

Fe ve Fe - %25 Al için maksimum streslerin (hkl) düzlemlerinde teorik olarak hesaplanması

Hamza Yaşar OCAK^{1,*}, Ali ÇETİN², Gencer SARIOĞLU¹

¹Dumlupınar Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Merkez Kampüsü, Kütahya.

²Osmangazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü., Meşelik Kampüsü, Eskişehir.

Geliş Tarihi (Received Date): 12.09.2017

Kabul Tarihi (Accepted Date): 01.11.2017

Özet

Oda sıcaklığında Fe ve Fe-% 25 Al (Fe_3Al) kristalleri bcc yapıda olup, deneysel örgü parametreleri (a_0) 2.87 Å ve 2,8964 Å dur. İç etkileşme enerjileri birbirlerine çok yakın olan Fe ve Fe_3Al kristallerinin, fiziksel özellikleri birçok yönden incelenmektedir. Temel fiziksel parametreler (hkl) kristal düzlemlerinde, farklı büyüklüklere sahiptir. Bu çalışmada, elastik parametrelerden, maksimum stressler (T_{hkl}), hem Fe hem de Fe_3Al kristalleri için (hkl) düzlemlerinde incelendi. Bunun için, öncelikle Wien2k yöntemi kullanılarak ikinci derece elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}) kübik simetri için hesaplandı. Kristallerin örgü parametreleri ve saçılma açıları (2θ) pik genişliklerini (β_{hkl}) bulmak için kullanıldı. Düzlemlere göre hesaplanan bazı elastik parametreler, farklı denklemlerden hesaplanan sonuçlarla karşılaştırıldı. Kristal boyutlarına (D_{hkl}) bağlı olan dislokasyon yoğunlukları (δ_{hkl}) da (hkl) düzlemlerinde incelendi. Elde edilen tüm sonuçlar, (hkl) düzlemleri ve bazı [hkl] doğrultularına göre yorumlanarak, yakın çalışma sonuçları ile karşılaştırıldı. Bu tarz analitik incelemelerin (222) düzlemine kadar genişletilmesinin yeterli olabileceği sonucuna ulaşıldı.

Anahtar kelimeler: Fe ve Fe - % 25 Al, maksimum stres, young sabiti, pik genişliği, kristal boyutu, dislokasyon yoğunluğu.

Theoretical calculation of maximum stresses (hkl) planes for Fe and Fe - 25% Al

Abstract

At room temperature, Fe and Fe-25% Al (Fe_3Al) crystals are in bcc structure and the experimental lattice parameters (a_0) are 2.87 Å and 2.8964 Å. The physical properties of Fe and Fe_3Al crystals, whose internal interaction energies are very close to each other, are investigated from many perspectives. The basic physical parameters have different sizes in the (hkl) crystal planes. In this study, the maximum stresses (T_{hkl}) were investigated from the elastic parameters in the (hkl) planes for both Fe and Fe_3Al crystals. For this, second order elastic constants (C_{11} , C_{12} and C_{44}) were calculated first for cubic symmetry by using the Wien2k method. The lattice parameters of the crystals and scattering angles (2θ) were used to find the peak widths (β_{hkl}). Some elastic parameters calculated with respect to the planes were compared with the results calculated from different equations. The dislocation densities (δ_{hkl}) related to crystal dimensions (D_{hkl}) were also studied in planes (hkl). All the obtained results were interpreted according to (hkl) planes and some [hkl] directions and compared with the results of other close studies. It has been reached that such analytical investigations could be extended to the (222) plane.

*Hamza Yaşar OCAK, hyasar.ocak@dpu.edu.tr, <http://orcid.org/0000-0003-3094-3459>

Ali ÇETİN, acetin@ogu.edu.tr, <http://orcid.org/0000-0003-0468-8087>

Gencer SARIOĞLU, gencer.sarioglu@dpu.edu.tr, <http://orcid.org/0000-0002-7753-7813>

Keywords: Fe and Fe₃Al, maximum stress, young stability, peak width, crystal dimension, dislocation intensity.

1. Giriş

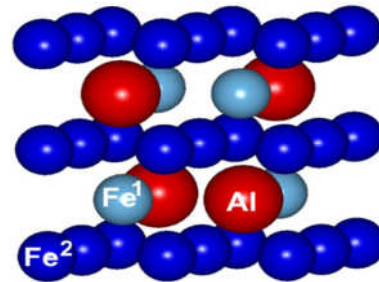
Fe esaslı alaşımlar sanayinin temel hammaddelerinden biri olup, bu alaşımlar üzerinde teorik ve deneysel çalışmalar devam etmektedir [1-3]. Yapılan çalışmaların çoğu Fe oranının yüksek olduğu alaşımların mekanik ve manyetik özellikleri üzerindedir [4-6]. Bu anlamda, malzemelerin mekanik özellikleri için M. Born tarafından ikinci derece elastik sabitlere (C_{ij}) bağlı olarak tanımlanan şartlar dikkate alınır [7-10]. Al'un yoğunlukça hafif ve aşırı paslanmaz özelliği, Fe-Al alaşım sistemi içinde kaynak yapılabilir olması bu alaşımların endüstride daha işlevsel hale gelmesi için yeterli nedenlerdendir [11-13]. Saf Fe bcc yapıda ve saf Al' da fcc yapıda olup, Fe - %25Al (Fe₃Al) alaşımının bcc yapıda kristalleştiği faz diyagramlarından ve x ışınları kırınımı (XRD) analiz sonuçlarından bilinmektedir. Ayrıca Al oranına ve sıcaklığa bağlı olarak kristal yapıda meydana gelen düzenli ve düzensizlikler de faz diyagramlarından bilinmektedir [14,15].

