



**HAVACILIK VE UZAY SANAYİNDE KULLANILMAK ÜZERE YENİ BİR
TİTANYUM ALAŞIMI GELİŞTİRİLMESİ VE MEKANİK
ÖZELLİKLERİNİN ARAŞTIRILMASI**

Erdem MERMER

**DOKTORA TEZİ
METALURJİ VE MALZEME MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2023

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
 - Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
 - Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
 - Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
 - Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,
- bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Erdem MERMER

08/06/2023

HAVACILIK VE UZAY SANAYİNDE KULLANILMAK ÜZERE YENİ BİR
TİTANYUM ALAŞIMI GELİŞTİRİLMESİ VE MEKANİK ÖZELLİKLERİNİN
ARAŞTIRILMASI
(Doktora Tezi)

Erdem MERMER

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Haziran 2023

ÖZET

Ti-Al esaslı alaşımlar, yüksek özgül dayanımları, yüksek ergime sıcaklıkları, oksidasyon dirençleri ve düşük yoğunlukları nedeniyle büyük ilgi görmektedir. Havacılık ve uzay endüstrisi için umut verici malzemeler olarak kabul edilmektedirler. Bununla birlikte, ortam sıcaklıklarındaki zayıf süneklik, Ti-Al alaşımlarının geniş çapta kullanımını sınırlamaktadır. Bu nedenle, yetersiz özellikleri geliştirmek için daha fazla alaşım tasarımı ve geliştirilmesi gereklidir. Bu kapsamda Ti, Al, Hf, Zr ve Nb elementleri kullanılarak Al bakımından zengin yeni Ti-Al alaşımları üretilmiştir. Bu tez, havacılık endüstrisi için Al bakımından zengin Ti-Al alaşımlarının tasarımı, üretimini ve karakterizasyonunu içermektedir. Ti-Al alaşımlarında kullanılacak alaşım elementleri, Cambridge Sequential Total Energy Package (CASTEP) ile ilk prensipler ilkesi hesaplamaları ve Thermo-Calc yazılımı ile termodinamik hesaplamalar temel alınarak hesaplanmıştır. Öncelikle, birinci prensip hesaplamaları ile yapısal ve mekanik kararlılığa sahip uygun bileşimler belirlenmiştir. Daha sonra Thermo-Calc ile her bir alaşımın faz diyagramı ile termodinamik özellikleri çalışılmıştır. Teorik çalışmaların ardından seçilen alaşım kompozisyonları vakum indüksiyon ergitme (VIM) yöntemiyle üretilmiştir. Ti-Al bazlı alaşımlar, elektron mikroskobu (SEM), X-ışını kırınımı (XRD) ve fiziksel analiz kullanılarak ayrıntılı olarak karakterize edilmiştir. Alaşımların mekanik özellikleri anlamak için nanoindentasyon tekniği ile analizler yapılmıştır. İncelenen tüm alaşımlar arasında en umut verici alaşımın Ti-43Al-6Hf-2Nb olduğu bulunmuştur. Seçilen alaşımın yüksek sıcaklıktaki davranışını anlamak için mekanik basma ve oksidasyon testleri ile yüksek sıcaklık performans testleri yapılmış, Ti6Al4V alaşımı ile karşılaştırılmıştır. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımı, Ti6Al4V'ye karşı 800°'de daha iyi basma mukavemeti ve yüksek sıcaklık oksidasyon direnci sergilemiştir.

Bilim Kodu : 91518
Anahtar Kelimeler : Ti-Al alaşımları, havacılık ve uzay, mekanik özellikler, yüksek sıcaklık oksidasyonu
Sayfa Adedi : 180
Danışman : Doç. Dr. Hanifi ÇİNİCİ
İkinci Danışman : Prof. Dr. Rahmi ÜNAL

DEVELOPMENT AND CHARACTERIZATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF A NEW TITANIUM ALLOY FOR AEROSPACE INDUSTRY

(Ph. D. Thesis)

Erdem MERMER

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

June 2023

ABSTRACT

Ti–Al-based alloys draw much attention due to their high specific strength, high melting temperature, oxidation resistance as well as low density. They are accepted as promising materials for the aerospace industry. However, poor ductility at ambient temperatures limits widely usage of Ti-Al alloys. Thus, further alloy design and development are required to enhance inadequate properties. Within this scope, Ti, Al, Hf, Zr, and Nb elements were used to produce novel Al-rich Ti-Al alloys. This thesis comprises the design, production, and characterization of Al-rich Ti-Al alloys for the aerospace industry. The alloying elements to be used in Ti-Al alloys were computed based on first-principles calculations with Cambridge Sequential Total Energy Package (CASTEP) and thermophysical calculations with Thermo-Calc software. First, proper compositions with structural and mechanical stability were determined by first-principles calculations. Then, thermodynamic properties with a phase diagram of each alloy were studied by Thermo-Calc. After theoretical studies, the selected compositions were produced by vacuum induction melting (VIM). The Ti-Al-based alloys were characterized in detail by using scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), and physical analysis. The alloys were analyzed by nanoindentation technique to understand mechanical properties. The most promising alloy was found to be Ti-43Al-6Hf-2Nb among all investigated alloys. High-temperature performance tests in terms of compression strength and oxidation tests were performed and compared with Ti6Al4V alloy to understand the high-temperature behavior of the selected alloy. Ti-43Al- 6Hf-2Nb alloy exhibited better compression strength and high-temperature oxidation at 800° against Ti6Al4V.

Science Code : 91518

Key Words : Ti-Al alloys, aerospace, mechanical properties, high temperature oxidation

Page Number : 180

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Hanifi ÇİNİCİ

Co-Supervisor : Prof. Dr. Rahmi ÜNAL

TEŞEKKÜR

Doktora öğrenim sürecim boyunca beni her alanda destekleyen, yönlendiren ve bilgi ve birikimlerinden faydalandığım kıymetli tez hocalarım Doç. Dr. Hanifi ÇİNİCİ ve Prof. Dr. Rahmi ÜNAL'a çok teşekkür eder, şükranlarımı sunarım. Tez sürecinde ve özellikle tasarım çalışmalarında verdiği desteklerinden ve yönlendirmelerinden dolayı kıymetli hocam Prof. Dr. Gökay UĞUR'a çok teşekkür ederim. Tez çalışmalarım boyunca özellikle deneysel çalışmalarında bilgi ve tecrübesinden faydalandığım Doç. Dr. Volkan KILIÇLI'ya teşekkürü borç bilirim. Tez konumla ilgili çalışma yapmama olanak tanıyan, çalışanı olmaktan gurur duyduğum Türk Havacılık ve Uzay Sanayii A.Ş.'ye teşekkürü bir borç bilirim. Tez çalışmalarım boyunca her türlü desteği sağlayan değerli çalışma arkadaşlarım Remzi Ecmel ECE, Sertaç ALTINOK ve Emin TAYLAN'a ayrı ayrı teşekkür ederim. Doktora öğrenim sürecinde manevi olarak desteğini hissettiğim Dr. Öğr. Üyesi Mete BAKIR'a teşekkür ederim. Bugünlere gelmemi sağlayan annem, babam ve özellikle beni doktora sürecine teşvik eden kardeşim Erdiç MERMER'e özel olarak teşekkür ederim. Manevi desteğini her şeyden önde gördüğüm kıymetli eşim İpek MERMER'e, gösterdiği sabır ve destekleri için çok teşekkür ederim. Bana her zaman motivasyon kaynağı olan canım kızlarım İrem ve Duru'ya minnetlerimi sunarım.

Bu çalışma, Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) ve Türk Havacılık ve Uzay Sanayii (TUSAŞ) tarafından desteklenen 2244 Sanayi Doktora Programı (Proje No:118C092) ile gerçekleştirilmiştir. TÜBİTAK BİDEB'e desteklerinden dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xiii
RESİMLERİN LİSTESİ	xviii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xxi
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	5
2.1. Titanyum Aluminatlar	5
2.1.1. Ti_3Al	7
2.1.2. $TiAl$	7
2.1.3. $TiAl_2$	8
2.1.4. $TiAl_3$	8
2.2. Ti-Al İntermetaliklerine Alaşım Elementlerinin Etkileri	9
2.2.1. Cr, Mn ve V	11
2.2.2. Nb, Mo, Ta ve W	13
2.2.3. B, C ve Si	15
2.2.4. Hf ve Zr.....	18
2.3. Ti-Al Alaşım Tasarımı için Hesaplamalı Metotlar	21
2.3.1. Yoğunluk fonksiyonel teorisi.....	22
2.3.2. Moleküler dinamik.....	24
2.3.3. Faz diyagramlarının hesaplanması.....	25

	Sayfa
2.4. Ti-Al Alaşımlarının Üretim Metotları.....	26
2.4.1. Döküm metotları	26
2.4.2. Toz metalurji metotları.....	28
2.4.3. Birleştirme teknikleri ile üretim.....	30
3. MALZEME VE METOT	31
3.1. Ham Malzemeler	31
3.2. Hesaplamalı Metotlar	32
3.2.1. Cambridge sıralı toplam enerji paketi (CASTEP) simülasyonları.....	32
3.2.2. Thermo-calc analizleri	33
3.3 Üretim Metotları.....	34
3.3.1. Vakum indüksiyon ergitme.....	34
3.4. Karakterizasyon Teknikleri.....	34
3.4.1. X-ışını kırınımı (XRD).....	34
3.4.2. Elektron mikroskobu.....	35
3.4.3. Mekanik test.....	36
3.4.4. Sertlik testleri	37
3.4.5. Yoğunluk ölçüm testleri.....	37
3.4.6. Radyografik muayene	38
3.4.7. Yüksek sıcaklık oksidasyon testleri	38
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	41
4.1. Teorik Çalışma Sonuçları.....	41
4.1.1. Parametre optimizasyonu.....	41
4.1.2. Parametrelerin doğrulanması	44
4.2. Hafniyum (Hf) Elementinin $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ İntermetaliklerine olan Etkisinin İncelenmesi	47
4.3. Zirkonyum (Zr) elementinin $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ fazlarına etkisinin incelenmesi	61

Sayfa

4.4. Niyobyum (Nb) elementinin Zr ve Hf katkılı üçlü alaşımlara etkisinin incelenmesi.....	76
4.4.1. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımları	76
4.4.2. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımları.....	82
4.4.3. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımları	88
4.4.4. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımları.....	93
4.4.5. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımları.....	99
4.5. Deneysel Çalışma Sonuçları	104
4.5.1. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımı.....	105
4.5.2. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımı	110
4.5.3. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımı.....	116
4.5.4. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımı.....	121
4.5.5. Ti-45Al-6Zr alaşımı	127
4.5.6. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımı.....	132
4.5.7. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımı.....	138
4.5.8. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımı	144
4.5.9. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımı	150
4.5.10. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının yüksek sıcaklık testleri.....	156
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	161
5.1. Sonuçlar.....	161
5.2. Öneriler	164
KAYNAKLAR	167
ÖZGEÇMİŞ	179

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. TiAl alaşımları.....	6
Çizelge 2.2. Başlıca alaşım elementlerinin Ti-Al alaşımlarına olan etkisi.....	11
Çizelge 2.3. Döküm yöntemi ile üretilen ticari TiAl alaşımları	28
Çizelge 2.4. Toz metalurji yöntemleri ile üretilen alaşımlar	30
Çizelge 2.5. Katı Hal difüzyonu ile üretilen alaşımlar	30
Çizelge 3.1. Ham malzemelerin saflık dereceleri	31
Çizelge 4.1. TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazları için kesilim kinetik enerji-serbest enerji değerleri.....	42
Çizelge 4.2. TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazları için toplam <i>k</i> noktaları-serbest enerji değerleri ...	43
Çizelge 4.3. TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazlarının yapısal özellikleri.....	45
Çizelge 4.4. TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazlarının elastik sabitleri.....	46
Çizelge 4.5. TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazlarının mekanik özellikleri	47
Çizelge 4.6. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımları için hesaplanmış kafes parametreleri ve termodinamik özellikler Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf.....	48
Çizelge 4.7. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımları için hesaplanmış elastik sabitler	51
Çizelge 4.8. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının hesaplanmış mekanik özellikleri	53
Çizelge 4.9. Zr katkılı TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazlarının hesaplanmış termodinamik değerleri.....	63
Çizelge 4.10. Zr katkılı TiAl ₂ ve TiAl ₃ fazlarının hesaplanmış kafes parametreleri.....	64
Çizelge 4.11. Zr katkılı TiAl ₂ ve TiAl ₃ alaşımlarının elastik sabitleri.....	66
Çizelge 4.12. Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımlarının hesaplanmış mekanik özellikleri	68
Çizelge 4.13. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının Kafes parametreleri ve sistem enerjileri.....	78
Çizelge 4.14. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri	79

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.15. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri.....	84
Çizelge 4.16. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri.....	85
Çizelge 4.17. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri.....	90
Çizelge 4.18. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri.....	91
Çizelge 4.19. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri.....	95
Çizelge 4.20. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri.....	97
Çizelge 4.21. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri.....	101
Çizelge 4.22. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri.....	102
Çizelge 4.23. Ti-56Al-4Nb-2Zr alaşımının teorik ve deneysel kafes parametreleri.....	108
Çizelge 4.24. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri	109
Çizelge 4.25. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının teorik ve deneysel kafes parametreleri	113
Çizelge 4.26. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri.....	115
Çizelge 4.27. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının teorik ve deneysel kafes parametreleri	119
Çizelge 4.28. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri	120
Çizelge 4.29. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel kafes parametreleri.....	124
Çizelge 4.30. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri	126
Çizelge 4.31. Ti-45Al-6Zr alaşımının kafes parametreleri.....	130
Çizelge 4.32. Ti-45Al-6Zr alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri.....	131
Çizelge 4.33. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının kafes parametreleri.....	135
Çizelge 4.34. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri	137
Çizelge 4.35. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımının kafes parametreleri.....	141
Çizelge 4.36. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri	143

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.37. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlının kafes parametreleri	147
Çizelge 4.38. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlının deneysel mekanik özellikleri	149
Çizelge 4.39. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlının kafes parametreleri	153
Çizelge 4.40. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlının deneysel mekanik özellikleri	155



