

Fe_(1-x) – Al_(x) ALAŞIM SİSTEMİNİN İKİNCİ DERECE ELASTİK SABİTLERİNİN GENELLEŞTİRİLMİŞ MORSE POTANSİYEL FONKSİYONU İLE HESAPLANMASI

Hamza Yaşar OCAK, Ercan UÇGUN

Dumlupınar Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü / Kütahya

Geliş Tarihi: 05.02.2008 Kabul Tarihi: 18.02.2009

ÖZET

Fe_(1-x) – Al_(x) alaşım sisteminin (x = 0.25 ve x = 0.30) ikinci dereceden elastik sabitleri Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Fonksiyonu (G.M.F), potansiyel parametresi (m) ve kristal örgü sabitine (a₁) bağlı olarak ayrı ayrı hesaplandı. Kristalin kararlılık sınırında (a₀ = a₁) elastik sabitlerin deneysel değerlere, m = 2 de, çok yakın olduğu görüldü. Kullanılan potansiyel fonksiyonun bcc yapıdaki alaşım kristaller için de uygulanabilirliği başarıyla test edildi.

Anahtar Kelimeler: Fe_(1-x) – Al_(x), Alaşım, Genelleştirilmiş Morse Potansiyel Fonksiyonu, Kararlılık, Elastik sabitler

SECOND ORDER ELASTIC CONSTANTS OF Fe_(1-x) – Al_(x) ALLOY CALCULATED WITH GENERALISED MORSE POTENTIAL FUNCTION

ABSTRACT

Second order elastic constants of Fe_(1-x)-Al_(x) alloy (x=0.25 and x=0.30) have been separately calculated using the Generalised Morse Potential Function (G.M.F) depending on the potential parameter (m) and lattice parameter (a₁). Elastic constants were very close to experimental values at the limit of stability (a₀=a₁) for m=2. It has been successfully tested that the potential function used is suitable for the bcc alloy crystals.

Key Words: Fe_(1-x) – Al_(x), Alloys, Generalised Morse Potential Function, Stability, Elastic Constants

1.GİRİŞ

Genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu (G.M.F) aşağıdaki şekilde tanımlıdır [1].

$$\Phi(r_{ji}) = \frac{D}{(m-1)} \left[e^{-m\alpha(r_j-r_0)} - m e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right] \quad (1)$$

Burada D, atomlar arasındaki bağlanma enerjisi m, potansiyel sabiti α , sertlik sabiti r_0 , denge durumunda atomlar arası uzaklıktır. r_j kristalin dış kuvvet etkisinde denge durumundan uzaklaşması durumunda atomlar arasındaki uzaklık olup,

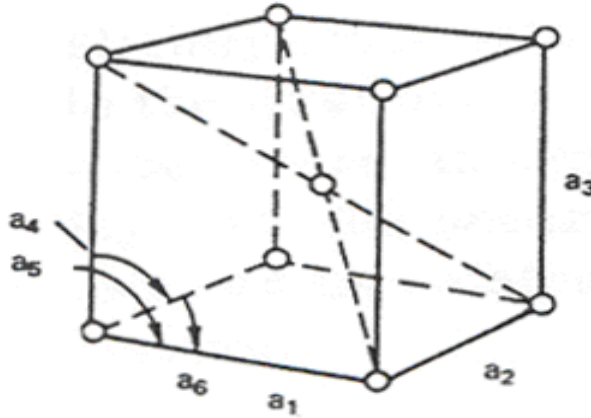
$$r_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 l_i a_i \hat{a}_i \quad (2)$$

şeklinde tanımlıdır [2]. Eşitlikteki l_i , Miller indisleri a_i de, kristal örgü sabitidir. Bu çalışmada bu potansiyel fonksiyonun tercih edilmesinin nedeni metalik elementlerin iç etkileşimlerini başarıyla açıklamış olmasıdır [3]. Bundan dolayı bcc ve fcc kristaller için başarılı sonuçlar veren bu potansiyel fonksiyonun alaşımlar için nasıl bir sonuç vereceğini çalışma konusu edinilmiştir. Bu potansiyelin dışında da birçok potansiyel fonksiyonu metalik kristallerin yapısını açıklamak için başarıyla kullanılmış [4] olsa da, bcc kristalleri açıklamada yetersiz oldukları bilinmektedir.