Malzemelerin birçok özelliği, teorik olarak, iki atom arasındaki atomik etkileşimlerden türetilen potansiyel fonksiyonlar yardımıyla incelenebilmektedir [16,17]. Bu tür potansiyel fonksiyonların kullanılmasıyla ortaya çıkan bazı sorunlar daha kapsamlı etkileşimleri tanımlayan yoğunluk fonksiyonel teoremlerinin (DFT) geliştirilmesiyle giderilmiştir. DFT, materyallerin özelliklerini incelemek için kullanılan en popüler ve başarılı kuantum mekanik yaklaşımlardan biri olup, karmaşık ve çok yüzeyle elektron dalga fonksiyonları yerine elektron yoğunluğunu kullanarak elektronik yapı hesaplamalarını gerçekleştirmektedir [18-20]. Kohn-Sham denklemlerine dayanan gerçek hesaplamalar için, değiş-tokuş fonksiyonunun yaklaşımları olan lokal yoğunluk (LDA), geliştirilmiş gradient (GGA), tam Muffin-Tin orbitalleri (EMTO), tam yükleme yoğunluğu (FCD), koherent potansiyel (CPA) ve tam potansiyel lineer artırılmış düzlem dalga (FLAPW) kullanılır [20-22]. Alaşımlar söz konusu olduğunda, yapısal ve manyetik bozukluk sorunları, EMTO metodu ile kolayca çözümlenebilir [10, 23]. Bu yöntemler kullanılarak Fe₃Al alaşımının birçok fiziksel özellikleri çalışılmıştır [24-26]. Bu yöntemlerle, kristallerin hacim sabiti (B), ikinci derece elastik sabitler (C_{ij}) ve Zener kayma sabiti (C_s) ile denge durumu enerjisi ve örgü parametresi enerji-hacim değişimlerinden hesaplanır. Bu parametrenin deneysel verilerle örtüşmesi kullanılan yöntem veya yöntemlerin hassasiyetiyle doğrudan ilgilidir.

Fe ve Fe₃Al kristallerinin mekanik özellikleri birçok yönden çalışılmasına rağmen, bu özellikleri (hkl) düzlemlerine göre inceleyen detaylı bir çalışmaya rastlanmamıştır. Sadece [hkl] doğrultuları üzerine yapılan sınırlı çalışmalar mevcuttur [27-29]. Bazı mekanik parametrelerin (hkl) düzlemlerine göre incelemesi, bu çalışmanın amacını oluşturmaktadır. Bu maksatla, Wien2k programı kullanılarak hesaplanan ikinci derece elastik sabitler, Born ve Cauchy şartlarına göre test edilerek kristallerin bazı elastik sabitleri (E_{hkl} , T_{hkl}), (hkl) düzlemlerine göre belirlendi. Hesaplanan bu sonuçları karşılaştırmak için; elastik parametre denklemlerinin yalın halleri bazı elastik parametreler için yeniden kullanıldı. Young sabitinin (hkl) düzlemindeki ile [hkl] doğrultusundaki büyüklükleri karşılaştırıldı. Son olarak da dislokasyon yoğunlukları δ_{hkl} , kristal boyutlarından (D_{hkl}) elde edilerek, düzlemlere göre yorumlandı.

2. Teorik çalışmalar

Bu çalışmada öncelikle kübik simetri için elastik sabitler Wien2k programında FLAPW ve GGA yaklaşımları kullanılarak hesaplandı [3, 19, 21, 30]. Bu hesaplamaların temel parametreleri materyallerin kristal yapıları ve uzay gruplarıdır. Fe ve Fe₃Al kristalleri kübik simetrisinin bcc yapısında olup, uzay grupları 225 serisinde $Fm\bar{3}m$ dir [31]. Deneysel örgü parametreleri: Fe için $a_0 = 2,87 \text{ \AA}$ ve Fe₃Al kristali için ise $a_0 = 2,8964 \text{ \AA}$ dur. Alaşımın örgü parametresi Fe_(1-x) - Al_(x) sisteminin XRD analizinden daha önce elde edilmiştir. Kübik simetriye sahip olan Fe ve Fe₃Al kristal yapıları, birim hücrelerinde 16 atom bulunan süper örgü olarak tasarlandı (Şekil 1). Bu tasarımda; Fe için bütün Fe atomları koyu mavi renkteki küreler şeklinde düşünüldü. Fe₃Al kristalinin birim hücresi de iki eşdeğer olmayan Fe alt tabaka üzerinde dağıtılan Fe atomları şeklinde belirtildi. Yani, Fe¹ durumları küçük ışıklı mavi küreler ve Fe² durumları da koyu mavi küreler olarak ve dört Al atomu ise daha büyük kırmızı küreler şeklinde tanımlandı.