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Ti-Al faz diyagramı	6
Şekil 2.2. Ti_3Al kristal yapısı	7
Şekil 2.3. TiAl kristal yapısı	7
Şekil 2.4. $TiAl_2$ kristal yapısı.....	8
Şekil 2.5. $TiAl_3$ kristal yapısı.....	9
Şekil 2.6. Mn elementinin Ti-47Al-2Nb-2Cr alaşımına olan mekanik etkisi.....	12
Şekil 2.7. Ti-44Al-6Nb-1Cr alaşımının V katkısı sonucu sürünme grafikleri.....	13
Şekil 2.8. TiAl-Nb ve TiAl-Nb Ta alaşımlarının oksidasyon grafiği	14
Şekil 2.9. Silisyum içeren ve içermeyen TiAl alaşımlarının a) havada izotermal oksidasyonu ve (b) simüle edilmiş bir gazda çevrimsel oksidasyonu	17
Şekil 2.10. Ti-47Al-2Hf alaşımının a) Statik mukavemet b) Sürünme grafikleri	20
Şekil 2.11. TiAl-Mn alaşımlarının 1000 °C'deki üçlü faz diyagramı.....	26
Şekil 3.1. Thermo-Calc programı ile hesaplanmış Ti-Al faz diyagramı.....	33
Şekil 4.1. Kesilim kinetik enerji-serbest enerji grafiği	42
Şekil 4.2. Toplam k noktaları-Serbest Enerji grafiği	44
Şekil 4.3. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b)Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının kafes parametrelerinin Hf katkısı ile değişimi	49
Şekil 4.4. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri	50
Şekil 4.5. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b) Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının elastik sabitlerinin Hf %'ne göre değişimi.....	52
Şekil 4.6. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b) Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının elastik modüllerinin Hf %'ne göre değişimi	54
Şekil 4.7. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının a) B/G oranı b) ν ve c) anisotropi özelliklerinin Hf %'ne göre değişimi	55
Şekil 4.8. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının Hf % değişimi ile a) Sertlik ve b) İşlenebilirlik indeksi değişimi.....	60

Şekil	Sayfa
Şekil 4.9. Zr katkılı $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri	63
Şekil 4.10. Zr katkılı a) $TiAl_2$ ve b) $TiAl_3$ alaşımlarının Zr katkısı ile kafes parametrelerinin değişimi	65
Şekil 4.11. Zr katkılı a) $TiAl_2$ ve b) $TiAl_3$ alaşımlarının elastik sabitlerinin değişimi ...	67
Şekil 4.12. a) $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve b) $Ti-(62-x)Al-xZr$ alaşımlarının elastik modüllerinin Zr %'ne göre değişimi.....	69
Şekil 4.13. $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve $Ti-(62-x)Al-xZr$ alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri	70
Şekil 4.14. $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve $Ti-(62-x)Al-xZr$ alaşımlarının Zr % değişimi ile a) Sertlik ve b) İşlenebilirlik indeksi değişimi.....	75
Şekil 4.15. $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi.....	77
Şekil 4.16. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının elastik sabitleri değişimi.....	78
Şekil 4.17. $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının bulk, kesme ve elastisite modülleri	79
Şekil 4.18. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri.....	80
Şekil 4.19. $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi.....	83
Şekil 4.20. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ alaşımlarının elastik sabitleri değişimi.....	84
Şekil 4.21. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ alaşımlarının elastik modülleri değişimi	85
Şekil 4.22. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri	86
Şekil 4.23. $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$ alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi.....	89
Şekil 4.24. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$ alaşımlarının elastik sabitleri değişimi.....	90
Şekil 4.25. Nb %'ne bağlı olarak $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$ alaşımlarının elastik modülleri değişimi	91

Şekil	Sayfa
Şekil 4.26. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri	92
Şekil 4.27. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi.....	95
Şekil 4.28. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi.....	96
Şekil 4.29. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi	96
Şekil 4.30. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri	98
Şekil 4.31. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi.....	100
Şekil 4.32. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi.....	101
Şekil 4.33. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi	102
Şekil 4.34. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri	103
Şekil 4.35. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının sıcaklık-ısı grafiği	105
Şekil 4.36. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının faz diyagramı	106
Şekil 4.37. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının XRD grafiği	107
Şekil 4.38. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği	110
Şekil 4.39. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının sıcaklık-ısı grafiği.....	111
Şekil 4.40. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının faz diyagramı	111
Şekil 4.41. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının XRD grafiği.....	113
Şekil 4.42. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği.....	115
Şekil 4.43. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının sıcaklık-ısı grafiği.....	116
Şekil 4.44. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının faz diyagramı	117
Şekil 4.45. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının XRD grafiği	118

Şekil	Sayfa
Şekil 4.46. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımasının nanosertlik testi grafiği	121
Şekil 4.47. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği	122
Şekil 4.48. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımasının faz diyagramı	123
Şekil 4.49. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımasının XRD grafiği	124
Şekil 4.50. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımasının nanosertlik testi grafiği	126
Şekil 4.51. Ti-45Al-6Zr alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği	127
Şekil 4.52. Ti-45Al-6Zr alaşımasının faz diyagramı.....	128
Şekil 4.53. Ti-45Al-6Zr alaşımasının XRD grafiği.....	129
Şekil 4.54. Ti-45Al-6Zr alaşımasının nanosertlik testi grafiği.....	132
Şekil 4.55. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği	133
Şekil 4.56. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının faz diyagramı	133
Şekil 4.57. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının XRD grafiği	135
Şekil 4.58. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının nanosertlik testi grafiği	137
Şekil 4.59. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği	138
Şekil 4.60. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımasının faz diyagramı	139
Şekil 4.61. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımasının XRD grafiği	141
Şekil 4.62. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımasının nanosertlik testi grafiği	143
Şekil 4.63. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği.....	144
Şekil 4.64. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımasının faz diyagramı.....	145
Şekil 4.65. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımasının XRD grafiği.....	147
Şekil 4.66. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımasının nanosertlik testi grafiği.....	149
Şekil 4.67. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımasının sıcaklık-ısı grafiği.....	150
Şekil 4.68. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımasının faz diyagramı.....	151
Şekil 4.69. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımasının XRD grafiği.....	153
Şekil 4.70. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımasının nanosertlik testi grafiği.....	155
Şekil 4.71. Ti-43Al-6Hf-2Nb ve Ti6Al4V alaşımlarının 800 °C'deki oksidasyon kinetiği grafikleri	157

Şekil**Sayfa**

Şekil 4.72. Ti-43Al-6Hf-2Nb ve Ti6Al4V alaşımlarının 800 °C’deki basma test grafiği.....	160
--	-----



RESİMLERİN LİSTESİ

Resim	Sayfa
Resim 2.1. TiAl döküm yapısı a) % 2 Cr b) %6 Cr	12
Resim 2.2. Ti-45Al-8Nb içyapısı	14
Resim 2.3. Ti-46Al-8Nb-xC alaşımları (a) x = 0; (b) x = 0.1; (c) x = 0.7; (d) x = 1.4 ..	15
Resim 2.4. Ti ₄₄ Al ₁₈ B alaşımlarının içyapıları a) % 0.1 B, b) % 0.3 B ve c) % 1.0 B....	16
Resim 2.5. TiAl ₁₅ Si ₁₅ alaşımın içyapısı	17
Resim 2.6. Alaşımların elektron yoğunluğu a) Ti ₃ Al; (b)Ti ₁₁ Al ₄ Zr; (c)Ti ₁₁ Al ₄ Hf; ve (d)Ti ₁₂ Al ₃ Sn.....	19
Resim 2.7. Dövme ve ısıtıl işlem sonrası alaşımların SEM görüntüleri (a,b) Ti-44Al-0.2B, (c,d) Ti-44Al-5Nb-0.2B, (e,f) Ti-44Al-5Zr-0.2B ve (g,h) Ti-44Al-5(Zr + Hf)-0.2B	21
Resim 2.8. TiAl/Ti ₃ Al sisteminin a) x b) y c) z yönlerinde deformasyon koşulları	25
Resim 2.9. VAR metodu şematik gösterimi	27
Resim 2.10. VIM metodu şematik gösterimi	28
Resim 2.11. Presleme metotları şematik gösterimi.....	29
Resim 2.12. Sıcak İzostatik presleme şematik gösterimi.....	29
Resim 2.13. TiAl alaşımına ait a) Katı hal difüzyonu şematik gösterimi, b) içyapı.....	30
Resim 3.1. Kullanılan ham malzemeler	32
Resim 3.2. Örnek CASTEP giriş dosyası	33
Resim 3.3. a) Indutherm MC15+ Vakum indüksiyon Cihazı b) Bakır döküm kalıbı.....	34
Resim 3.4. Bruker Advance 8 kırınım ölçer cihazı.....	35
Resim 3.5. Zeiss EVO 10 taramalı elektron mikroskobu	36
Resim 3.6. Gleeble 3800 termomekanik test cihazı.....	36
Resim 3.7. a) EmcoTest durascan 20 mikrosertlik cihazı b) KLA instruments iMicro nanoindentasyon cihazı.....	37
Resim 3.8. Mettler toledo XS 204 analitik cihazı.....	38
Resim 3.9. Radyografik muayene ekipmanları.....	38

Resim	Sayfa
Resim 3.10. Kül Fırını	39
Resim 4.1. a) $TiAl_2$ Kristal yapısı- Cmmm (65) b) $TiAl_3$ Kristal yapısı- I4/mmm (139).....	45
Resim 4.2 a) $Ti-(51-x)Al-xHf$ ve b) $Ti-(62-x)Al-xHf$ alaşımları kristal yapıları	48
Resim 4.3. $Ti-(51-x)Al-xHf$ alaşımının elastik modüllerinin 3B modellemesi	56
Resim 4.4. $Ti-(62-x)Al-xHf$ alaşımının elastik modüllerinin 3B modellemesi	58
Resim 4.5. a) $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve b) $Ti-(62-x)Al-xZr$ alaşımları kristal yapıları	62
Resim 4.6. $Ti-(51-x)Al-xZr$ alaşımının elastik modüllerinin 3B modellemesi	71
Resim 4.7. $Ti-(51-x)Al-xZr$ alaşımının elastik modüllerinin 3B modellemesi	72
Resim 4.8. Hf ve Nb ilaveli $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ kristal yapısı	77
Resim 4.9. $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının elastik modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri	81
Resim 4.10. Zr ve Nb ilaveli $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ kristal modeli.....	83
Resim 4.11. $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$ alaşımlarının elastik modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri	87
Resim 4.12. $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$ kristal modeli.....	89
Resim 4.13. $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$ alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri	93
Resim 4.14. $Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb$ kristal modeli	94
Resim 4.15. $Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb$ alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri	99
Resim 4.16. $Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb$ kristal modeli	100
Resim 4.17. $Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb$ alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri	104
Resim 4.18. $Ti-56Al-4Zr-2Nb$ alaşımı numunesi	106
Resim 4.19. $Ti-56Al-4Zr-2Nb$ alaşımının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi	109
Resim 4.20. $Ti-56Al-4Hf-2Nb$ alaşımı numunesi.....	112
Resim 4.21. $Ti-56Al-4Hf-2Nb$ alaşımının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi	114

Resim	Sayfa
Resim 4.22. Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının radyografik g�r�nt�leri.....	118
Resim 4.23. Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	120
Resim 4.24. Ti-56Al-5Zr-1Nb alařımı numunesi	123
Resim 4.25. Ti-56Al-5Zr-1Nb alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	125
Resim 4.26. Ti-45Al-6Zr alařımının radyografik g�r�nt�leri	129
Resim 4.27. Ti-45Al-6Zr alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	131
Resim 4.28. Ti-44Al-6Zr-1Nb alařımının radyografik g�r�nt�leri	134
Resim 4.29. Ti-44Al-6Zr-1Nb alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	136
Resim 4.30. Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının radyografik g�r�nt�leri	140
Resim 4.31. Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	142
Resim 4.32. Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının radyografik g�r�nt�leri.....	146
Resim 4.33. Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	148
Resim 4.34. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının radyografik g�r�nt�leri.....	152
Resim 4.35. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının a) İ�yapısı, b) Fazların detaylı g�sterimi, c) EDS analizi	154
Resim 4.36. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımlarının radyografik muayene g�r�nt�leri.....	156
Resim 4.37. a) Oksidasyon testi �ncesi b) Oksidasyon testi sonrası alařımların g�r�nt�leri	158
Resim 4.38. Ti6Al4V alařımının a) Test sonrası y�zey g�r�nt�s� b) Detaylı g�r�n�m c) Kesit alanı	158
Resim 4.39. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının a) Test sonrası y�zey g�r�nt�s� b) Detaylı g�r�n�m c) Kesit alanı	159

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
λ	Dalga Boyu (m)
μm	Mikrometre
$\text{\AA}$	Angstrom
B	Bulk Modülü
C	Elastik sabit
E	Elastisite Modülü
g	gram
G	Kesme Modülü
ΔG	Gibbs Serbest Enerji
H	Sertlik
ΔH	Entalpi
J	Joule
k	Boltzmann sabiti
K	Kelvin cinsinden sıcaklık
m^2	Metrekare
mm	Milimetre
N	Newton
Nb	Niyobiyum
nm	Nanometre
O	Oksijen
S	Entropi
v	Poisson oranı

Kısaltmalar	Açıklamalar
ASTM	Amerikan Test ve Malzeme Topluluğu
BCT	Hacim Merkezli Tetragonal
BSE	Geri Saçılan Elektronlar

Kısaltmalar**Açıklamalar****CALPHAD**

Faz Diyagramı Hesaplama Programı

CASTEP

Cambridge Sıralı Toplam Enerji Paketi

DFT

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

E_{coh}

Kohesif enerji

EDS

Energy Yayılımlı X-Işını Spektroskopisi

GE

General Electric

GGA

Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı

HCP

Altıgen Sıkı Yapı

HMK

Hacim Merkezli Kübik

HV

Vickers Sertlik

IC

İntermetalik Bileşik

keV

Kilo Elektron Volt

MAAT

Uygulamalı Termodinamik Malzeme Yazılımı

SE

İkincil Elektronlar

SEM

Taramalı Elektron Mikroskobu

SiC

Silisyum Karbür

TEM

Geçirimli Elektron Mikroskobu

XRD

X Işını Kırınımı

YMK

Yüzey Merkezli Kübik

1. GİRİŞ

Gelişmiş tasarım yöntemleri malzemelerin daha yüksek servis sıcaklıklarına, daha hafif ağırlığa ve daha dayanıklı olması üzerine kurulmuştur. Günümüzde kullanımda olan geleneksel metalik malzemeler özellikle son 50 yılda geliştirilmiştir. Ancak, malzeme özelliklerinin artırılmasına olan talep sürekli artmaktadır. Daha fazla gelişim sağlanması için yeni malzeme sınıflarının araştırılması kaçınılmaz olmaktadır. Yeni bir malzemenin endüstriyel uygulaması, geliştirilmiş performans ve olası yeniliklerin yanı sıra bileşenlerin üretimi için uygun metotlara da bağlıdır. Bu gereksinimler dünya çapında alaşım tasarımı, karakterizasyonu ve işlenmesi dahil birçok araştırmaların başlamasına yol açmıştır.