Saf demir (Fe) bcc, saf alüminyum (Al) fcc olup, Fe_(1-x) - Al_(x) sisteminin $x = 0.25$ ve $x = 0.30$ için bcc yapıda kristalleştiği faz diyagramları sonucunda bilinmektedir [5]. Bilindiği gibi metalik alaşımlar sanayinin önemli ham maddeleri olup, Fe-bazlı alaşımlarda bu anlamda önemli bir yere sahiptirler. Maddelerin mekaniksel özelliklerinden olan hacim sabiti, ikinci derece elastik sabitlere (C_{ij})bağlı olarak da hesaplanabildiklerinden; ikinci derece elastik sabitler bu anlamda da önemli bir mekaniksel özellik parametreleridir.

İncelediğimiz alaşım sisteminin bu faz yapıları araştırmacılar için hala önemli bir çalışma sahası olmaya devam etmektedir [5]. Bu çalışmaların bir sonucu da; $x = 0,1875 - 0.25$ için bcc disorder, $x = 0.25 - 0.34$ için bcc DO₃ ve $x = 0.34 - 0.50$ için bcc B2 şeklinde tanımlanmıştır[6]. Ayrıca oda sıcaklığında $x = 0.25$ de DO₃ → B2 dönüşümü gerçekleştiği de bilinmektedir [7].

Kübik bir kristal, denge şartlarında eşit örgü sabitlerine sahiptir. Ancak dış bir kuvvetin kristalde bir doğrultuda meydana getireceği etkiye göre bct → bcc → bct dönüşümü mümkün olmaktadır. bct bir kristalde bir boyutta genişleme ve büzüşme olurken bcc kristale göre toplam hacimde bir değişme olmamaktadır. Bir bct kristalin geometrik şekli Şekil 1’ de görülmektedir. Bu şekilde a_1, a_2 ve a_3 örgü öteleme vektörleri olup, a_4, a_5 ve a_6 da bu örgü öteleme vektörleri arasında bir birine dik olan açılardır [8].



Şekil 1: Bir dış kuvvet altındaki bir birim hücre (bct kristal yapısı)

Fe_(1-x) - Al_(x) sistemi düşük x değerlerinde düzensiz bir yapı sergilemektedir. Ancak $x = 0,1875$ den itibaren sistemli bir geometrik düzene ulaştıkları, $x = 0,34$ de kadar merkezde bir Fe atomu ve onun komşuluklarında ise Al atomları yer alarak sıralandıklarını A.Taylor ve R.M. Jones’in çalışmalarından öğrenmekteyiz [9]. Atomların kendi aralarında etkileşimleri; Fe – Fe, Al – Al ve Fe – Al şeklinde ayrı ayrı çiftler halindedir. Burada farklı atomların katkıları aynı tür atomların katkılarının yarısı kadardır. Söz konusu katkıları, ayrıca hesaplanıp ilgili hesaplamalarda kullanıldı [5].

Kübik bir kristalin dış kuvvetler altında kısmen de olsa değiştiği bilinmektedir. Kristale uygulanan bir doğrultudaki bir kuvvet, kristalin fiziksel sabitlerini değiştirir. Ancak kristal belli şartlar altında kararlılığını muhafaza edebilir. Bu şartlara Born kararlılık ilkeleri denilir. Bu çalışmada genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu, potansiyel sabiti (m) ve örgü sabiti a_i ’e göre test edilerek ikinci derece elastik sabitler hesaplandı.