Şekil 1: Fe₃Al Alaşımının süper örgüsü

Enerji değişim hesaplamaları için; düzlem dalga sayıları $R_{\max} K_{\max} = 10$, çekirdeğin kor ve valans durumu ayrışma enerjisi düzeyi -8 Ry alındı. Yakınsama durumları için ayrışma enerji seviyesi (Fermi yüzey integrasyonu) 0.0001 Ry, Brillouin bölge doğrultu kümesi $14 \times 14 \times 14$ seçilip, Brillouin bölgesinin indirgenemez parçası için de 50 k noktalı bir takım kümesi oluşturuldu. Enerji-hacim değişimleri, elastik sabitleri elde etmek için Murnaghan durum denklemine [23,30] fit edildi. Bu enerji değişimini bulmak için sabit hacimde kristale uygulanan deformasyon basınçları, $P^i = [I + \varepsilon_{ij}(\delta)]P$, denkleminle tanımlanır. Bu basınçlar, kristal yapıda eksten kaymalarına neden olur. Burada ε_{ij} stres tensörleri olup, i ve j alt indisleri 1'den 6'ya kadar değişen esneklik yön parametreleridir. Sabit entropi altında yapılan teorik işlemler ve kübik simetri gereğince elastik sabitlerin sayısı üç olur: $C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{13} = C_{23}$ ve $C_{44} = C_{55} = C_{66}$ ve izotropik kristallerde $C_{11} = (C_{12} + 2C_{44}) = 3C_{12}$ ve $C_{12} = C_{44}$ tür [7,8]. Eksenler ve düzlemler üzerindeki zorlama tensörleri δ ($\delta = \pm 1$ aralığında) ise hacimsel kesir oranlarını tanımlayan matris elamanlarıdır. Kristallere, kristalin yapısını değiştirmemek şartıyla hidrostatik basınç, üç-eksen kayması (triklinik), tetragonal, monoklinik ve ortorombik deformasyonlardan biri veya birkaçı uygulanabilir. Bu çalışmada ise, hidrostatik basınçtan hacim sabiti (B), ortorombik deformasyondan Zener elastik sabiti [$C_s = (C_{11} - C_{12})/2$] ve monoklinik deformasyondan ise yüzey burulma sabiti (C_{44}) dinamik matrisler yardımıyla aşağıdaki denklemlerin ortak çözümünden elde edildi. [32-36].

$$\frac{\Delta E}{V_0} = \frac{9}{2} B \delta^2, \frac{\Delta E}{V_0} = 6 C_s \delta^2 \text{ ve } \frac{\Delta E}{V_0} = 2 C_{44} \delta^2 \quad (1)$$

$$C_s = \frac{3}{4} (C_{11} - B) = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \text{ ve } B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (2)$$

Uygulanan deformasyonların zor tensörleri sırayla; $\varepsilon_1 = (\delta, \delta, \delta)$, $\varepsilon_2 = (\delta, \delta, [1/(1+\delta)^2])$ ve $\varepsilon_3 = (1, 1, [1/(1-\delta^2)])$ dir. Her bir deformasyon için δ 'nın farklı değerleri alınarak, minimum enerji değişimleri elde edildi. Yukarıdaki, (1 ve 2) eşitliklerinden hesaplanan elastik sabitler Cauchy şartları [$C_{44} = (2C_{11} - C_{12})/3$, $C_{12} = C_{44}$, $C_{11} = 3C_{12}$, $C_s/C_{44} = 1$ ve $P_c = (C_{12} - C_{44})/2 = 0$] gereğince kristallerin küresel simetriden sapması için öncelikle test edildi [9]. Simetrik olmayan durumlar için P_c , Cauchy basıncının çok küçük olması, sistemin denge düzeyi için oldukça önemlidir. Bu şartlar altında kübik bir kristalin mekaniksel karahlığı Born şartlarına göre ikinci derece elastik sabitlere bağlı olarak aşağıdaki denklem yardımıyla belirlendi [7]:

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} > C_{12} \text{ ve } (C_{11} + 2C_{12}) > 0 \quad (3)$$

Bu çalışmanın ana konusu olan maksimum stres, (hkl) düzlemleri için aşağıdaki şekliyle kullanıldı [37].

$$T_{(hkl)} = \frac{1}{4} E_{(hkl)} \beta_{(hkl)} \text{ Cot} \theta_{(hkl)} \quad (4)$$

Burada $E_{(hkl)}$, düzlemlerdeki Young sabitleri olup, kristalin ikinci derece elastik sabitlerine bağlı olarak aşağıda tanımlanan [37] denklemden elde edildi.

$$E_{(hkl)} = \frac{1}{S_{11} - 2[(S_{11} - S_{12}) - \frac{S_{44}}{4}]H} \quad (5)$$

Bu denklemde, S_{11} , S_{12} ve S_{44} ikinci derece elastik sabitlerden hesaplanırken, H ise (hkl) Miller indislerine bağlı boyutsuz bir çarpandır.

$$H = (h^2 k^2 + k^2 l^2 + l^2 h^2) / (h^2 + k^2 + l^2)^2 \quad (6)$$

Fe ve Fe_3Al kristallerinin deneysel örgü parametreleri kullanılarak her bir (hkl) düzleminin saçılma açıları ve düzlem uzaklıkları (7-8) eşitliklerinden hesaplandı. Burada $\lambda = 1.542 \text{ \AA}$, kullanılan x ışınları kaynağının dalga boyudur.

$$\text{Sin} \theta_{(hkl)} = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (7)$$

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (8)$$

Kristal düzlemleri üzerinde gözlemlenen XRD piklerinin genişlikleri (β), (hkl) düzlemlerine göre aşağıdaki denklemden hesaplandı [34].

$$\beta_{(hkl)} = \frac{k \lambda}{d_{(hkl)}} \text{ Cos} \theta_{(hkl)}; \quad (9)$$

Düzlemler üzerinde meydana gelen yapısal bozuklukları (dislokasyon yoğunluğu, δ_{hkl}) yorumlayabilmek için Scherrer yönteminden elde edilen kristal boyutları (D) kullanıldı [34-37].

$$D_{hkl} = \frac{0,9\lambda}{\beta_{hkl} \text{ Cos} \theta_{hkl}} \quad (10)$$

$$\delta_{hkl} = \frac{\tau}{D_{hkl}^2}, (\tau=1) \quad (11)$$

Yukarıda (5) nolu denklemden hesaplanan Young sabitlerini karşılaştırmak ve buna bağlı olarak hesaplanan bazı elastik parametrelerden de kristaller hakkında yorum yapılabilmesi için aşağıdaki denklemlerden faydalanıldı. Bu denklemlerle, mekaniksel olarak kararlı materyaller için elastik kayma sabiti (G), Young sabiti (E), Poisson oranı (ν), anizotropi parametresi (A_{VRH}) ve yönlere bağlı Young sabitleri $E_{[hkl]}$ büyüklükleri hesaplandı [7].