İntermetalik bileşikler, iki veya daha fazla metalik elementin oluşturduğu metalik malzemeler olarak kabul edilmektedir. İntermetalik bileşiklerde bulunan metalik ve kovalent bağlar bu malzemelerin düşük yoğunluk, yüksek elastik modülü ve korozyon direnci gibi özelliklere sahip olmasını sağlamaktadır. İntermetalik bileşiklerle ilgili ilk çalışmalar geçen yüzyılın başlarında Au-Cu alaşımları üzerine olmuştur [1]. 1950'li yıllarda, intermetalik malzemeler hakkındaki bilimsel araştırmalarda önemli bir artış olmasına rağmen, bu tür bileşiklerdeki süneklik problemi dolayısıyla 1980'lerde Aoki ve Izumi'nin [2] bulgularına kadar geçen sürede önemli bir gelişme olmamıştır. Ancak, uzun yıllardır süper alaşımların yerine geçebilecek [3] ve yüksek sıcaklıklarda sünek ve yüksek mukavemet gösterecek alaşım elde etme çalışmaları ilgiyi tekrar intermetalik malzemelerin üzerine çekmiştir.

Al içeren intermetalikler (örneğin, Fe-Al, Ti-Al, Ni-Al, Cu-Al ve Nb-Al) en çok araştırılan malzemeler arasındadır [4,5]. Ti-Al esaslı alaşımlar yüksek özgül dayanımları, yüksek ergime sıcaklıkları, oksidasyon dirençleri ve düşük yoğunlukları ile dikkat çekmektedir. Havacılık ve otomotiv endüstrisi için umut vaat eden malzemeler olarak kabul edilmektedir. Bununla birlikte, oda sıcaklığında düşük süneklik, bu alaşımların geniş çapta uygulanmasını engellemektedir [6–10]. Bu nedenle, makro alaşımlama, mikro alaşımlama ve uygun ısıtma işlemleri yoluyla oda sıcaklığındaki yetersiz mekanik özellikleri iyileştirmek için son zamanlarda birçok çalışma yapılmaktadır [11]. Dolayısıyla, Ti-Al bazlı alaşım tasarımları günümüzde ilgi çekici konulardan biri olmaya devam etmektedir.

Al açısından zengin TiAl sisteminin karmaşıklığı, denge mikro yapılarının oluşumunu engelleyen ve alaşımın gevrekleşmesine yol açan yarı kararlı fazların oluşumu ile

artmaktadır. Bununla beraber, ayarlanan mikro yapı büyük ölçüde önceki ısı işlemlere ve işleme tekniğine bağlıdır.

İkili sistemdeki faz dengesi kapsamlı bir şekilde araştırılmış olmasına rağmen, ilave alaşım elementlerinin alüminyumca zengin bileşiklere olan etkileri hakkında yeterli sayıda çalışma bulunmamaktadır. Bu nedenle, ek alaşım elementlerinin istenmeyen, kırılğan yarı kararlı fazların oluşumunu engelleyip engellemeyeceği ve bir denge durumunda görülen katmanlı bir mikro yapıyı oluşturup oluşturmayacağı hakkında çalışma yapılması gerekmektedir. Daha iyi mekanik özelliklere sahip, Ti-Al yüksek Al içerikli alaşımlarının elde edilmesi, halen günümüzde cevap bekleyen bir konu olmakta olup, $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ intermetalikleri için uygun alaşım elementlerini belirlenmesi gerekmektedir.

Bu tez çalışmasının iki ana amacı bulunmaktadır. Birincisi, alüminyumca zengin $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ fazlarının teorik olarak çalışılması ve alaşım elementlerinin bu intermetaliklere eklendiğinde yapısal ve mekanik özelliklerinin incelenmesi, ikincisi de yüksek sıcaklıklarda mekanik özellikleri ve yüksek sıcaklık oksidasyon direnci geliştirilmiş alüminyumca zengin özgün bir alaşım elde etmektir. Bu kapsamda, öncelikle Hf ve Zr eklenerek üçlü alaşımlar incelenmiştir. Daha sonra Nb elementinin eklenmesi ile yapısal ve mekanik olarak kararlı dörtlü alaşımlar oluşturularak, alaşımın havacılık endüstrinde sıklıkla kullanılan $Ti6Al4V$ alaşımına göre daha hafif ve yüksek sıcaklık özelliklerinin daha da geliştirilmesi hedeflenmiştir.

Tez, $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ bazlı alaşımların tasarımını, üretimini ve karakterizasyonunu içermektedir. Bu tür alaşımlarda kullanılacak uygun elementlerin tasarımı ve seçimi ilk prensipler ilkesi ile hesaplanmıştır. Seçilen kompozisyonların termodinamik olarak kararlılığı ve faz diyagramlarını incelemek amacıyla Thermo-Calc yazılımı ile termodinamik analizler yapılmıştır. Daha sonra seçilen alaşım konfigürasyonları vakum indüksiyon ergitme yöntemiyle ergitilip bakır kalıba dökülmüştür. Elde edilen alaşımlar, elektron mikroskobu (SEM) X-ışını kırınımı (XRD) ve radyografik muayene ile yapısal olarak detaylı olarak incelenmiştir. Ayrıca, sertlik ve nanoindentasyon metotlarıyla mekanik özellikleri incelenmiş ve teorik olarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. En iyi yapısal özelliklere sahip alaşımın üretilebilirliğini anlamak amacıyla yeni dökümler yapılmış ve elde edilen alaşımların yüksek sıcaklık performans testleri yapılmıştır.

Bu tez çalışmasının birinci bölümünde genel bilgiler verilmektedir. İkinci bölümünde ise literatürde bu konu hakkında yapılan çalışmalara değinilmiş ve tez kapsamı belirlenmiştir. Üçüncü bölüm olan malzeme ve metot kısmında alaşımların simülasyon ve üretim metotları, kullanılan malzemeler ve yapılan karakterizasyon aşamalarından bahsedilmiştir. Dördüncü bölüm olan bulgular ve tartışma kısmının ilk bölümünde ilk prensipler ilkesi ile yapılan çalışmalara yer verilirken, ikinci kısmında Thermo-Calc analizleri ile üretilen alaşımların yapısal ve mekanik özelliklerinden bahsedilmiştir. Dördüncü bölümün son kısmında ise yüksek sıcaklık performans testleri karşılaştırılmalı olarak verilmiştir. Son bölümde ise tezin sonuçları ile bu tezle ilgili gelecek önerilerine yer verilmiştir.



2. KURAMSAL TEMELLER

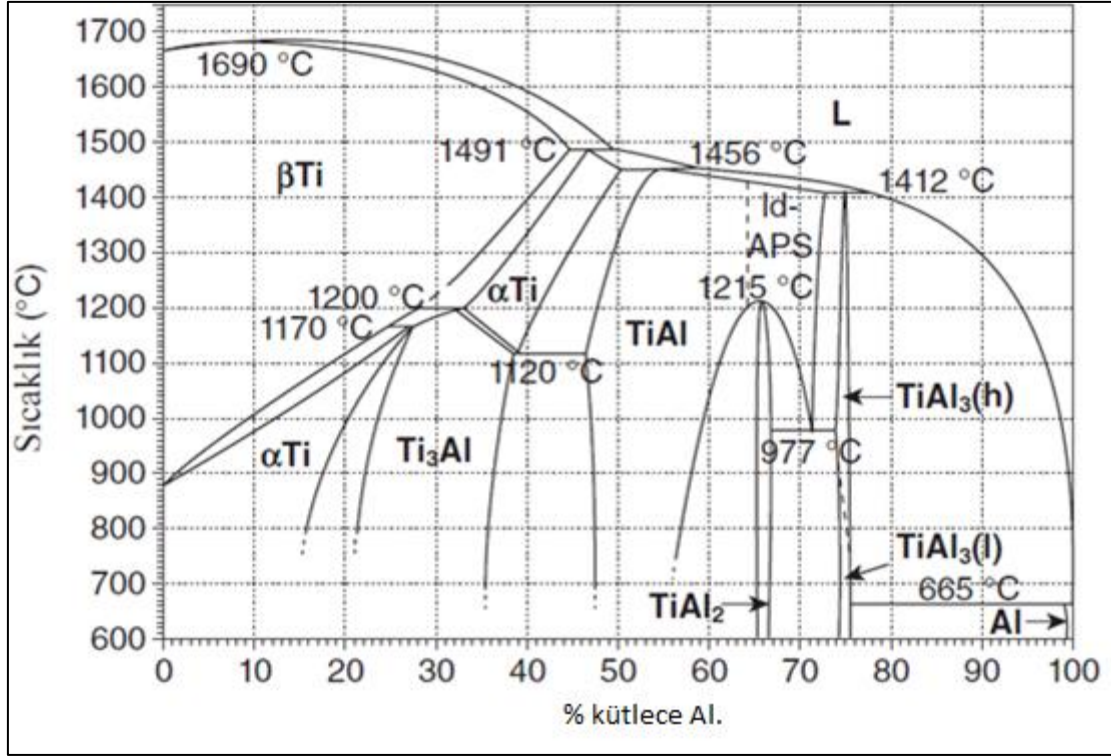
2.1. Titanyum Aluminatlar

TiAl alaşımlarının üniversiteler, kamu tarafından finanse edilen kuruluşlar, endüstriyel imalatçılar ve son ürün kullanıcıları dahil olmak üzere birçok sektör tarafından bu kadar çok ilgi çekmeye devam etmesinin nedeni, yüksek mekanik özelliklere sahip olmasıdır. Ayrıca, bu alaşımların yüksek sıcaklık özellikleri araştırmalarda önemli yer tutmaktadır.

Dimiduk [12] gama TiAl üzerinde yaptığı çalışmada diğer havacılık yapısal malzemeleriyle birlikte değerlendirdiğinde bu alaşımların aşağıdaki özelliklerinden dolayı gelecekte yaygın kullanım alanı bulacağından bahsetmiştir. Bu özellikler:

- Yüksek erime noktası
- Düşük yoğunluk
- Yüksek yapısal kararlılık
- Oksidasyon ve korozyon direnci
- Yüksek özgül dayanım
- Konvansiyonel titanyum alaşımlara göre yüksek parlama noktası

Ti-Al fazlarının araştırılması 1920'li yıllara kadar dayanmaktadır [13]. Ti-Al faz diyagramındaki tüm konsantrasyon aralığını kapsayan ilk faz diyagramları ise 1950'lerde yayınlanmıştır [14,15]. İkili faz diyagramının ilk kritik ve kapsamlı değerlendirmesi Murray [16] tarafından yayınlanmış ve standart bir referans olarak kabul edilmiştir. Bununla beraber bu faz diyagramında uzun yıllardır ağırlıkça hafif olan yüksek sıcaklık malzemeleri için aday kabul edilen intermetalik fazlar içermiştir. Bu tarihten itibaren, altıgen D019 yapılı α_2 (Ti₃Al) fazına veya dörtgen L1₀ yapılı γ (TiAl) fazına dayalı alaşımlar yapısal malzeme olarak ortaya çıkmıştır. Yoğun araştırmalara rağmen, ikili Ti-Al faz diyagramı hala bir tartışma konusu olmaya devam etmektedir ve bu nedenle son yıllarda deneysel çalışmaların ve kritik değerlendirmelerin konusu olmuştur [17,18]. Yayınlanan deneysel veriler Schuster ve Palm [19] tarafından yapılan kapsamlı bir çalışmada yeniden değerlendirilmiş ve şu anki durumunu almıştır. Şekil 1'de verilen faz diyagramında yarı kararlı fazlara yer verilmemiştir.



Şekil 2.1. Ti-Al faz diyagramı [19]

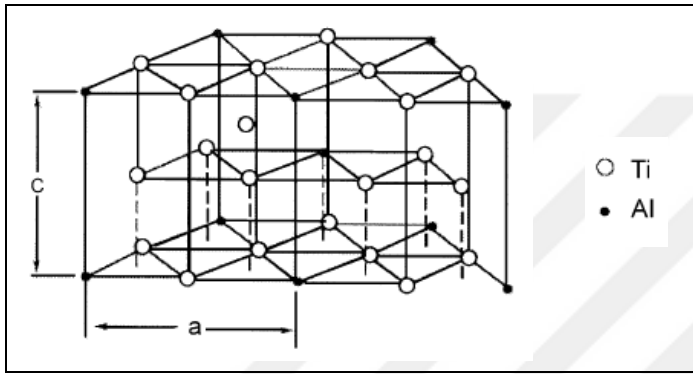
Ti-Al faz diyagramında Ti, β-Ti, Ti₃Al, TiAl, TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarına yer verilmiştir. Çizelge 2.1’de Ti-Al faz diyagramında yer alan fazlara ait fiziksel özellikler verilmiştir.