2. İKİNCİ DERECE ELASTİK SABİTLER

Born – Huang [10] kararlılık kriterleri kristal yapıların mekaniksel özellikleri için oldukça önemlidir. Bir kristal bir dış kuvvetin etkisi altında ikinci derece elastik sabitlere bağlı olarak,

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} N C_{ij} S_i S_j \quad (3)$$

şeklinde tanımlanan bir enerjiye sahiptir [8]. Burada N, alaşım katkısı, S_i ve S_j de örgü parametrelerinin artması ve azalması ile oluşan küçük gerilmelerdir.

Bir kübik kristalde üç bağımsız ikinci derece elastik sabit vardır. Bunlar: C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ dür. Ayrıca merkezi etkileşmeler için de Cauchy şartı gereği C₁₁ = C₄₄ dür. Born kararlılık ilkeleri ikinci derece elastik sabitler için; C₁₁ > 0, (C₁₁ / C₁₂ > 1), (C₁₁² - C₁₂²) ve (C₁₁ + 2C₁₂) > 0 dir [10]. F. Milstein'in kübik kristaller üzerine yaptığı çalışmalarında bcc kristaller için ikinci derece elastik sabitlerin oranının 1 – 1.36 aralığında olduğu belirtilmiştir [11].

İkinci derece elastik sabitler potansiyel fonksiyonuna bağlı olarak aşağıdaki şekilde tanımlanır[11].

$$C_{11} = \frac{1}{8} n a_1 \sum_{L_{1,2,3}} N L_1^4 \ddot{\Phi}(r_j^2) \quad (4)$$

$$C_{12} = \frac{1}{8} n a_1 \sum_{L_{1,2,3}} N L_1^2 L_2^2 \ddot{\Phi}(r_j^2) \quad (5)$$

Burada, L_{1,2,3}, Miller indisleri (bcc kristaller için toplamları ya tek ya da çifttir) n, birim hücredeki atom sayısıdır (bcc kristal için 2).

Merkezi etkileşmeler için atomlar arasındaki uzaklık aşağıdaki gibi tanımlanır[2]

$$r_j = \frac{1}{2} (a_1^2 L_1^2 + a_2^2 (L_2^2 + L_3^2))^{1/2} \quad (6)$$

Alaşıma ait deneysel veriler kullanılarak Girifalco – Weizer [12] ve Akgün [13] metodları yardımıyla potansiyel sabitleri de ayrıca hesaplandı. Bundan sonra ise kuvvetin bir eksen doğrultusunda uygulandığı var sayılarak, kristalin homojen olarak deforme edilmesi durumlarına karşılık ikinci derece elastik sabitler örgü sabitine bağlı olarak hesaplandı. Kristalin hacim sabiti (Bulk Modülü) de;

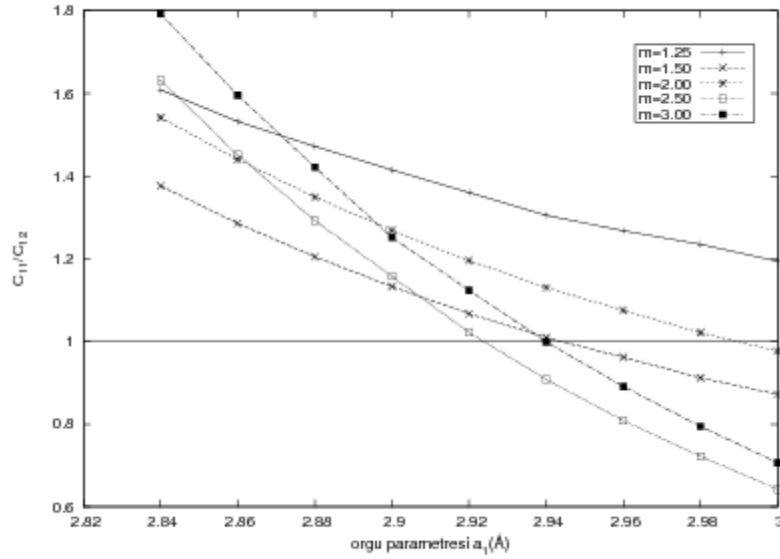
$$B = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (7)$$

ifadesine göre bulundu [14]. Hesaplamalar için, kristali en yakın 10. komşuluğuna kadar genişletilecek şekilde özel olarak yazılan Fortran dilinde bir program kullanıldı.