$$G_V = \frac{(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})}{5}, G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})]} \text{ ve } G = \frac{(G_V + G_R)}{2} \quad (12)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G}, \nu = \frac{3B - E}{6B} \text{ ve } A_{VRH} = \frac{G_V - G_R}{G_V + G_R} \quad (13)$$

$$E_{[100]} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (14)$$

$$E_{[110]} = \frac{4C_{44}(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{2C_{11}C_{44} + (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})} \quad (15)$$

$$E_{[110]} = \frac{3C_{44}(C_{11} + 2C_{12})}{C_{44} + (C_{11} + 2C_{12})} \quad (16)$$

3. Sonuçlar ve tartışma

Bu çalışmada ilk olarak, Şekil 1'deki Fe ve Fe₃Al kristal yapılarının enerji-hacim değişimleri seçilen deformasyonlara bağlı olarak denge noktası yakınlarında Wien2k program yardımıyla ayrı ayrı hesaplandı. Enerji değişimlerine, Fe ve Al atomlarının aynı ve farklı tür atomik etkileşimleri deformasyonlara bağlı olarak katkı verirler.

Deformasyonlar uygulandığı doğrultuda kristal yapıyı değiştirmeden, bazı örgü vektörlerini değiştirerek birim hacimde enerji değişimine neden olurlar. Birim hacimde meydana gelen enerji değişimleri ve buna bağlı olarak elde edilen elastik sabitler her bir deformasyon için δ 'nın ($\delta_B = 0.03$, $\delta_{Cs} = 0.04$ ve $\delta_{C44} = 0.02$) farklı değerlerinde hesaplanarak sonuçlar Tablo 1'de verildi.

Tablo 1. Kristallerin Wien2k programı ile hesaplanan elastik sabitleri

Kristal	a(Å)	E (eV/at)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	B (GPa)	C _s (GPa)	P _c (GPa)
Fe	2.8645	-4.2152	187.81	163.25	139.57	172.99	14.61	11.84
Fe ₃ Al	2.9468	-4.1975	178.65	152.36	125.48	161.12	13.15	13.44
Fe [19,47,137]	2.8647	-4.8700	239.27	151.87	121.90	181.00	43.70	14.98
Fe ₃ Al [19,47,137]	2.9918	-4.4000	177.73	139.13	134.00	166.60	19.3	19.3

Tablo 2. Fe ve Fe₃Al yapılarına ait bazı elastik parametreler

Kristal	E _p (GPa)	ν	G (GPa)	A _{VRH}	B/G	E _[100] (GPa)	E _[110] (GPa)	E _[111] (GPa)
Fe	156.4	0.3483	57.89	0.5315	2.9616	35.98	108.4	329.34
Fe ₃ Al	146.03	0.3488	54.14	0.4857	2.9728	37.53	109.05	298.78

Tablo 1'e göre her iki kristal yapı Born kararlılık şartlarını sağlamakta ve $(C_{11}/C_{12}) < 1.4$ olduğundan bcc yapının korunduğu görülmektedir. Cauchy şartlarına göre kristal yapıların izotropik olmadıkları $C_{11} \neq 3C_{12}$, $C_{12} \neq C_{44}$ ve $P_c \neq 0$ eşitsizliklerinden anlaşılmaktadır. Seçilen deformasyonların kristal yapıda meydana getirdiği kayma sabitlerinde çok büyük farkın olmadığı, Fe'in hacim sabitinin Fe₃Al'ün hacim sabitinden büyük olduğu ve Al oranından dolayı mukavemetin azaldığı anlaşılmaktadır. Fe ve Fe₃Al kristallerin minimum enerji düzeylerinden Fe'in daha kararlı yapıda olduğu görülmektedir. Ayrıca minimum enerji düzeyleri arasındaki farkın çok küçük (0.0177eV) olması, Fe₃Al kristalinin kararlılık bakımından Fe'e yakın olduğu anlamındadır. Enerjinin minimumdan geçtiği denge noktasındaki sapmalar, $\lambda = (V/V_0)^{1/3}$ eşitliğinden sırasıyla 0.998Å ve 1.017Å olarak, hacimsel kesir oranı da $\delta = (\Delta V/V_0)$ eşitliğinden 0.006 ve 0.05 olarak hesaplandı. Tablo 1'de verilen referans sonuçları ile Wien2k metoduyla elde ettiğimiz sonuçların uyumlu olduğu görüldü. Bu sonuçlardan faydalanarak metod kısmında tanımlanan (12-16) nolu denklemler yardımıyla hesaplanan elastik parametreler de Tablo 2'de verildi.

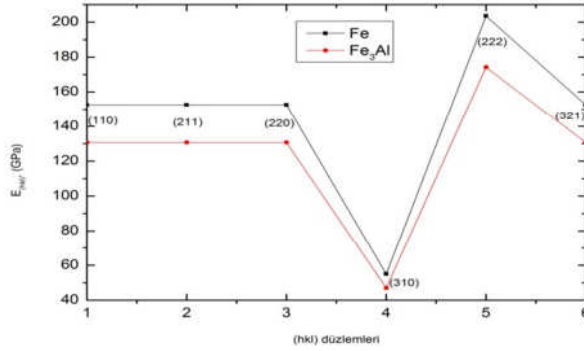
Çok kristal sistemleri için hesaplanan Young ve kayma sabitlerine göre Fe₃Al kristali Al atomlarının etkisinden dolayı mukavemet ve sertlik olarak daha zayıftır. Doğrultular üzerindeki Young sabitlerinden [111] doğrultusunda belirgin bir farkın olduğu görülmektedir. Bunun nedeni Al atomlarının o doğrultu üzerindeki yoğunluğu olabilir. [100] ve