Çizelge 2.1. TiAl alaşımları [20]

Faz	Pearson Sembolü	Uzay Grubu	Strukturbericht gösterimi	Kafes parametreleri
Al	cF4	fm-3m(225)	A1	$a = 4.0496 \text{ nm}$
β	cI2	Im3m(229)	A2	$a = 0.33065 \text{ nm}$
α	hP2	P6 ₃ /mmc(194)	A3	$a = 0.29504 \text{ nm}$ $c = 0.46833 \text{ nm}$
Ti ₃ Al	hP8	P6 ₃ /mmc(194)	D0 ₁₉	$a = 0.5765 \text{ nm}$ $c = 0.4625 \text{ nm}$
γ (TiAl)	tP4	P4/mmm(123)	L1 ₀	$a = 0.3997 \text{ nm}$ $c = 0.4062 \text{ nm}$
TiAl ₂	tI24	Cmmm(65)		$a = 0.3971 \text{ nm}$ $c/6 = 0.4052 \text{ nm}$
TiAl ₃	tI8	I4/mmm(139)	D0 ₂₂	$a = 0.3849 \text{ nm}$ $c/2 = 0.4305 \text{ nm}$

2.1.1. Ti₃Al

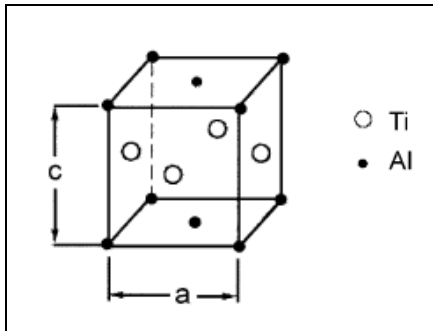
Ti₃Al, beta Cu₃Ti benzeri bir yapıya sahiptir ve altıgen P6₃/mmc uzay grubunda (Şekil 2.2) kristalleşir. 2.81–2.93 Å arasında değişen bir Ti-Ti bağ mesafeleri yayılımı, iki kısa (2.83 Å) ve iki daha uzun (2.87 Å) Ti-Al bağ uzunluğu vardır. Kafes parametreleri $a = 0.5765$ nm, $c = 0.4625$ nm olan kristalin açıları ise $\alpha=\beta=90^\circ$ ve $\gamma=120^\circ$ olup, kafes birim hacmi 132.48 Å³'tür. Al elementi için wyckoff pozisyonları 2c (1/3,2/3,1/4), Ti elementi içinse 6h (0.829903, 0.659806, 1/4)'tür.



Şekil 2.2. Ti₃Al kristal yapısı [21]

2.1.2. TiAl

TiAl (γ TiAl), Au₃Cu yapılı olup tetragonal P4/mmm uzay grubunda (Şekil 2.3) kristalleşir. Ti – Ti bağ uzunlukları 2.81 Å iken Ti-Al bağ uzunlukları 2.84 Å'dur. Kafes parametreleri $a = 0.3997$ nm $c = 0.4062$ nm kristalin açıları ise $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 'dir.

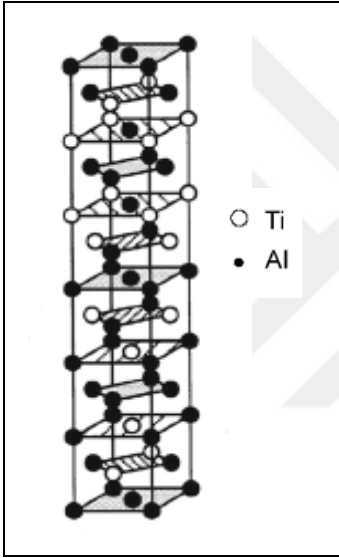


Şekil 2.3. TiAl kristal yapısı [21]

Kafes birim hacmi ise 32.13 Å³'tür. Al elementi için wyckoff pozisyonları 1a (0,0,0), Ti elementi içinse 1d (1/2,1/2,1/2)'dir.

2.1.3. TiAl_2

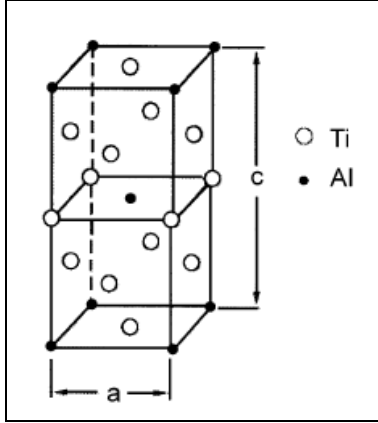
TiAl_2 , beta Cu_3Ti benzeri bir yapıya sahiptir ve ortorombik Cmmm (Şekil 2.4) uzay grubunda kristalleşir. Her iki Ti – Ti bağ uzunluğu da 2.98 Å'dur. 2.72–2.87 Å arasında değişen bir Ti-Al bağ mesafeleri yayılımı vardır. Dört kısa (2.79 Å) ve dört daha uzun (2.88 Å) Al-Al bağ uzunluğu vardır. Tüm Al-Al bağ uzunluğu 2.86 Å'dur. Kafes parametreleri $a = 0.3971 \text{ nm}$ $c/6 = 0.4052 \text{ nm}$ kristalin açıları ise $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 'dir. Kafes birim hacmi ise 188.38 Å^3 'tür. Al elementi için wyckoff pozisyonları 2b (0,1/2,0) ve 2d (1/2,1/2,1/2), Ti elementi içinse 4j (0,0,156656,0; 0,0,32765,1/2)'dir.



Şekil 2.4. TiAl_2 kristal yapısı [22]

2.1.4. TiAl_3

TiAl_3 , beta Cu_3Ti benzeri bir yapıya sahiptir ve tetragonal $I4/mmm$ uzay grubunda (Şekil 2.5) kristalleşir. Dört kısa (2.70 Å) ve sekiz daha uzun (2.87 Å) Ti-Al bağ uzunluğu vardır. Tüm Al-Al bağ uzunluğu 2.87 Å'dur. Kafes parametreleri $a = 0.3849 \text{ nm}$ $c/2 = 0.4305 \text{ nm}$, kristalin açıları ise $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 'dir. Kafes birim hacmi ise 125.08 Å^3 'tür. Al elementi için wyckoff pozisyonları 2a (0,0,0) ve 2b (1/2,1/2,0)), Ti elementi içinse 4d (1/2,0,3/4)'dir.



Şekil 2.5. TiAl_3 kristal yapısı [21]

2.2. Ti-Al İntermetaliklerine Alaşım Elementlerinin Etkileri

İntermetalik yapıları oluşturan atomlar birbirine göre düzenli bir periyodik düzenlemeye sahipse, bu alaşımlar sıralı alaşım olarak bilinir. Bu düzen bir kafes içinde atomlar arası mesafelere göre büyük mesafelerde kalıyorsa bu düzen uzun sıralı düzen (LRO) olarak adlandırılır. Titanyum alüminatlar da diğer intermetalikler gibi uzun sıralı düzene sahip olduğu için oda sıcaklığı sünekliği ve toklukları düşüktür. Ayrıca, yorulma çatlak büyümeleri de önemli bir problem teşkil etmektedir [23,24]. Buna rağmen, üretim teknolojilerindeki gelişmeler, titanyum alüminatların mikro yapısının anlaşılması, deformasyon- mekanizmaları ve mikro alaşımlamadaki gelişmeler, titanyum alüminatların yüksek performansta ilk ticari kullanımlarını beraberinde getirmiştir [25,26].

Alaşımların tasarlanmasında hem ikili hem de çok bileşenli sistemlerde faz dönüşümündeki ilişkiler oldukça önemli bir rol oynamaktadır. Bunun nedeni, verilen bir alaşım için istenen özelliklerin mikro yapıya, mikro yapının ise alaşıma bağlı olmasıdır. Endüstriyel olarak alaşım üretme konusundaki belki de en zorlayıcı unsur mikro yapı ve bileşim hassasiyetidir.

Yukarıdaki durumlar göz önüne alındığında alaşım tasarımı, araştırmalar için kilit rol oynadığı görülmektedir. Alaşım tasarımının başlangıcı ise ikili alaşımlar ile başlayıp istenen özellikler elde edilene kadar element ilave edilmesiyle devam etmektedir.

Bir tür yüksek sıcaklık alaşımı olan γ -TiAl ile ilgili araştırmalar 1950'li yıllara kadar uzanmaktadır ve bugüne kadar yaklaşık 70 yıldır geliştirilmiştir. Belirli alaşım bileşimine ve

geliştirme sürelerine bağlı olarak, γ -TiAl bazlı alaşımlar 1., 2. ve 3. nesil olarak sınıflandırılabilir [27] :

Birinci nesilde (1970'lerin ortalarından 1980'lerin ortalarına kadar) geliştirilen γ -TiAl alaşımları ilk nesil olarak kabul edilebilir ve gösterimi aşağıdaki şekildedir:

Ti-48Al-1V-(ağırlıkça % 0.1) C.

İkinci nesil (1980'lerin ortalarından 1990'ların ortalarına kadar), γ -TiAl alaşımının araştırma ve geliştirme dönemi olarak kabul edilebilir. İkinci nesil γ -TiAl bazlı alaşımların bileşimi şu şekilde özetlenebilir:

Ti-(45–48) Al-(1–3) X-(2–5) Y-(< 1) Z

X = Cr, Mn, V; Y = Nb, Ta, W, Mo; Z = Si, B, C.

Üçüncü nesil (1990'ların ortasından günümüze kadar), araştırmanın daha çok düşük basınçlı türbin kanatları, otomotiv şarj çarkları ve egzoz valfleri gibi belirli uygulamalar için bileşim ve işlemeye odaklandığı aşamadır. Üçüncü nesil alaşımların büyük bir kısmı için yapı şu şekilde yazılabilir:

Ti-(42–48) Al-(0–10) X-(0–3) Y-(0–1) Z-(0–0.5) RE

X = Cr, Mn, Nb, Ta; Y = Mo, W, Hf, Zr; Z = C, B, Si. RE (nadir toprak elementleri)

Bu alaşım elementleri Ti-Al ikili faz diyagramındaki faz sınırlarını etkilemektedir [28–30]. X ile gösterilen elementler, genellikle Ti-Al alaşımlarının süneklik değerini arttıran elementlerdir. Bu elementler, istifleme hatası enerjisini düşürüp, eşleştirme eğilimini arttırır. Genellikle Cr, Mn ve V gibi elementler bu kategoriye girmektedir [31].

Nb, Ta, W ve Mo gibi Y ile gösterilen elementler Ti-Al alaşımlarının yüksek sıcaklıklarda oksidasyon ve sürünme direncini iyileştirmektedir [32].

Z alaşım elementleri genellikle B veya C'dir. Bu elementlerin öncelikle kullanım amacı katmanlı üretmek için bir tane inceltici olarak kullanılır. B elementi TiAl fazlarında

çözünmediği için tane büyümesine engel olmaktadır. C ilavesi ise Ti_3AlC perovskit çökeltileri nedeniyle TiAl alaşımlarının mukavemetini arttırmaktadır [33]. Çizelge 2.2’de yukarıda bahsedilen elementlerin Ti-Al alaşımları üzerindeki etkileri verilmiştir.

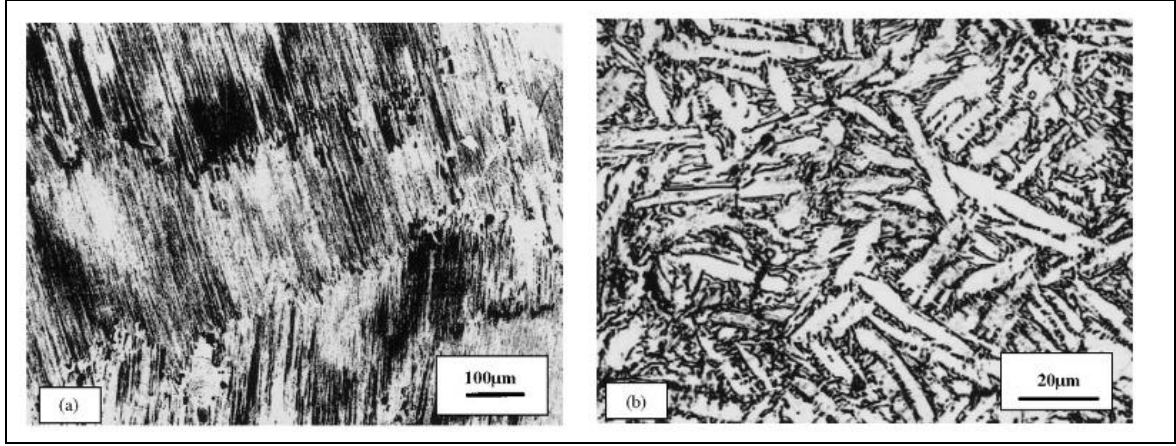
Çizelge 2.2. Başlıca alaşım elementlerinin Ti-Al alaşımlarına olan etkisi [34]

Element	Özellik
Nb	Oksidasyon dayanımını ve sürünme direncini artırır
Ta	Oksidasyon dayanımını artırır, ısı gerilme çatlaklarını engellemeye yardımcı olur
V	Sünekliği artırır
W	Oksidasyon dayanımını ve sürünme direncini artırır
B	Tane küçültücü etki gösterir
C	Mukavemeti artırır ve tane küçültücü etki gösterir
Cr	Sünekliği ve oksidasyon direncini artırır
Mn	Sünekliği artırır
Mo	Oksidasyon dayanımını, sürünme direncini ve mekanik dayanımı artırır

2.2.1. Cr, Mn ve V

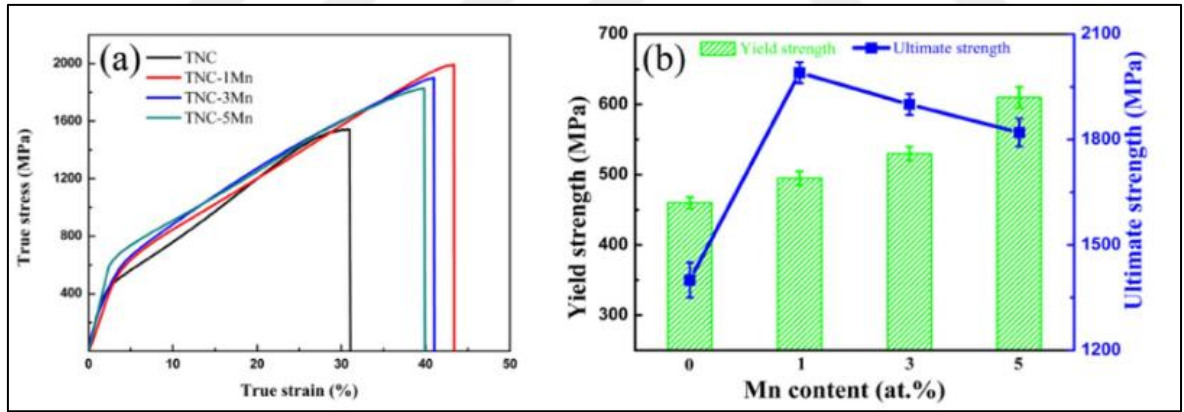
Ti-Al alaşımlarında sıklıkla kullanılan Cr, Mn ve V elementlerinin termomekanik işlemlerle birlikte özellikle γ -TiAl alaşımlarında sünekliği %3 oranında arttırdığı gözlenmiştir [35–37] .