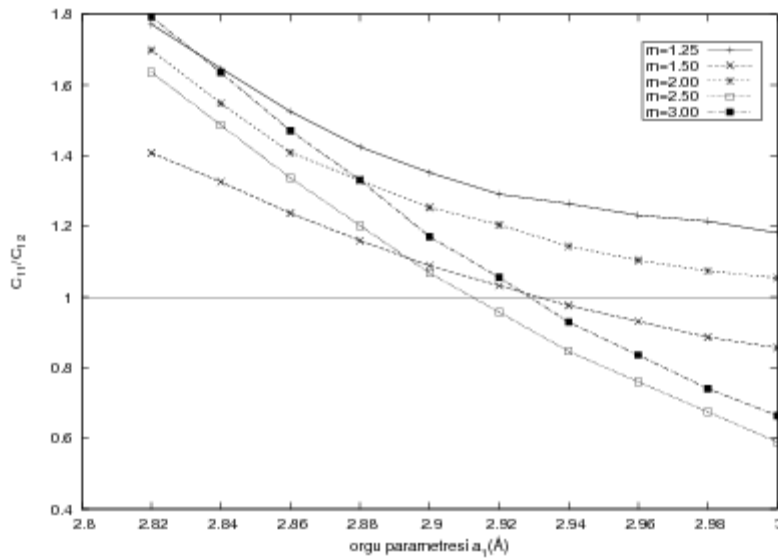
3. SONUÇ VE TARTIŞMA

Fe_(1-x) – Al_(x) sisteminin x = 0.25 ve x = 0.30 değerleri için ayrı ayrı ikinci dereceden elastik sabitler ve hacim sabiti genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonu kullanılarak Born [10] kriterlerine ve Milstein [1,8] tanımlamalarına göre incelendi. Kristal örgülere genelleştirilmiş Morse potansiyeli m = 1.25, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0

değerleri uygulanarak, a 'ya göre C_{11}/C_{12} oranları ayrı ayrı hesaplandı. Elde edilen sonuçlar Şekil 2 ve 3'de, denge şartındaki ikinci derece elastik sabit oranları ise çizelge 1' de hacim modülleri ile beraber verildi.



Şekil 2: Fe - %25Al alaşımı için C_{11}/C_{12} oranının örgü sabitine göre değişimi.



Şekil 3: Fe - %30Al alaşımı için C_{11}/C_{12} oranının örgü sabitine göre değişimi.

Çizelge 1: Fe_(1-x) – Al_(x) sistemine ait denge şartında elde edilen sabitler. (Bx10¹²dyn/cm² ve a₀ (Å))

Sistem	a ₀ (deney) [16]	C ₁₁ /C ₁₂ (deney) [16]	B (deney) [16]	m=1.25		m=1.5		m=2.0		m=2.5		m=3.0	
				C ₁₁ /C ₁₂	B	C ₁₁ /C ₁₂	B	C ₁₁ /C ₁₂	B	C ₁₁ /C ₁₂	B	C ₁₁ /C ₁₂	B
Fe-%25Al	2.8964	1.3106	1.4417	1.4480	1.62	1.1688	1.656	1.309	1.4425	1.27	1.4976	1.3967	1.5552
Fe-%30Al	2.8971	1.3580	1.3726	1.3787	1.39	1.1247	1.4796	1.3545	1.3724	1.1356	1.6577	1.2499	1.781