[110] doğrultularında ise bu oranlar daha küçük olup, $E_{[100]} < E_{[110]} < E_{[111]}$ olduğu görülmektedir. Poisson oranlarından her iki kristalin metalik bağa sahip olduğunu anlarız. Çünkü $\nu > 0.25$ tir. Pugh kriteri olan B/G, kristallerin kırılma veya sünekliliği için bir ölçüdür. Buna göre $B/G > 1.75$ ise malzeme sünek, $B/G < 1.75$ ise kırılımandır. Tablo 2'ye göre, $(G/B) > 1.75$ olduğu için kristallerimizin her ikisi de sünektir. Materyallerin izotropik ölçüsü için tanımlanan anizotropi parametresi $A_{VRH} = 0$ ise o malzeme izotropik, $A_{VRH} \neq 0$ ise anizotropiktir. Tablo 2'den her iki kristalin anizotropik özellikte olduğu anlaşılmakta olup, ayrıca A_{VRH} , G ve ν parametrelerinin Al oranına bağlı olarak değiştiği de H. Zhang ve arkadaşları tarafından açıklanmıştır [38].

Düzlemlere göre maksimum stressleri hesaplayabilmek için önce Young sabitlerini (5), pik genişliklerini de (9) nolu denklemlerden hesapladık. Her iki hesaplamaların (hkl) düzlemlerine göre sonuçları Şekil 2-3' de verildi.

Young sabiti, $(x,y,z) \neq 0$ şartlarında tanımlı olduğu için (h00), (0k0) ve (00l) düzlemlerinde $E_{(hkl)} = 0$ dir. Bundan dolayı (200) ve (400) düzlemlerinde sıfır, diğer düzlemlerde ise $E \neq 0$ olarak hesaplanmıştır. Bu durum yukarıda (6) denkleminde tanımlanan H parametresinin de bir sonucudur. Her bir (hkl) düzlemi için $E_{Fe} > E_{Fe_3Al}$ olduğundan Fe'in Fe₃Al'ye göre daha dayanıklı olduğu anlaşılır. Yüzeyler arasındaki $\Delta E_{(hkl)}$ farkları (110), (211), (220) ve (321) için 21.96 GPa, (310) için 7.9 GPa ve (222) düzleminde ise 29.28 GPa olarak hesaplanmıştır.

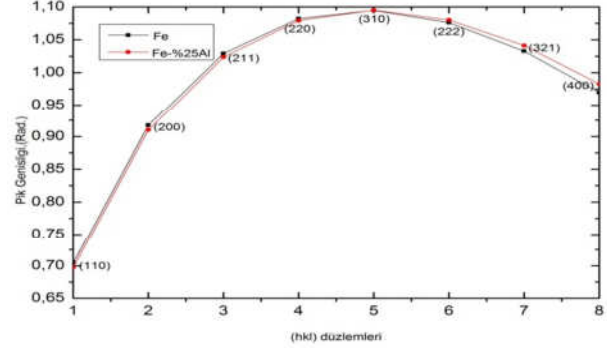
(222) yüzeyinde Young sabitinin büyük olmasının nedeni bu yüzeyin (111) yüzeyine paralel ve (222) yüzeyinin hacimsel doluluk oranı bakımından daha yoğun olmasından kaynaklanabilir. Ayrıca bu düzlemde etkileşen atom sayısının diğer düzlemlerde etkileşen atom sayılarından az olması bu etkiyi artıran nedenlerdendir. Zira Young sabiti birim yüzeydeki zorun bir etkisi olarak atomlar arasında etkileşimlerden bağımsız değildir. Young sabitinin en küçük değerinin hesaplandığı (310) düzleminin geometrisine bakıldığında koordinatlarının (1/3,1,0) olduğu görülür. Bu düzlemde etkileşen atom sayısının 48 olması yüzeysel atomik yoğunluğu artıracığından; diğer düzlemlere göre daha küçük bir Young sabiti büyüklüğü meydana gelmiş olabilir. Bu etkilerin, düzlemlerdeki atom yoğunluğuna (düzlemdeki atom sayısı/düzlem alanı) ve doğrusal atom yoğunluğuna (atom sayısı/birim uzunluk) bağlı olarak değiştiğini söyleyebiliriz.



Şekil 2: Fe ve Fe₃Al kristallerinin Young sabitleri

Tablo 2'deki sonuçlardan [hkl] doğrultularında hesaplanan $E_{[hkl]}$ ortalamalarının Fe için 157.91 GPa, Fe₃Al için de 148.45 GPa olduğu ve bu büyüklüklerin her iki kristalin E_P değerleriyle çok yakın olduğu görülmektedir. $E_{[100]} < E_{[110]} < E_{[111]}$ sıralı sonuçları da literatürlerle uyumludur [27]. Fe ve Fe₃Al kristallerinin (110), (211), (220) ve (321) düzlemleri için hesaplanan $E_{(hkl)}$ sonuçları sırayla 152.62 GPa ve 130.66 GPa olup, bu sonuçların Tablo 2'deki E_P değerleriyle ve ortalama değerler ile daha yakın olduğu anlaşılmaktadır. Ancak (222) düzlemindeki büyüklükler $E_{[hkl]}$ ortalamalarından ve E_P değerlerinden oldukça farklıdır. $E_{(hkl)}$ sonuçlarının düzlem ortamlarından Fe için 145.2 GPa, Fe₃Al için de 124.27 GPa olarak hesaplandı. ($E_P - E_{(hkl)}$) farkları (110), (211), (220) ve (321) düzlemlerinde sırayla 3.78 GPa ve 15.37 GPa ortalama farkları ise 11.2 GPa ve 21.73 GPa olarak bulundu. E_P ve $E_{(hkl)}$ arasındaki bu küçük farkın hesaplamalara dahil edilmeyen diğer düzlemlerin katkıları olabileceği düşünülmektedir. Kristallerin ilk üç düzlemlerinde hesaplanan Young sabiti büyüklükleri ile E_P büyüklükleri eşit kabul edilebilir. Bu sonuçlara bakarak, en yakın komşuluk etkileşimleri gibi, ilk düzlemlerdeki temel parametre büyüklüklerinin de

kristallerin mekaniksel kararlılıklarına önemli bir katkı sunduğu söylenebilir. Hesapladığımız bu sonuçların, farklı fiziksel etkilerle ölçülen veya farklı metotlarla hesaplanan sonuçlarla uyumlu olduğunu gördük [24, 25, 32, 39, 40].