TiAl-Nb alaşımına Cr eklenmesiyle yapılan çalışmada Cr içeriği %3'e kadar olduğunda alaşımların sertliğinin azaldığı ve eğme mukavemetinin % 16 oranında arttığı ve alaşımların daha yüksek tokluğa sahip olduğu gözlenmiştir [38]. Wang ve diğerleri [39] yaptığı çalışmada % 2 ve % 6 Cr içeren alaşımların mikroyapısal özellikleri incelenmiştir. Elde edilen bulgulara göre %2 Cr içeren TiAl alaşımı α katılaşması özellikleri göstermiş ve nihai mikroyapı kaba taneli olarak gözlenmiştir. Öte yandan, % 6 Cr içeren alaşım ise β katılaşma özelliğini göstermiş ve Resim 2.1’den görüleceği üzere mikroyapı daha ince taneli yapıda elde edilmiştir.



Resim 2.1. TiAl döküm yapısı a) % 2 Cr b) %6 Cr [39]

Ti-47Al-2Nb-2Cr-(0, 1, 3, 5) Mn alaşımları ile yapılan çalışmada [40], Mn atomlarının TiAl alaşımı içinde çözöldüğü gözlenmiştir. Mn ilavesi B2 fazının hacim oranında arttırdığından TiAl alaşımının akma dayanımı, çözünen Mn atomlarının içeriği arttıkça artmıştır. Ayrıca Şekil 2.6'da verildiği üzere alaşım %1 Mn içerdiğinde süneklikte önemli derecede artış gözlenmiştir.

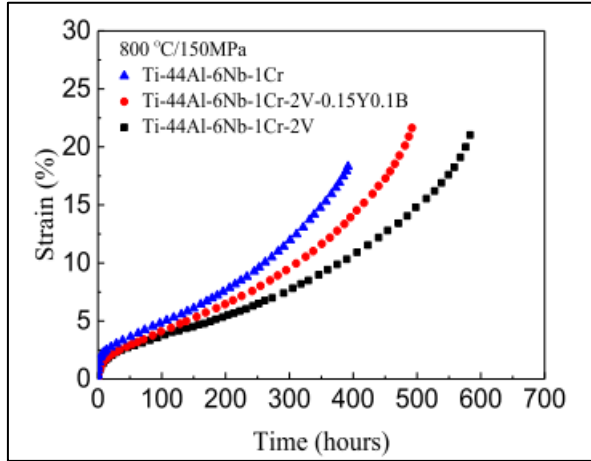


Şekil 2.6. Mn elementinin Ti-47Al-2Nb-2Cr alaşımına olan mekanik etkisi [40]

Ti-44Al-7Nb alaşımı ile yapılan çalışmada %2 Mn eklenmesi ile alaşımda katmanlı yapının gelişimini etkilediği bulunmuştur. Fırında soğutma prosesi ile, Mn içermeyen alaşımda ince taneli katmanlı yapı elde edilirken, Mn içeren alaşımda dubleks bir yapı oluşturduğu gözlenmiş ve sünekliğin geliştirildiği gözlenmiştir [41] .

Soğuk potada yönlü katılaştırma yöntemi kullanılarak üretilen Ti46Al7Nb0.4W0.6Cr alaşımının mikro yapısı ve yüksek sıcaklıkta çekme performansı üzerindeki V ilavesinin araştırıldığı çalışmada, V ilavesinin sütunlu tane genişliğini iyileştirildiğini ve TiAl

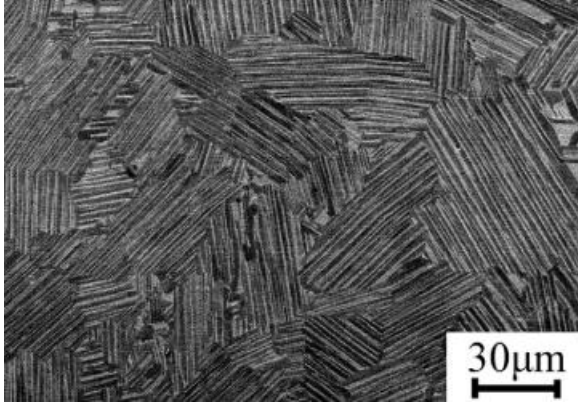
alaşımının kırılardan sünek geçişine katkıda bulunduğunu görülmüştür. Ayrıca, %2 V ilavesinden sonra, nihai gerilme mukavemeti ve uzamasında 973–1173 K'de artış gözlenmiştir [42]. Ayrıca, Ti-44Al-6Nb-1Cr alaşımına %2 V eklenmesi sonucunda sürünme mukavemetinde (Şekil 2.7) önemli bir artış görülmüştür [43].



Şekil 2.7. Ti-44Al-6Nb-1Cr alaşımının V katkısı sonucu sürünme grafikleri [43]

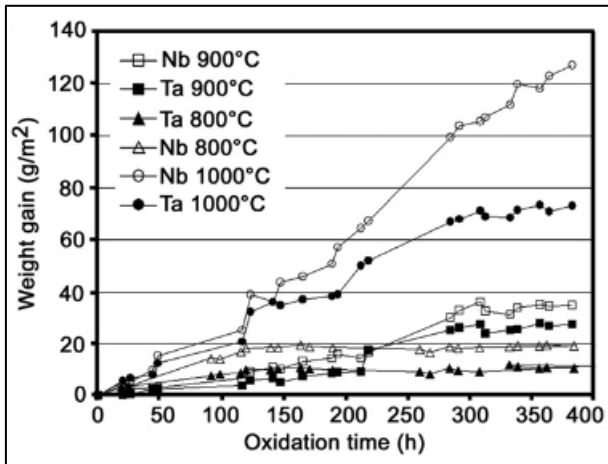
2.2.2. Nb, Mo, Ta ve W

Refrakter elementler, ısı ve aşınmaya karşı üstün direnç gösteren malzemelerdir. Ti-Al alaşımlarında özellikle yüksek sıcaklık özellikleri geliştirebilmek adına refrakter elementler olan niyobyum, molibdenim, tantalim ve tungsten alaşımlama çalışmalarında sıklıkla kullanılmaktadır [44,45]. Bu elementler arasında şüphesiz en popüler olan Ti-48Al-2Nb-2Cr alaşımında %2 oranında kullanılan Nb elementidir. Bu elementler, döküm malzeme içinde büyük ölçüde ayrışmasına ve toplam yoğunluğun artmasına yol açmasına rağmen, bu tür eklemelerin özellikler üzerindeki potansiyel avantajları, özellikle de yüksek sıcaklıklar, kullanımlarının artmasına neden olmuştur [46]. Resim 2.2'de verildiği üzere Ti-45Al-8Nb alaşımı ile yapılan çalışmada alaşımın mikro yapısında katmanlı yapı gözlenmiştir [47]. Ayrıca, yapılan mekanik testlerde alaşımın sünekliliğin ve mukavemetinin geliştirildiği anlaşılmıştır.



Resim 2.2. Ti-45Al-8Nb içyapısı [47]

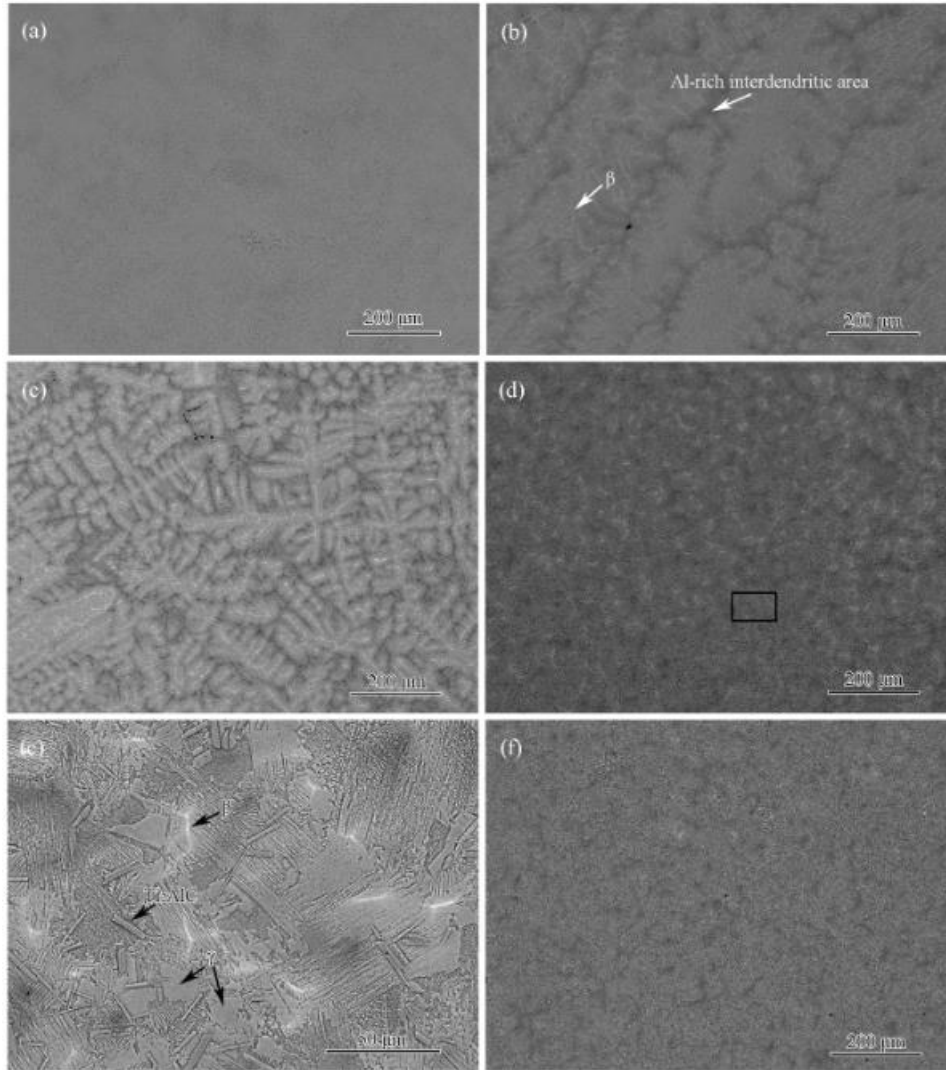
Ti-48Al, Ti-48Al-2Nb, Ti-48Al-2Nb-0.7Cr ve Ti-48Al-2Nb-0.7Cr-0.3Si alaşımlarında daha önce yapılan çalışmada Ti-48Al-2Nb alaşımının en yüksek mekanik ve oksidasyon direncine sahip olduğu görülmüştür. Ayrıca, Nb eklenmesiyle Ti-48Al-2Nb alaşımında β faz bölgesinde α_2/γ katmanlı yapı oluştuğu ve tane büyüklüğünün azaldığı diğer bulgular arasındadır [48]. Ti-45.2Al-7.2Nb ve Ti-44.8Al-6.6Ta alaşımlarının 800-1000 °C arasında oksidasyon dirençleri ölçüldüğünde, Ta elementinin daha iyi oksidasyon direnci gösterdiği görülmüştür [49]. Şekil 2.8'den görüleceği üzere en düşük kütle kazanımı 800 °C'de Ta katkılı TiAl alaşımında olurken, en yüksek kütle kazanımı 1000 °C'de Nb katkılı TiAl alaşımında gerçekleşmiştir.



Şekil 2.8. TiAl-Nb ve TiAl-Nb-Ta alaşımlarının oksidasyon grafiği [49]

2.2.3. B, C ve Si

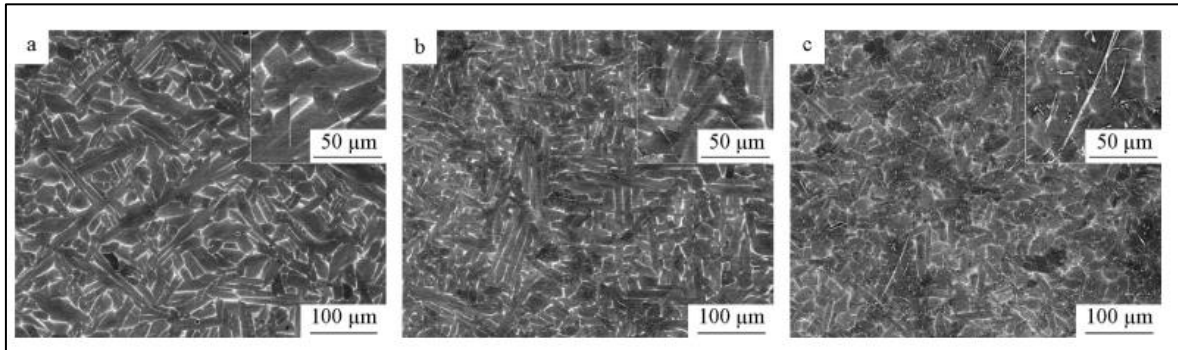
Arayer elementlerinden olan B, C ve Si elementleri özellikle tane küçültücü etkilerinden dolayı γ -TiAl alaşımlarında alaşımlandırma elementi olarak kullanılmaktadır [44,50,51]. C elementinin TNM [52] alaşımına eklenmesi ile yapılan çalışmada [53] yüksek sıcaklık mukavemetinin arttığı gözlenmiştir. Mikroyapı incelemesinde Ti_2AlC karbürünün olduğu ve bundan kaynaklı ikinci faz sertleşmesi meydana geldiği belirtilmiştir. Yapılan başka bir deneysel çalışmada [54], karbon eklenmesi ile katılaşma davranışının β fazı yoluyla katılaşmanın peritektik katılaşmaya döndüğünü göstermiştir. Katı çözültideki karbon ise α_2 fazında çökelmiş ve mikrosertliği artırır. Karbon içeriği %1.4'e yükseldiğinde plaka şeklindeki karbürler (Resim 2.3) Ti_2AlC TiAl matrisinden çökelmiştir.