Şekil 2, 3 ve çizelge 1 de; hesaplamalarda kullanılan genelleştirilmiş Morse potansiyel fonksiyonun bütün m değerleri için elde edilen sonuçlar ve deneysel parametreler görülmektedir. m = 2'deki sonuçların Fe_(1-x) – Al_(x) alaşım sistemini (x = 0.25 ve x = 0.30) başarıyla tanımladığı görüldü. Deneysel sonuçların kararlılık düzeyinde hesaplanan sabitlerin m = 2'deki sonuçlar ile çok yakın olması, genelleştirilmiş Morse potansiyelinin bu değerde klasik Mors potansiyeli olarak, bcc Fe_(1-x) – Al_(x) alaşım kristal yapısını başarıyla açıkladığı görülmüştür. Ayrıca m'in artan değerlerine karşılık, C₁₁ / C₁₂ oranının artışında standart bir oran bulunamamıştır. İncelediğimiz gerilmiş (disorder) ve DO₃ bcc kristal yapıları m = 2'de ki oranlarının kararlılık [11] limitlerinde olduğu; bu yapılar ait kararlık çalışmalarından görüldü. Görülen başka bir sonuç ise; C_{ij} sabitlerinin hepsinin pozitif değerde olmasıydı ki, bu kararlılığın başka bir şartı olarak bilinmektedir [10]. (C₁₁ / C₁₂) > 1 sınırının üst kısmı kristalin kararlı olduğu bölge olarak tanımlanır [3]. Aynı alaşım sistemi için bu potansiyelin modifiye edilmiş şekliyle benzer bir çalışmamız devam etmektedir.

KAYNAKÇA

- [1] Milstein, F., Morse Function Description of Anharmonicity in Pressure-Volume Relations of Cubic Metals. Phys.Stat.Sol.b, 45, 681, (1971).
- [2] Kittel C., "Introduction to Solid State Physics", J.Wiley and Sons, Newyork, (1968).
- [3] Milstein, F., Theoretical Strength Of a Perfect Crystal, Phss. Rev.B. 2, 2, (197).
- [4] Najafabadi, R. and Kalonoji, G., Mechanical sStability Criteria for Interatomic Potential Functions Used Computer Simulations of Materials. Acta. Met, 36.917.(1988).
- [5] Rudman, P.S., Long-Range Order in Fe Calculation of Order With Application to the Phase Diagram. Acta.Met., 8, 321, (1960).
- [6] Leamy, H.J., The Elastic Stifness Coficientes of Iron- Aluminum Alloys –II the Efecet of Lang Range Order. Acta. Met., 15, 1839, (1967).
- [7] Das, G.P., and Rao, B.K. Electronic stracture of substiochiometric Fe- Al intermetallics. Phys. Rev. B 66, 184203, (2002).
- [8] Milstein, F., Mechanical Stability of Crystal with Two- body Interactions. Phys.Rev.B., 2, 512, (1970).
- [9] Taylor, A., and Jones,R.M., Constition and Magnetic properties of Iron-Rich Iron-Alminum Alloys. J.Phy.Chem.Solids, 6, 16, (1958).
- [10] Born, M., and Kun, H., "Dynamical Theory of Crystal Lattice", Oxford, (1940).
- [11] Milstein, F., Applicability of Exponentially Attractive and Reulsive İnteratomic Potential Functions in the Description of Cubic Crystals. J.Apl.Phys., 44, 9, (1973).
- [12] Girifalco, L.A., and Weizer, V.G., Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals. Phys.Rev., 114, 687, (1959).
- [13] Akgün, İ., Elastic properties of antiferromagnetic Fe-40%Mn Alloys. J.Mater.Sci.Let., 13, 56, (2000).
- [14] Hong, M., and Qiu, S.I. Pressure instability of bcc iron. Phys.Rev., b 66, 24113-1, (2002).