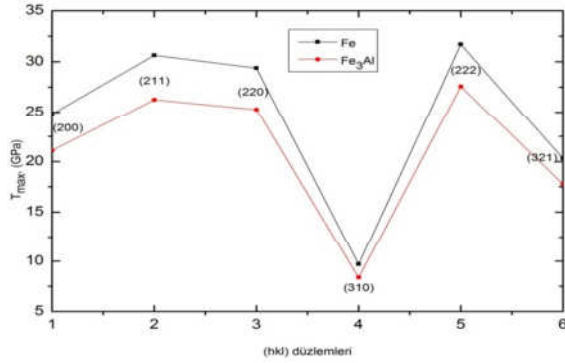
Şekil 3: Fe ve Fe₃Al kristallerinin pik genişlikleri

Kristallerin XRD analizleri sonucunda düzlemleri tanımlayan pikler, o düzlemlerde şiddetleri ve pik genişlikleri bakımından incelenir. Malzemelerin türüne göre farklılık olsa da genel olarak şiddetin yüksek olduğu durumlarda piklerin genişlikleri daha küçük, geniş piklerin şiddetleri de kısmen küçüktür. Şekil 3'de düzlemlere göre bu dağılım görülmektedir. Bu sonuçlar, hesap edilirken her düzlemin örgü parametresi yerine kristalin birim hacminin örgü parametresi kullanıldı. Bundan dolayı sonuçlarımızda kısmi sapmalar olacaktır. Şekil 3'e göre, Fe'nin pik genişlikleri (310) düzlemine kadar Fe₃Al alaşımının pik genişliklerinden büyük ve artarak devam ettiği, (310) düzleminden sonrada da küçük ve azalarak küçüldüğü, (310) düzleminde ise her iki pik genişliğinin en büyük değerinde eşit olduğu görülmüştür. Ortalama pik genişlikleri Fe için 0.9883 Rad ve Fe₃Al için 0.9887 Rad olup, aralarındaki fark 0.000425 Rad dır. Bu sonuçtan %25 Al oranının pik genişliklerinde önemli bir fark meydana getirmediği şeklinde anlaşılabilir. (220) ve (222) düzlemlerindeki pik genişlikleri ise antisimetrik olarak birbirlerine eşit olup, sonraki düzlemlerde pik genişlik farkı artarak devam etmektedir. Ortalamanın altındaki pik genişliklerine sahip (110) ve (200) düzlemlerinde (I/I_0)'n daha şiddetli olduğunu söyleyebiliriz.

(hkl) düzlemlere göre (4) nolu denklem yardımıyla hesaplanan maksimum streslerin sonuçları Şekil 4'de verildi.

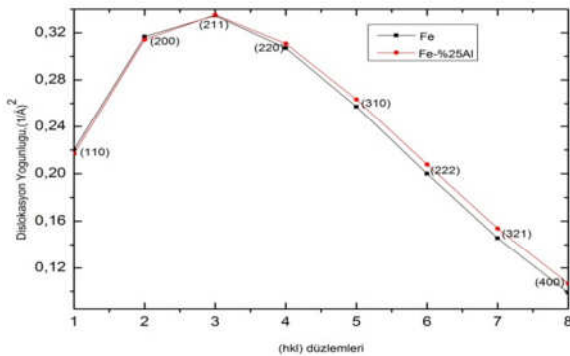
Kristal düzlemlerinde maksimum stresler, Young sabitlerine, pik genişliklerine ve Bragg açısına bağlı olarak hesaplandı. Şekil 4'ten görüldüğü gibi $T_{Fe} > T_{Fe_3Al}$ olup, sistematik bir değişim yoktur. Ortalama değerler Fe için 24.42 GPa, Fe₃Al için 21.06 GPa olarak hesaplandı. Yine en büyük değer (222) düzleminde; sırayla 31.70 GPa ve 27.56 GPa en küçük değerler de (310) düzleminde; 9.69 GPa ve

8.37 GPa olarak bulundu. İlk üç düzlem ortalamaları ise sırayla 28.28 GPa ve 24.21 GPa olarak hesaplanırken, düzlemler arasındaki en küçük fark (310) düzleminde 4.385 GPa olarak elde edildi. (hkl) düzlemlerinden gelen toplam katkılar ise Fe için 146.55 GPa, Fe₃Al için 126.34 GPa olarak hesaplandı. Fe üzerine F.Milstein tarafından yapılan teorik bir çalışmada stress 170 GPa olarak, başka bir çalışmada ise %26 Al için 190 GPa olarak hesaplanmıştır [44,113]. $(G/T_{(hkl)})$, her bir (hkl) düzlemleri için oransal bir değer en küçüğü olarak $T_{(hkl)} = (G/20)$ olarak hesaplanmış olup [40], bizim çalışmamızda bu sayısal oran 5.97 ve 6.47 olarak bulundu.



Şekil 4: Fe ve Fe₃Al kristallerinin maksimum stresleri

Kristallerdeki enerji değişimleri yüzeylerde iç deformasyonlara bağlı olarak yapısal bozukluklar meydana gelmesine yol açar. Her bir düzlemdeki farklı atomik etkileşimler farklı yoğunlukta yapısal bozuklukları ortaya çıkarır. Şekil 5, bu yapısal bozuklukların yüzeylerdeki dağılımını göstermektedir.