Resim 2.3. Ti-46Al-8Nb-xC alaşımları (a) $x = 0$; (b) $x = 0.1$; (c) $x = 0.7$; (d) $x = 1.4$ [54]

İncelenen TiAl alaşımlarının çoğunda, birincil katılaşma fazı, sonrasında ne olursa olsun β fazıdır. $L + \beta$ fazı aralığı ise Al ve diğer alaşım elementleri ile değişmektedir. Okamoto'ya göre [55] Ti–Al faz diyagramında maksimum $L + \beta$ fazı aralığı 50° olarak Ti-44.8 bileşiminde gözlenmiştir. TiAl alaşımlarına bor ilavesi katılaşma aralığını azaltmaktadır. % 1 oranında B içeren bazı alaşımların B içermeyen muadillerine kıyasla dökülebilirliğinin olması da bu durumu desteklemektedir [56]. B elementi ayrıca tane küçültücü etki gösterdiğinden dolayı TiAl alaşımlarında vazgeçilmez elementlerden birisi olmuştur [57,58].

%0.1, %0.3 ve %1.0 B eklenmiş Ti44Al8Nb alaşımlarının içyapıları Resim 2.4'te verilmiştir [59]. Beyaz renkli çözeltiler tipik borür morfolojisi göstermektedir. B oranı % 0.1'den % 0.3'e doğru arttığında α çıtalarının boyunda ve genişliğinde düşüşler gözlenmiştir. Bu durum B artışıyla her zaman katmanlı koloni yapısına geçilmediğini kanıtlar niteliktedir. Ayrıca, borid çökeltilerinin morfolojisinde belirgin farklılıklar görülmüştür. %0.1 B alaşımında borür çökeltileri ince ve düz, uzunluğu yaklaşık $30 \mu\text{m}$ ' dir. Bu tipik katı çökeltme özelliği, yani borid çökeltileri β matrisi içinde olmaktadır. %0.3 B alaşımında, bazı ince, kıvrımlı borid çökeltileri sıklıkla dendrit aralarında görülmüştür.

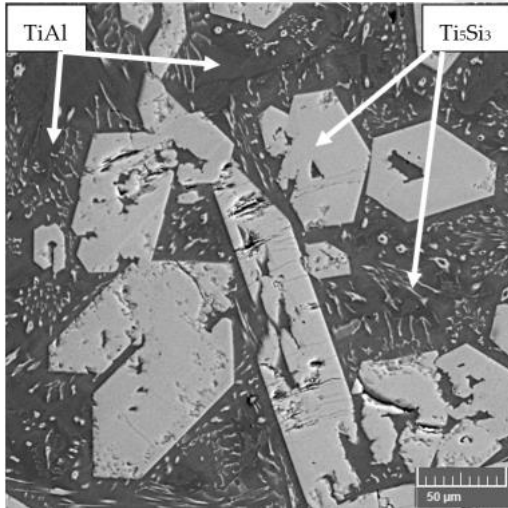


Resim 2.4. Ti44Al8B alaşımlarının içyapıları a) % 0.1 B, b) % 0.3 B ve c) % 1.0 B [59]

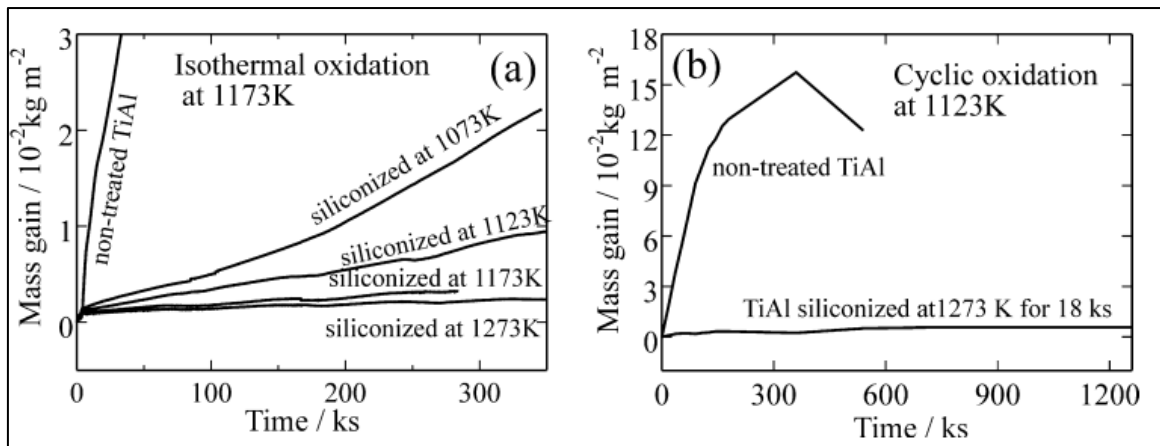
B elementi ayrıca, dövme TiAl alaşımlarında yıllardır termal veya termomekanik işleme yeteneğini geliştirmek kullanılmaktadır. B ilavesi olmayan alaşımlar genellikle kaba sütunlu yapılara sahip olduğundan dövme esnasında yüzey çatlamları olmaktadır. Ancak, B ilaveli alaşımlarda bu durum gözlenmemektedir, dolayısıyla termomekanik işlemlere tabi tutulacak alaşımlarda B kullanılması önem kazanmıştır [60]. Bu durum ısıtım işlem prosesine girecek γ -TiAl alaşımı için de yararlı olmuştur [61].

TiAl alaşımlarına Si eklenmesi, TiAl alaşımlarının yüzeyinde oluşan titanyum dioksit partiküllerinin incilmesi nedeniyle sürünme direncini ve oksidasyon direncini geliştirmektedir [62,63]. Bununla beraber silisyum, TiAl alaşımlarında çok az çözünür ve bu nedenle yapısında sert ve kırılgan Ti_5Si_3 (Resim 2.5) oluşturur [64,65].

Ayrıca, Si elementinin oksidasyon direnci üzerindeki etkilerini anlamak amacıyla yapılan çalışmada [66] 1173 K üzerinde silikonize edilmiş TiAl alaşımının havada veya simüle edilmiş egzoz gazında iyi bir izotermal ve döngüsel oksidasyon direnci gösterdiği belirtilmiştir (Şekil 2.9). Uzun süreli oksidasyondan sonra bile oksit ölçeğinde yüksek konsantrasyonlarda Si ve Al varlığı görünen çalışmada, Al_2O_3 ile Ti_5Si_3 fazlarının oksidasyon direncindeki önemli artıştan sorumlu olduğu düşünülmüştür.



Resim 2.5. TiAl15Si15 alaşımın içyapısı [65]



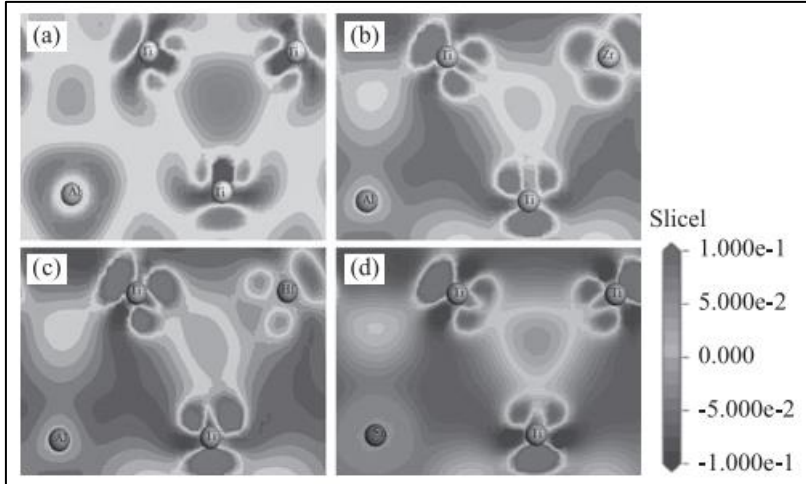
Şekil 2.9. Silisyum içeren ve içermeyen TiAl alaşımlarının a) havada izotermal oksidasyonu ve (b) simüle edilmiş bir gazda çevrimsel oksidasyonu [66]

2.2.4. Hf ve Zr

Bu tezde de alařım elementi olarak alıřılan, Hf ve Zr gibi alařım elementlerinin, TiAl alařımlarına etkileri eřitli deneysel alıřmalarla incelenmesine raėmen [42,67–70], alařımın ticari kullanımları henüz mevcut deėildir.

Hf ve Zr elementlerin her ikisi de periyodik tablonun Ti ile aynı ana grubuna (IVB) aittir, bu nedenle Ti, Zr ve Hf benzer kimyasal özelliklere sahiptir ve karıřabilen katı özelti oluşturabilirler. Bu durum alařım tasarımı iin önemlidir, ünkü Zr ve Hf, γ -TiAl bazlı alařımlarda yalnızca veya tercihen Ti blgelerinde ayrıřan elementlerdir [71]. Titanyum alařımlarından [72] bilindiėi gibi, Zr ve Hf'nin ntre yakın veya zayıf β dengeleyici elementler olduėu deėerlendirilmektedir. Zr ve Hf, Ti ile neredeyse aynı atomik yarıapa sahip olan Nb'nin aksine, Ti'den (0,145 nm) nemli lde daha byk atomik yarıaplara (sırasıyla 0,160 ve 0,159 nm) sahiptir. Neumeier ve diėerleri ayrıca Zr'un γ/α_2 kafes uyumsuzluėunu azalttıėını gstermiřtir [73].

Hf ve Zr elementlerinin Ti₃Al alařımında zerindeki yapısal ve mekanik etkileri Zhang tarafından ilk prensipler ilkesi ile incelenmiřtir [74]. Alařımların baė yapıları incelendiėinde (Resim 2.6), baė atomlarının yakınında yk birikimi yzeyde geliřtirilmiř ve Ti-Ti-Zr kovalent baėları Zr eklenmesi ile glendirilmiřtir. Silindirik olmayan Ti-Ti-Zr baėları hala gl kovalenttir. Ancak Ti, Zr ve Al arasındaki metal baėları zayıflamıřtır. Hf eklenmesiyle ortaya ıkan baėlanma durumu ise Zr katkısına benzer olarak gerekleřmiřtir. Aradaki tek fark ise Ti-Hf baė kuvvetinin Ti-Zr baė kuvvetinden biraz daha zayıf olmasıdır.



Resim 2.6. Alaşımların elektron yoğunluğu a) Ti_3Al ; (b) $Ti_{11}Al_4Zr$; (c) $Ti_{11}Al_4Hf$; ve (d) $Ti_{12}Al_3Sn$ [74]

Ayrıca yapılan başka bir teorik çalışmada [75], zirkonyum ilavesi γ -TiAl bazlı alaşımların düşük sıcaklıkta sünekliklerini arttırdığı bildirilmiştir. Bant yapısından gelen yönlü bağların, deformasyon bölgelerini tetiklediği görülmüştür. Diğer taraftan Pathak tarafından yapılan çalışmada [76] Zr ve Hf elementlerinin Ti_2Al alaşımına Hf ve Zr elementlerinin eklenmesiyle yapının daha kararlı hale geldiği ve mekanik olarak sünekliğin arttırıldığı rapor edilmiştir.

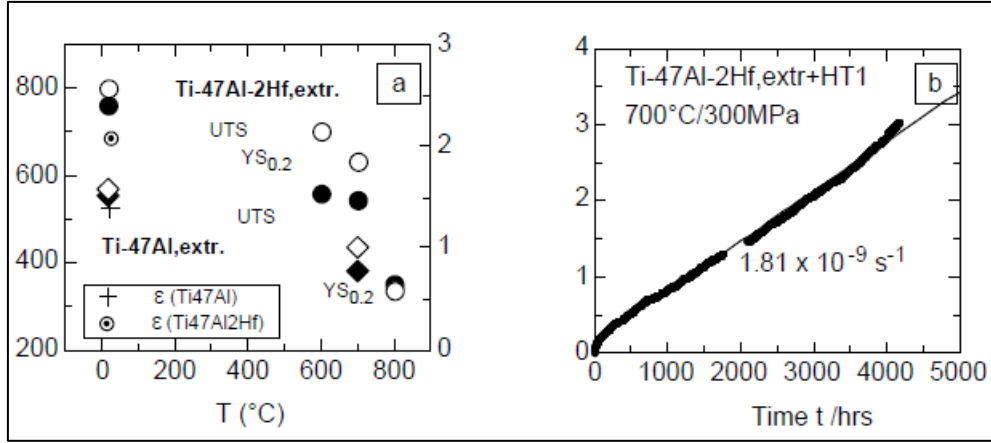
Muellauer [77] tarafından yapılan deneysel çalışmada Hf elementinin Ti_3Al ve γ -TiAl alaşımlarının üzerindeki yapısal ve mekanik etkileri incelenmiştir. Çalışmada katı-sıvı geçiş sıcaklığının azaldığı gözlenmiştir. Bunun yanında soğuma eğrileri çıkarılmış ve aşağıda görüleceği üzere oda sıcaklığında %54 Al ihtiva eden alaşım hariç iki fazlı yapının oluştuğu görülmüştür.

