart saydam stoneware sırnı (STG) ve CaO eklenen reçetelerin kimyasal bileşimi Tablo 3'te verilmiştir.

3.1.Yapısal Özellikler

Ti_3Al kristalinin birim hücresinde, Şekli 1'de gösterildiği gibi 3 tane Ti, 1 tane Al olmak üzere 4 atom vardır. Bu atomlardan Al (0,0,0), Ti(0,1/2,1/2: 1/2,0,1/2: 1/2,1/2,0) konumlarına yerleşmişlerdir. Ti_3Al kübik L12-AuCu₃ (Pm3m) yapısında kristalleşir.



Şekil 1. Ti_3Al kristalinin birim hücresi

Hesaplamalarda ilk adım olarak geometrik optimizasyon yapılarak örgü değeri 4,049 Å olarak bulunmuştur. Elde edilen bu değer Tablo 1'de verilen literatür değerleri ile kıyaslandığında deneysel ve teorik değerler ile oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

Optimize örgü değeri $\pm\%10$ aralığında 2'şer adımla değiştirilerek elde edilen örgü değeri ile toplam enerji hesaplandı. Hesaplanan toplam enerji değerleri QE paketi ile beraber gelen ev.x yazılımı kullanılarak 3 dereceden Birch hal denklemine fit edildi. Bu işlem sonucunda hacim modülü ($B_0 = 1274$ kbar) ve birinci türev değeri (4,29) olarak bulundu. Tablo 1'de verilen diğer bir teorik çalışma ile kıyaslandığında uyumlu olduğu görülmektedir.

3.1.Elastik Özellikler

Kübik kristaller için C11, C12 ve C44 olmak üzere üç tane bağımsız elastik sabit vardır. Kübik kristallerde mekanik kararlılığın gereği olarak elastik sabitlerin sağlaması gereken kriterler vardır. Bu kriterler,

$$C_{11} - C_{12} > 0, C_{11} > 0, C_{44} > 0, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (1)$$

olarak verilir. Tablo 1’de verilen elastik sabitlerin Denklem (1)’de verilen kübik malzemelerin mekanik kararlılık koşullarını sağladığı görülmüştür. Bu açıdan malzemenin mekanik olarak kararlı olduğu söylenebilir. Denklem(1)’de verilen kısıtlamalar aynı zamanda C12’nin C11’den küçük olması gerektiğini de içerir. Bu şartlar B₀’nin büyüklüğü üzerine bir sınırlamaya sebep olur. Sonuçta B₀’nin değeri C11 ve C12 arasında olması gerekir[12]. Tablo 1’den de görüleceği üzere bu şart da sağlanmaktadır.

$$C_{12} < B_0 < C_{11} \quad (2)$$

Tablo 1. Örgü sabitleri (a, Å), elastik sabitler (C_{ij},GPa) ve hacim modülü (B₀, GPa)

Referans	a	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B ₀
Bu çalışma	4,049	133,50	114,8	89,70	127,4
Deney[13]	4,064				
Teorik [6]		172,97	90,6	88,87	116,8
Teorik [7]		221,00	111,0	107,00	
Teorik [14]	4.048				

Bulk(B), Shear(G), Young(E) modülleri ve Poisson oranı(ϑ) aşağıdaki eşitlikler [15] yardımı hesaplanmış olup, elde edilen sonuçlar Tablo 2’de verilmiştir.

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (3)$$

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (4)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (5)$$

$$G_H = \frac{G_R + G_V}{2} \quad (6)$$

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (7)$$

$$\vartheta = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (8)$$

Eşitlikte geçen V,R ve H alt indisleri sırayla Voigt, Reuss, Hill yaklaşılığını göstermektedir.

Tablo 2. Bulk, Shear, Young modülleri(GPa) ve Poisson oranı

Referans	G _H	B	E _H	ϑ	G _H /B
Bu çalışma	38,90	121,05	105,43	0,35	0,32
Deney [5]	57,00	106,00	146,00	0,27	
Teorik [6]	66,58	116,90		0,26	
Teorik [7]	89,00	145,00	222,00	0,34	

Büyüklüğü katının sertliği hakkında bilgi veren bulk modülü, belirli bir basınç altında malzemenin hacim değişimine karşı gösterdiği direncin ölçüsüdür. Bu değer yaklaşık 121 GPa olmasından dolayı malzemenin yeterince sert olmadığı söylenebilir.

Bulk modülüne göre sertliği daha iyi tahmin eden ve malzemenin belirli düzlem boyunca kaymaya karşı gösterdiği tepkinin bir ölçüsü olan kayma modülü; 38,9 GPa olarak tahmin edilmiştir. Bu sonuca göre malzemenin yeterince sert olmadığı söylenebilir. G değerinin diğer teorik çalışmalar ile elde edilen değerlerden biraz farklı olması kullanılan yazılım ve yaklaşım farklılığından kaynaklı olduğu düşünülmektedir.

Young modülü gerilme zoruna karşı gerilme zorlanmasının ölçüsüdür. Büyük olması malzemenin sert olduğunu gösterir. Young modülünün 105,43 GPa olması malzemenin çok sert olmadığını gösterir. Bu durum, bulk ve kayma modülü ile varılan yargıyı desteklemektedir.