Şekil 5: Fe ve Fe₃Al kristallerinin dislokasyon yoğunlukları

Dislokasyon yoğunlukları Şekil 5'e göre ilk üç düzlemde artmakta ve sonraki düzlemlerde ise azalmaktadır. Fe ve Fe₃Al kristallerinin dislokasyon yoğunlukları (211) düzleminde eşit, sonraki düzlemlerde Fe kristalindeki yapısal bozukluklar daha azdır. Bu ilk üç düzlemde maksimum streslerin büyük olmasının da dolaylı etkisi görülmektedir. Al oranı yüzeyde küçük de olsa yapısal farklılıklar oluşturmuş ve daha alt düzlemlerde bu etki son derece azalmıştır. Ortalama dislokasyon yoğunluğu ise Fe için 0.2350 (Å)², Fe₃Al için de 0.2386 (Å)² olup, iki kristal yapı arasındaki çok küçük farkın (0.0036 (Å)²) Al oranından kaynaklandığı ve çok büyük bir yapısal bozukluğun oluşmadığı sonucuna ulaşılmıştır.

Bu çalışmada, Wien2k programı yardımıyla elde edilen ikinci derece elastik sabitler bazı elastik parametrelerin belirlenmesi için kullanıldı. Elde edilen bu sonuçlar, (hkl) düzlemleri için analitik olarak hesaplanan aynı elastik parametre sonuçlarıyla karşılaştırıldı ve sonuçların uyumlu olduğu görüldü. (hkl) düzlemlerinde yapılan analitik inceleme sonucunda temel parametrelerin düzlemlere göre nasıl değiştikleri görüldü. Al katkısının (hkl) düzlemlerinde her bir parametere için etkileri belirlendi. Özellikle maksimum stresin Al oranına bağlı olarak azaldığı ve Al oranının kristal yapıyı anizotropiden uzaklaştırdığı sonucuna ulaşıldı. Bu çalışmada elastik parametre hesaplarında gözlenen küçük farkların; düzlemlerin tamamının dikkate alınmadığından ve her düzlemin örgü parametresi yerine kristal yapının ortalama örgü parametresinin kullanılmış olmasından kaynaklandığı düşünüldü. Buna rağmen, deneysel XRD piklerinin ortalama 4-6 düzlem aralığında gözlemlenmesinden dolayı analitik çalışmaların (222) düzleminde sonlandırılmasının büyük bir hesap hatasına yol açmayacağı ve bu analitik yöntemin benzer çalışmalara uygulanmasının faydalı olabileceği sonucuna ulaşıldı.

Kaynaklar

[1] Gargicevich, D., Galvan Josa, V.M., Blanco, C., Lambri, O.A. and Cuello, G.J., Structure determination of Fe-Al-Ge alloys. **Journal of**

Physics Conference Series, 663, 01204 (2015).

[2] Alonso, P.R., Gargano, P.H., Bozzano, P.B., Ramirez-Caballero, G.E., Balbuena, P.B. and Rubiolo, G.H., Combined ab initio and