%45 at. Al: $L \rightarrow L + \beta \rightarrow \beta \rightarrow \beta + \alpha \rightarrow \alpha \rightarrow \alpha + \gamma \rightarrow \alpha_2 + \gamma$

%47 at. Al: $L \rightarrow L + \beta \rightarrow \alpha \rightarrow \alpha + \gamma \rightarrow \alpha_2 + \gamma$

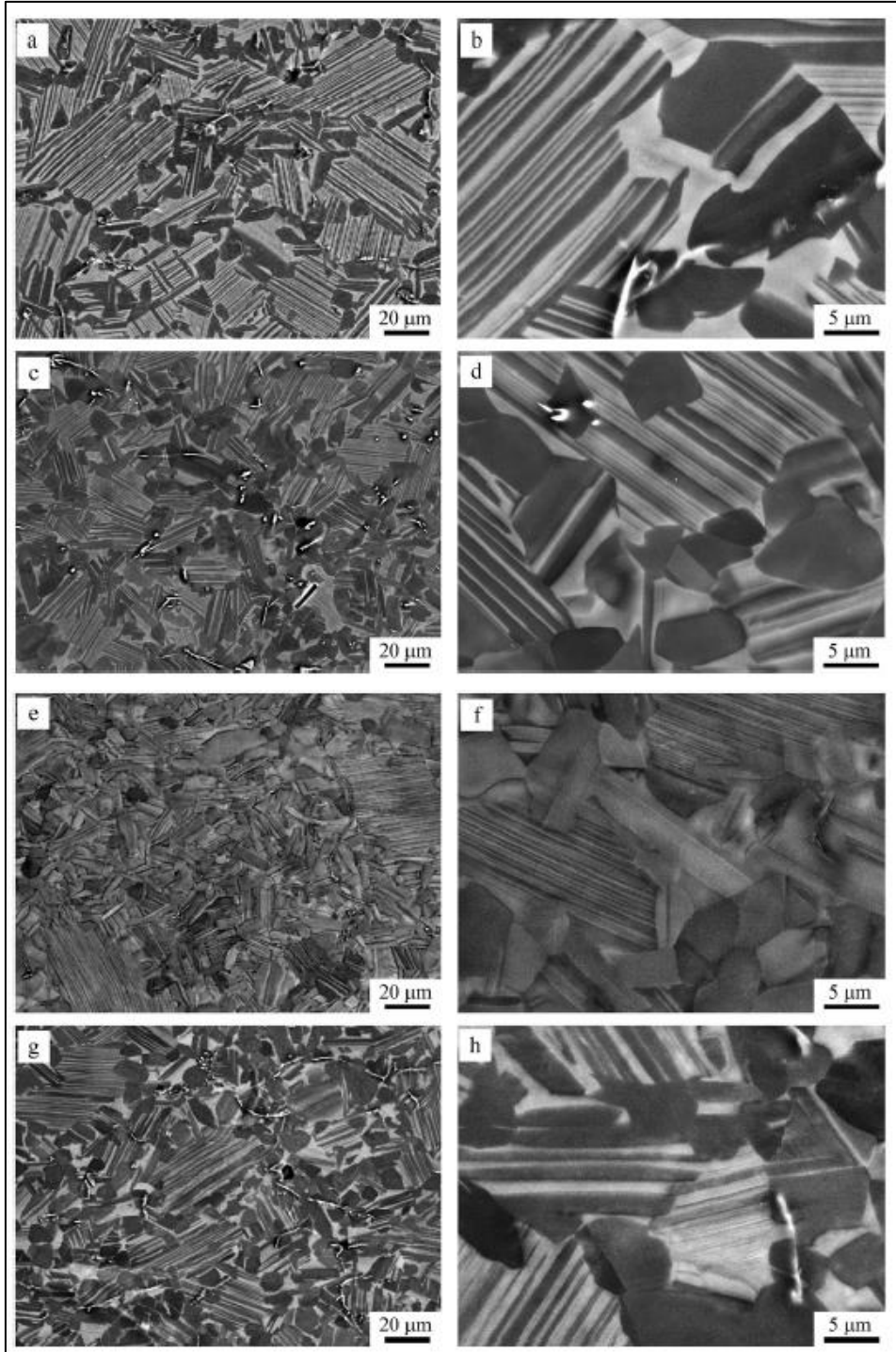
%54 at. Al: $L \rightarrow L + \alpha \rightarrow \gamma + \alpha \rightarrow \gamma$

Ayrıca, Şekil 2.10'dan görüleceği üzere mekanik değerlerde artış gözlenmiştir.



Şekil 2.10. Ti-47Al-2Hf alaşımlarının a) Statik mukavemet b) Sürünme grafikleri [77]

γ -TiAl alaşımı üzerinde Zr ve Hf elementleri ile yapılan en detaylı mikro yapı analizleri İmayev [78] tarafından yapılmıştır. Zr ve Zr + Hf ile katkılanmış alaşımlar Nb içeren alaşıma kıyasla önemli ölçüde daha yüksek mukavemet, daha yüksek kırılma-şekil geçiş sıcaklıkları ve sürünme direnci göstermiştir. Bu durum Zr ve Hf'nin Nb'ye göre daha büyük atomik yarıçapları nedeniyle daha yüksek katı çözelti sertleşmesine ve Zr ve Zr + Hf'ye karşı Nb'nin farklı bölümlenme davranışlarına ve Zr ve Zr + Hf'nin γ fazında daha yüksek konsantrasyonlara yol açmasına bağlanmıştır. Özellikle, Zr ve Zr + Hf ile alaşımlama, dinamik tekrar kristallendirmeyi geliştirmiştir. Geliştirilmiş mekanik özellikler, Zr ve Hf elementlerinin alaşımda Resim 2.7'de görüleceği üzere ikili mikroyapı geliştirmesinden kaynaklanmıştır.



Resim 2.7. Dövme ve ısıt işlemleri sonrası alaşımların SEM görüntüleri (a,b) Ti-44Al-0.2B, (c,d) Ti-44Al-5Nb-0.2B, (e,f) Ti-44Al-5Zr-0.2B ve (g,h) Ti-44Al-5(Zr + Hf)-0.2B [78]

2.3. Ti-Al Alaşım Tasarımı için Hesaplamalı Metotlar

Ti-Al bazlı çalışmalarda, alaşım ve uygun metot teknolojisinde son 20 yılda önemli gelişmeler olmuştur. Son yıllarda alaşımların mekanik özellikleri ve süneklik seviyelerinde

yapılan çalışmalar ile önemli derecede gelişme kaydedilmiştir. Yüksek sıcaklık mekanik özelliklerde ve oksidasyon direncinin artması da alaşımlama metodu ile mümkün olmuştur. Ancak, tokluk gibi diğer özellikler için gelişmeler nispeten sınırlı durumda kalmıştır. Bu durumda her özelliği aynı anda karşılayacak evrensel olarak kabul edilmiş bir kompozisyon olmayacağını göstermektedir [79].

Rastgele seçilmiş elementler ve kompozisyonlarla başarılı bir Ti-Al alaşımı üretmek mümkün görünmemektedir. Yapısal ve mekanik kararlılık yalnızca hesaplanmış veya doğrulanmış en kompozisyonlarda mümkün olmaktadır. Ti-Al alaşımı üretmek için olan elementlerin ve kompozisyonların deneysel olarak denenmesi için çok fazla kombinasyon bulunmaktadır. Ticari veya geleneksel alaşımlarda, ikili ve üçlü faz diyagramlarının yardımıyla belirli bir tahmin yürütülebilir ancak dördü ve üzeri element içeren alaşımlarda mevcut faz diyagramları bulunmadığından dolayı tahmin etmek kolay değildir. Dolayısıyla, son yıllarda hesaplamalı yöntemler ile element ve kompozisyon çalışmaları önem kazanmıştır.

Ti-Al alaşımları için deneysel çalışmalardan öncesi hesaplamalı metotlar uygulamak hem zaman hem de maliyet yönünden avantaj sağlayacaktır. Literatürde kullanılan en yaygın hesaplamalı yöntemler; yoğunluk fonksiyonel teorisi, moleküler dinamik ve faz diyagramlarının hesaplanmasıdır.

2.3.1. Yoğunluk fonksiyonel teorisi

Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT); temel kuantum mekanik yasalarını kullanarak kristal yapıların enerjisini hesaplamaktadır. Bu enerji yardımıyla; ele alınan kristal yapıların denge durumu, termodinamik özellikler ve elastik sabitleri gibi özelliklerin hesaplanması da gerçekleştirilmektedir. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) metotları, katı hal fiziği ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılan ve deneysel çalışmalardan önce sıklıkla başvurulmuş yöntemlerdir. Diğer modelleme teknikleri arasında DFT, uygulanması en uygun teknik olarak düşünülmektedir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'nin temeli, Thomas ve Fermi [80,81] tarafından 1920'li yıllarda yapılan çalışmalar sonucu ortaya çıkmıştır. Bu çalışmalardaki yaklaşımlar baz alınarak önce 1964 yılında Hohenberg ve Kohn [82] teoremi ve hemen akabinde devam

niteliğinde olan Kohn-Sham [83] teoremi geliştirilmiştir. Hohenberg-Kohn'un ilk teoremine göre, değiş-tokuş ve korelasyon etkisini içeren elektron gazının toplam enerjisi elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak belirtilebilir.

$$E = E[n(\vec{r})] \quad (2.1)$$

Hohenberg-Kohn'u ikinci teoremine göre ise sistemin taban durum enerjisi, toplam enerjinin minimum olduğu değerdir. DFT'nin en yaygın şekilde kullanımı ise Kohn-Sham (K-S) teoremini baz alan çalışmalardır. Kohn-Sham teoremi ise tek elektronlu denklem setlerinin çoklu elektron sistemi yerine kullanılabilir hale getirildiği yaklaşımdır. Bu teoremden elektron yük yoğunluğu $n(\vec{r})$ 'yi temel değişken kabul edilerek sistemlerin taban durum özellikleri belirlenmektedir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin esas amacı, çok parçacık dalga fonksiyonu tanımlanmadan, yoğunlukların yardımı ile fermiyonların (kuantum durumuna karşılık gelebilen parçacıkların) etkileştiği bir sistemi tanımlar. Dış potansiyelden elektron yoğunluğunu değerlendiren bir metot tanımlanmak istendiğinde, sistemin Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Böyle bir sistemin Schrödinger denklemi

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.2)$$

şeklinde dir. Bu denklemde Ψ dalga fonksiyonu, H Hamiltonyen operatörü, E ise sistemin toplam enerjisidir.

Hohenberg-Kohn ve Kohn-Sham teoremleri çok parçacık Schrödinger denklemini tek parçacık Schrödinger denklemlerine indirgemesine rağmen değiş-tokuş korelasyon enerjisi kısmı tam olarak net olmamaktadır. Değiş-tokuş korelasyon enerjisini netleştirmek için sıklıkla kullanılan yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)'dır. Bu yaklaşımda bir noktanın belirli bir elektron yoğunluğuna sahip olduğu düşünülür ve her noktadaki elektronun, çevresindeki aynı yoğunluklu diğer elektronlarla etkileşime girdiği kabul edilir [84]. Bu yaklaşımda değiş-tokuş korelasyon enerjisi aşağıdaki eşitlikle ifade edilmektedir.

$$E_{XC}^{LDA}[n] = \int d^3r \, n(\vec{r}) \epsilon_{XC}^0[n(\vec{r})] \quad (2.3)$$

LDA'dan sonra deęiş-tokuş korelasyon fonksiyoneliini açıklayan yaklaşım eden yaklaşım genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımları (GGA)'dır. Bu yaklaşım, elektron yoğunluğunun yerel deęerleri üzerindeki deęiş-tokuş korelasyon enerjisinin işlevsel baęlılığını ihmal etmek için yerel gradiyentlerini sınırlandırılmasına dayanmaktadır [85]. GGA, katı sistemlerdeki baę uzunlukları ve toplam enerji deęerleri için iyi sonuçlar sunmaktadır. GGA yaklaşımında deęiş-tokuş korelasyon enerjisi aşığıdaki eşitlikle ifade edilmektedir.

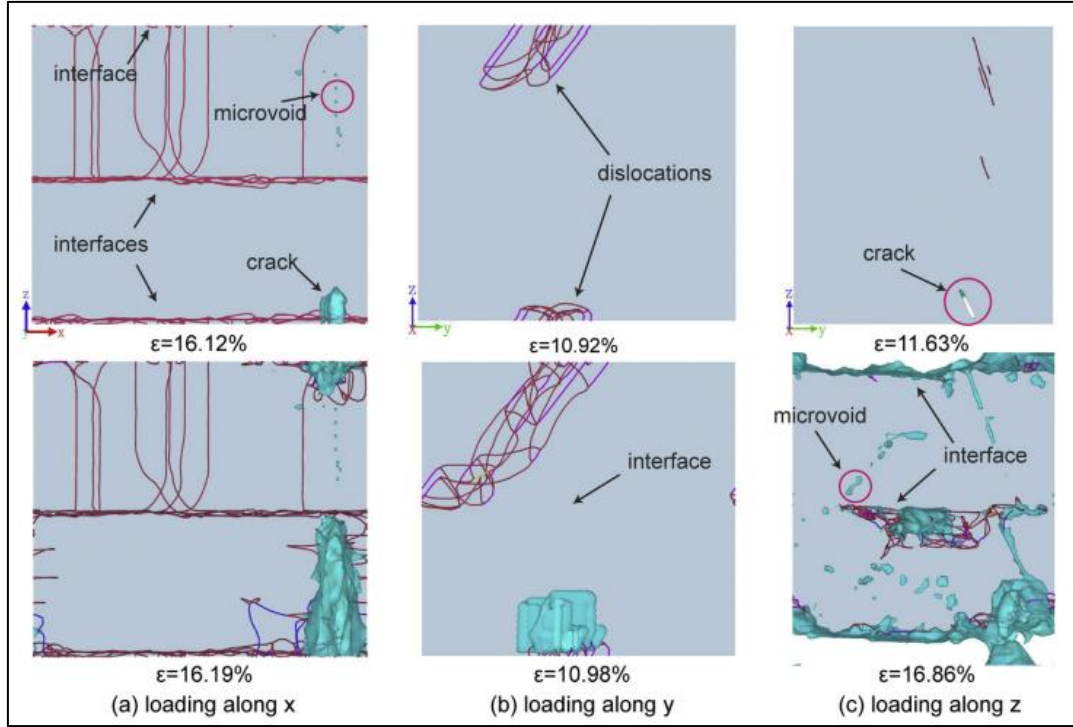
$$E_{XC}^{GGA}[n] = \int d^3\vec{r} f[n(\vec{r})\nabla n(\vec{r})] \quad (2.4)$$

DFT hesaplamalarında kristal yapılarla çalışmak için, öncelikle kristal yapıdaki atomların atomik pozisyonları ve kafes parametrelerinin tanımlanması gerekmektedir. Hesaplaması yapılacak olan kristal iki farklı metotla oluşturulmaktadır. Bunlardan biri sanal kristal yaklaşımı (VCA) bir dięeri de süper hücre modelidir. Sanal Kristal Yaklaşımı (VCA) [86], süper hücre yaklaşımıyla karşılaştırıldığında hesaplama açısından daha ucuz olan ve ilk kristal yapısını deęiştirmeden yapıların oluşturulmasına izin veren modelleme için kullanılmaktadır.