Bağlanma kuvvetlerinin karakteristiği hakkında bilgi veren Poisson oranı, malzemelerin temel özelliklerinden bir tanesidir. Merkezi kuvvetler için üst ve alt sınırları sırasıyla 0,50 ve 0,25’dir. Poisson oranının 0,35 olarak bulunmasından dolayı malzemenin merkezi kuvvetler etkisinde olduğu söylenebilir. Poisson oranı(ϑ), metal ve alaşımlar için, genellikle 0,25 – 0,45 arasında bulunur[7]. Bu açıdan bakıldığında Ti3Al metalik karakterde olması beklenmektedir. Bu çalışma ile bulunan sonucun Tablo 2’de verilen diğer çalışmalar ile uyumlu olduğu görülmektedir.

Ductile(dövülgen, yumuşak, sünek) malzemelerde genelde G_H/B oranı 0,5’den küçük, bu oranın büyük olduğu malzemeler ise genel olarak brittle(gevrek, kolayca kırılan) davranış sergilerler[15]. Bu çalışma ile G_H/Boranı 0,32

bulunmuştur. Bulunan bu sonuca göre malzemenin dövülgen bir davranış sergilemesi beklenmektedir.

4. Sonuçlar

QE yazılımı kullanılarak Ti3Al bileşiğinin yapısal parametreleri optimize edilerek örgü sabitinin değeri 4,049 Å olarak bulunmuştur. ElaStic kod yazılımı kullanılarak C11, C12 ve C44 bağımsız elastik sabitleri sırası ile 133,5, 114,8, 89,7 GPa olarak belirlendi. Hesaplanan elastik sabitler mekanik kararlılık şartını sağladığından dolayı Ti3Al malzemesi mekanik olarak kararlıdır. Elastik sabitler kullanılarak Hill yaklaşığında bulk, shear, Young modülü ve Poisson oranı 121,05, 38,9, 105,43 GPa ve 0,32 olarak hesaplandı. Elastik modüllerin sonucuna göre malzemenin yeterince sert olmadığı, merkezi kuvvetlerin etkisinde olduğu söylenebilir. Yine bu sonuçlara göre malzemenin metalik karakterde olması ve dövülgen bir davranış sergilemesi beklenmektedir.

Simgeler

QE	: Quantum ESPRESSO
PBE	:Perdew-Burke-Ernzerhof
B	: Bulkmodulu
G	: Shearmodulu
E	: Youngmodulu
ν	: Poisson oranı
V	: Voigt
R	: Reuss
H	: Hill

Kaynaklar

- [1] Shirai, Y., Yamaguchi, M., Studies of vacancies and dislocations in TiAl by positron annihilation. Mater. Sci. Eng. A, 1992, 152, 173-181.
- [2] Kim, Y. W., Intermetallic alloys based on gamma titanium aluminide. JOM., 1989, 41(7), 24-30.
- [3] Brossmann, U., Würschum, R., Badura, K., Schaefer, H.E., Thermal formation of vacancies in TiAl. Phys. Rev. B, 1994, 49, 6457.
- [4] Zhang, C., Huang, S., LI, R., Shen, J., Chen, N., Effects on Mechanical Properties of Refractory Metal Doped Ti3Al Alloy. International Journal of Modern Physics B 2013.27(26), 1350147.
- [5] Chu, F., Thoma, D.J., He, Y., Maloy, S.A., Mitchell, T.E., Resonant Ultrasound Spectroscopy: Elastic Properties of Some Intermetallic Compounds.

1996 TMS Meeting Cincinnati, Ohio, October 6-10, 1996.

[6] Tian, T., Wang, X.F., Li, W., Ab initio calculations on Elastic Properties in L12 structure Al3X and X3Al-type (X=transition or main group metal) intermetallic compounds. Solid State Communications, 2013, 156, 69-75.

[7] Soufen, C.A., Campos, M.C., Pintao, C.A.F., Imaizumi, M., Study of Elastic Properties of Ti3Al Intermetallic Compound Using the ab Initio Calculation. Materials Science Forum, 2015, 805, 690-693.

[8] P. Giannozzi et al., J. Phys.:Condens. Matter, 2009, 21 395502.

[9] [cited 2017 29 June]; Available from: <http://www.quantum-espresso.org>

[10] Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M., Generalized Gradient Approximation Made Simple. Physical Review Letters, 1996, 77/18, 3865-3868.

[11] Golezorkhtabar, R., Pavonea, P., Spitaler, J., Puschnig, P., Draxl, C., ElaStic: A tool for calculating second-order elastic constants from first principles. Computer Physics Communications, 2013, 184, 1861-1873.

[12] Beckstein, O., Klepeis, J. E., Hart, G. L. W. and Pankratov, O., First-principles elastic constants and electronic structure of a-Pt2Si and PtSi. Physical Review B, 2001, 63, 134112.

[13] Tomanek, D., Stability and elastic properties of hydrogen loaded Ti-xAl alloys: An ab initio study. Physical review. B, Condensed matter, 1995. DOI: 10.1103/PhysRevB.51.9569

[14] Ersen, M., Ti3Al ve Y3Al Bileşiklerinin Elektronik Yapısının ve Titreşim Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi ile İncelenmesi. Ahi Evran Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans Tezi, 2012.

[15] Razumovskiy, V.I., Isaev, E.I., Ruban, A.V., Korzhavyi, P.A., Ab initio calculations of elastic properties of Pt-Sc alloys. Intermetallics, 2008, 16, 8, 982-986.