- experimental study of A₂+L₂₁ coherent equilibria in the Fe-Al-X (X=Ti, Nb, V) systems. **Intermetallics**, 19, 1157-1167 (2011).
- [3] Uçgun, E. and Ocak, H.Y., Electronic properties of austenite and martensite Fe-9%Mn alloys. **Central European Journal of Physics**, 6, 4, 880-811 (2008).
- [4] Bremers, H., Hesse, J., Ahlers, H., Sievert, J. and Zachmann, D., Order and magnetic properties of Fe_{89-x}Mn₁₁Al_x alloys: magnetization measurement and X-ray diffraction. **Journal of Alloys and Compounds**, 366, 67-75 (2004).
- [5] Eumann, M., Sauthoff, G. and Palm, M., Phase equilibria in the Fe-Al-Mo system – Part I: Stability of the Laves phase Fe₂Mo and isothermal section at 800°C. **Intermetallics**, 16, 706-716 (2008).
- [6] Kim, H., Suh, D. and Kim, N.J., Fe-Al-Mn-C Lightweight structural alloys: a review on the microstructures and mechanical properties. **Science Technology Advance Mater**, 14, 014205 (2013).
- [7] Lung, C.W. and March, N.H., Mechanical Properties of Metals : Atomistic and Fractal Continuum Approaches, **World Scientific Pub. Co. Inc.**, Singapore, (1999).
- [8] Milstein, F., Mechanical stability of crystal lattices with two-body interactions. **Physcal Review B**, 2, 2, 512-518 (1970).
- [9] Milstein, F. and Rasky, D.J., Volumetric and structural contributions to the interatomic potentials and elastic moduli of cubic metals. **Physcal Review B**, 33, 4, 2341-2349 (1986).
- [10] Borchì, E., Bruzzi, M., Biggeri, U., Furetta, C. and Lemeilleur, F., Elastic moduli of polycrystalline diamond. **European Organization for Nuclear Research**, 94, 20, (1994).
- [11] Gu, J., Gu, S., Xue, L., Wu, S. and Yan, Y., Microstructure and mechanical properties of in-situ Al₁₃Fe₄/Al composites prepared by mechanical alloying and spark plasma sintering. **Material Sciences and Engineering**, 558, 684-691 (2012).
- [12] Skiba, T., Haušild, P., Karlík, M., Vanmeensel, K. and Vleugels, J., Mechanical properties of spark plasma sintered FeAl intermetallics. **Intermetallics**, 18, 1410-1414 (2010).
- [13] Goulart, P.R., Spinelli, J.E., Cheung, N. and Gargia, A., The effect of cell spacing and distribution of intermetallic fibers on the mechanical properties of hypoeutectic Al-Fe alloys. **Materials Chemistry and Physics**, 119, 1-2, (2010).
- [14] Leamy, H.J., The elastic stiffness coefficients of iron-aluminium alloys-II the effect of long range order. **Acta Metallurgica**, 15, 12, 1839-1851 (1967).
- [15] Rudman, P.S., A zeroth approximation calculation of order with application to the phase diagram. **Acta Metallurgica**, 8, 5, 321-327 (1960).
- [16] Milstein, F., Morse function description of anharmonicity in pressure-volume relations of cubic metals. **Physica Status Solidi**, 48, 2, 681-688 (1971).
- [17] Najafabadi, R. and Kalonji, G., Mechanical stability criteria for interatomic potential functions used in computer simulations of materials. **Acta Metallurgica**, 36, 4, 917-927 (1988).
- [18] Jamal, M., Asadabadi, S.J., Ahmad, I. and Aliabad, H.A., Elastic constants of cubic crystals. **Computational Material Sciences** 95, 592-599 (2014).
- [19] Gonzales-Ormeño, G.P., and Petrilli, M.H., Ab-initio calculations of the formation energies of BCC-based superlattices in the Fe-Al system. **Calphad**, 26, 4, 573-582 (2002).
- [20] Zhang, H., Punkkinen, M.P.J., Johansson, B., Hertzman, S. and Vitos, L., Single-crystal elastic constants of ferromagnetic bcc Fe-based random alloys from first-principles theory. **Physcal Review B**, 81, 184105 (2010).
- [21] Arıkan, N., Ersen, M., Ocak, H.Y., Iyığör, A., Candan, A., Uğur, Ş., Uğur G., Khenata, R. and Varshney, D., Ab initio study of phonon dispersion and elastic properties of L1₂ intermetallics Ti₃Al and Y₃Al. **Modern Physics Letters B**, 27, 30, 1350224 (2013).
- [22] Bai, Y., Xing, J., Wu, H., Liu, Z., Gao, Y. and Ma, S., Study on Preparation and mechanical Properties of Fe₃Al-20wt.%Al₂O₃ Composites. **Materials and Desing**, 39, (2012).
- [23] Ocak H.Y., Uçgun E. ve Ünal R., “Experimental and first-principles investigation of the crystal structure of powder metallurgy Al-1.1Sc and Al-2Sc alloys”, **Transactions of Nonferrous Metals Society of China**, 23, 3020-3026, (2013).
- [24] Wang, J., Xing, J., Cao, L., Su, W. and Gao, Y., Dry sliding wear behavior of Fe₃Al alloys prepared by mechanical alloying and plasma activated sintering. **Wear**, 268, 3-4, (2010).
- [25] Eumann, M., Palm, M. and Sauthoff, G., Alloys based on Fe₃Al or FeAl with strengthening Mo₃Al precipitates. **Intermetallics**, 12, 625-633 (2004).
- [26] Nan-xian, C., Atomistic analysis of the field-ion microscopy image of Fe₃Al. **Physcal Review B**, 57, 22, 8842 (1998).
- [27] Milstein, F. and Chantasiriwan, S., Theoretical study of the response of 12 cubic

- metals to uniaxialloading. **Physcal Review B**, 58, 10, 6006 (1998).
- [28] Yue-Lin, L., Li-Jiang, G. and Shuo, J., Ab-initio investigation on mechanical properties of copper. **Chinese Physics B**, 21, 9, 1045 (2004).
- [29] Milstein, F., Hill, R. and Huang, K., Theory of the Response of an Cubic Crystals to [111] Loading. **Physcal Review B**, 21, 10, 4282-4291 (1980).
- [30] Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H, Kvasnich D. ve Luitz J., WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. **Technical Universty**, Wien, (2001).
- [31] Karakose E. ve Keskin M., Structural investigations of mechanical properties of Al based rapidly solidified alloys. **Materials and Design**, 32, 4970–4979 (2011).
- [32] Friák, M., Deges, J., Krein, R. Frommeyer, G. and Neugebauer, J., Combined ab initio and experimental study of structural and elastic properties of Fe₃Al-based ternaries, **Intermetallics**, 18, 1310-1315 (2010).
- [33] Osman Örnek, L1₂ fazda Rh₃La bileşiğinin ab initio çalışması, **Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi**, 20, 3, 591-595 (2016).
- [34] Cullity, B.D, X- Işınları Difraksiyonu, (Çev. Sümer A.) **İTÜ Yayınları**, (1966).
- [35] Taylor A. and Jones R.M., Constitution and magnetic properties of iron-rich iron-aluminum alloys. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, 6, 16-37, (1958).
- [36] Peiqing L., Yupeng W., Ruijiao L., Yang Z. and Yang Y., Effect of Mn element on microstructure and mechanical properties of bulk nanocrystalline Fe₃Al based materials prepared by aluminothermic reaction, **Materials Science and Engineering A**, 527, 2313–2319 (2010).
- [37] Schmid E. and Boas W., Plasticity of Crystals. **Hughes F.A. and Co. Ltd.**, London. (1950).
- [38] Hualei Z, Marko P.J. Punkkinen, Johansson B. and Vitos, L., Theoretical elastic moduli of ferromagnetic bcc Fe alloys, **Journal of Physics: Condensed Matter**, 22, 275402 (2010).
- [39] Foruts, E., Morris, D.G. and Muñoz-Morris, M.A., Evaluation of elastic modulus and hardness of FeeAl base intermetallics by nano-indentation techniques, **Intermetallics** 38, 1-3 (2013).
- [40] Zamanzade, M., Vehoff, H. and Barnoush, A. Effect of chromium on elastic and plastic deformation of Fe₃Al intermetallics, **Intermetallics** 41, 28-34 (2013).