Günümüzde malzemelerin atomik bazda özelliklerinin araştırılmasında ilk ilkelere dayanan ABİNİT, Siesta, VASP ve CASTEP gibi yazılımlar kullanılmaktadır.

2.3.2. Moleküler dinamik

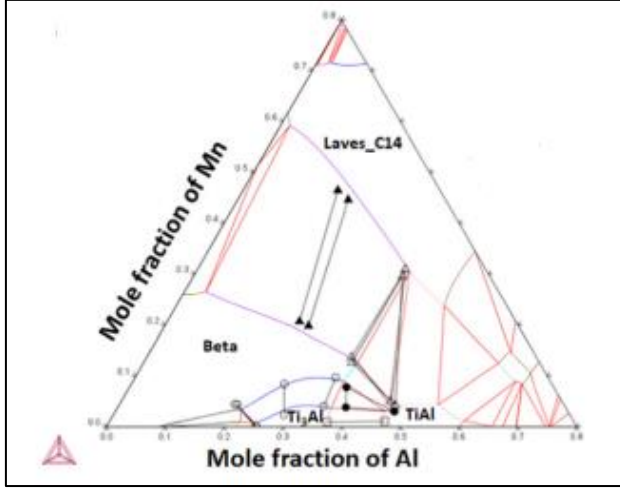
Moleküler dinamik parçacıkların hareketini incelemek için simülasyon yöntemleri kullanılmasıdır. Bu hesaplama metodunda Newton'un hareket denklemini sayısal olarak çözme yaklaşımı kullanılmaktadır. Potansiyel enerji ile hareket eden parçacıkların etkileşimleri (kuvvet alanı) hesaplamanın temelini oluşturmaktadır. Atomlar, deneysel ve gözlemsel potansiyel enerji fonksiyonları veya çalışma alanına baęlı olarak seçilen kuvvet alanları kullanılarak birbirleriyle etkileşime girerler ve atomlara etki eden kuvvetler bu fonksiyonlara veya kuvvet alanları temel alınarak belirli bir konfigürasyon için hesaplanır. Bu hesaplama Newton'un hareket denkleminin de ilave edilmesiyle, sistemin belirli bir zaman aralığı boyunca konfigürasyonu elde edilir. Özellikle malzeme deformasyon simülasyonlarında etkin olarak moleküler dinamik metodu kullanılmaktadır. Li ve dięerleri [87] yaptığı çalışmada TiAl/Ti₃Al fazlarının oluşturulduğu ara yüzeyde dislokasyon ve çatlak durumlarını (Resim 2.8) başarı ile simüle etmişlerdir.



Resim 2.8. TiAl/Ti₃Al sisteminin a) x b) y c) z yönlerinde deformasyon koşulları [88]

2.3.3. Faz diyagramlarının hesaplanması

CALPHAD yöntemi ile bir sistemdeki faz dengeleri ile ilgili tüm deneysel bilgiler, termokimyasal ve termofiziksel çalışmalardan elde edilen termodinamik bilgiler toplanıp, her fazın termodinamik özellikleri daha sonra ayarlanabilir parametreler içeren bir matematiksel modelle tanımlanmaktadır [89]. ThermoCalc yazılımı ise CALPHAD yöntemini kullanılarak faz dengesi, faz diyagramları, faz dönüşümlerini ve soğuma eğrisini termodinamik olarak modelleyebilmektedir. Kararlı fazların yanı sıra yarı kararlı fazların da CALPHAD veri tabanı ile verilmesi, bu metoda olan ilgiyi arttırmıştır. Yakın zamana kadar, CALPHAD ikili ve üçlü sistemlere uygulanabilirken, yoğun çalışmalar sonunda daha fazla element ihtiva eden sistemlerde de uygulanmaya başlanmıştır. Örneğin, Shi ve diğerleri [90] yaptıkları çalışmada Ti-Al-Mn faz diyagramını 1000 °C'de oluşturmuş ve Şekil 2.11'de görüldüğü üzere fazları tanımlamışlardır.



Şekil 2.11. TiAl-Mn alaşımlarının 1000 °C’deki üçlü faz diyagramı [90]

2.4. Ti-Al Alaşımlarının Üretim Metotları

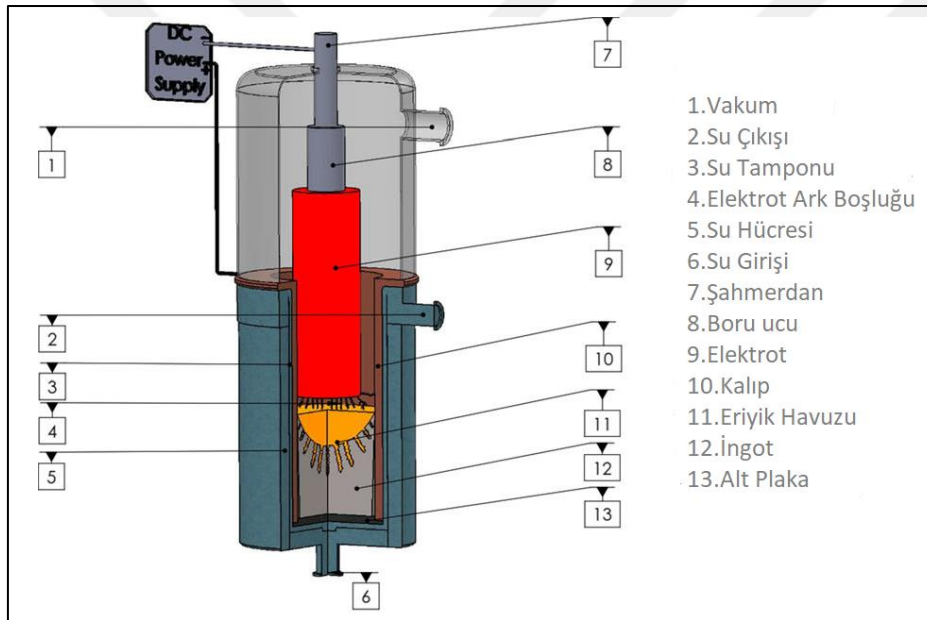
Titanyum alaşımları birçok uygulamada büyük kullanım potansiyeline sahip olmasına rağmen, mevcut üretim yöntemlerinin yüksek üretim maliyetleri nedeniyle üretim hacimleri genellikle düşüktür. Bu durum, Ti bazlı alaşımların (>1600 °C) çelik (1300-1500 °C) ve alüminyum alaşımlarına (600°C) göre daha yüksek erime sıcaklıklarına sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Ti-Al alaşımlarının çeşitli formlarda sanayiye ulaşma başarısı, kritik olarak alaşım kompozisyonunun anlaşılmasına, uyarlanmasına ve gerekli mekanik özellikleri elde etmek için üretim metotlarına bağlıdır [91]. Bu açıdan alaşım kompozisyonu ve işlenmesi önemli faktörlerdir, ancak en önemli ön koşul, ingotların yeniden üretilebilir bir bileşimde, kalitede ve ekonomik bir temelde üretilebilmesidir. Özellikle havacılık ve uzay sanayinde kullanılabilmesi için alaşımların yapısal olarak hatasız, önemli ölçüde mikroyapısal ve bileşimsel fark içermemesi gerekmektedir. Ti-Al alaşımlarının mevcut üretim yolları arasında döküm [92], toz metalürjisi [93] ve birleştirme [94] yöntemleri sayılabilir.

2.4.1. Döküm metotları

Endüstriyel bazda TiAl ingotlarını üretmek için kullanılan iki ana ergitme tekniği, vakum ark ergitme/yeniden ergitme (VAR), ve vakum indüksiyon ergitmesidir (VIM).

Vakum ark ergitme Metodu yüksek vakum ortamında bir elektrot ile su soğutmalı bir bakır kalıp arasında oluşan bir ark malzemeleri ertilmesini (ve ardından yeniden ertilmesini)

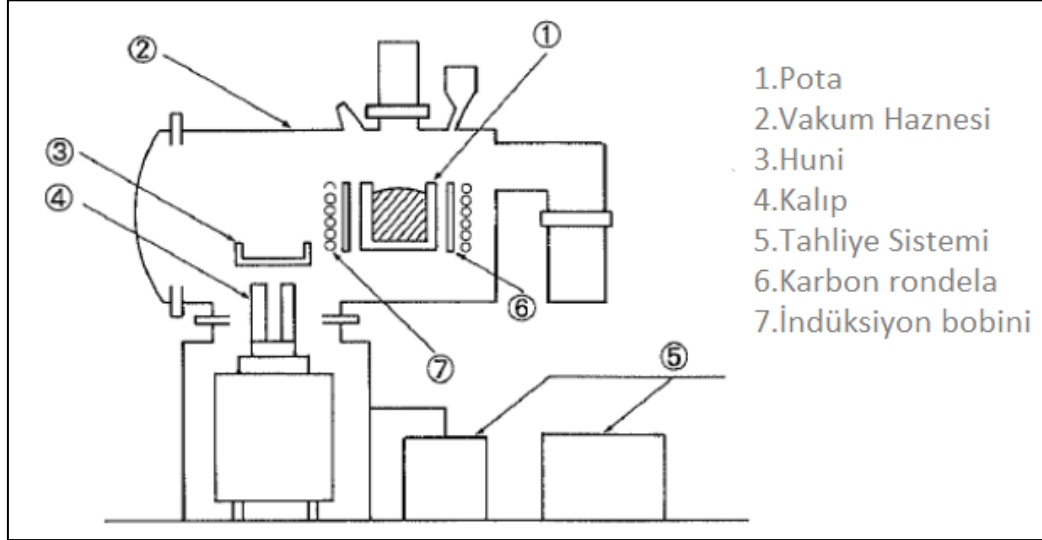
içerir. Diğer bir deyişle, saf olmayan bir alaşımın vakum altında bir DC ark tarafından rafine edilme yöntemidir. Elektrot ucu malzemeleri ergiterek damlacıkların oluşmasına neden olur. Daha sonra damlacıklar vakum aracılığıyla eriyik havuzuna ulaşır. Eriyik havuz yüksek saf alaşım oluşturmak için su soğutmalı kalıpta katılaştır. Ayrıca, damlacıklar düşük yoğunluklu oksitleri eriyik havuzuna taşır. İnklüzyonlar daha sonra ingot yüzeyinde ya da katılaşma kenarlarına difüze eder. Bu arada yüksek buhar basıncına sahip ve istenmeyen Pb, Sn, Bi, Te, As ve Cu gibi elementler de vakum altında buharlaşabilir [95]. Bu metotta, alaşımın homojen olması amacıyla iki veya daha fazla ergitme yapılabilir. Literatürde, 300 mm ve 255 kg ağırlığında [96] ve 355 mm çapında 270 kg ağırlığında Ti-Al alaşımları bu metotla üretilmiştir [5]. Resim 2.9'da VAR metodu şematik olarak gösterilmiştir.



Resim 2.9. VAR metodu şematik gösterimi [95]

Diğer bir vakum altında ergitme metodu olan vakum indüksiyonlu ergitme (VIM), malzemelerin vakum ya da koruyucu atmosfer altında elektromanyetik bobinler yardımıyla ergitilmesidir. Proses esnasında kullanılan ana güç kaynağı, indüksiyon bobininden geçen alternatif bir akımın oluşturduğu manyetik alandır. İndüksiyonla ısıtma işleminin önemli bir özelliği, ısıtmanın, ısı iletimi yoluyla harici bir ısı kaynağı yerine nesnenin içinde üretilmesidir. Böylece nesneler çok hızlı bir şekilde ısıtılabilir. Ayrıca, kontaminasyonun azaltılması konusunda önemli avantajlar sağlamaktadır. Vakum indüksiyon ergitme metodunda elektromanyetik karıştırıcı özelliği sayesinde alaşımlarda homojenliği sağlamaktadır. Uygun potansiyeller olduğunda, vakum indüksiyon metodu ile endüstriyel ölçekte üretimler

yapılabilmektedir.[97,98] Bu metotta Ti-Al alaşımlarında kullanılacak pota tasarımı ve seçimine dikkat edilmelidir. Metot ile ilgili şematik Resim 2.10’da verilmiştir.



Resim 2.10. VIM metodu şematik gösterimi [99]

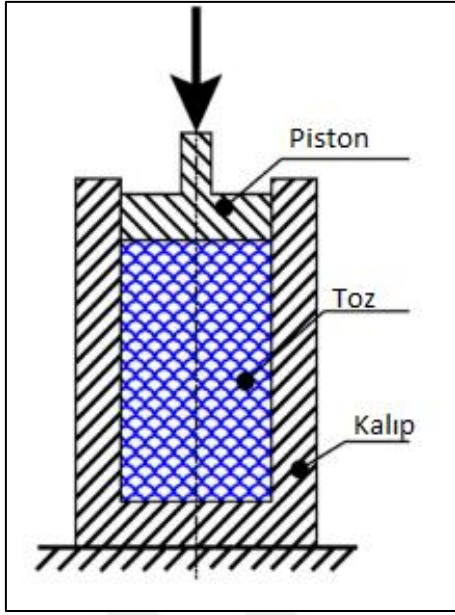
Vakum altında ergitme metotlarıyla üretilen bazı Ti-Al alaşımları Çizelge 2.3’te verilmiştir.

Çizelge 2.3. Döküm yöntemi ile üretilen ticari TiAl alaşımları [100]

Alaşım İsmi	Kompozisyon (% at.)
GE 48 - 2 - 2	Ti - 48Al - 2Nb - 2Cr
Lockheed – Martin 45XD TM	Ti - 45Al - 2Nb - 2Mn - 0.8 vol.% TiB 2
Lockheed – Martin 47XD TM	Ti - 47Al - 2Nb - 2Mn - 0.8 vol.% TiB 2
Honeywell WMS	Ti - 47Al - 2Nb - 1Mn - 0.5W -0.5Mo - 0.2Si
ABB - Alstom, ABB - 2	Ti - 47Al - 2W - 0.5Si
GKSS TAB	Ti - 47Al - 1.5Nb - 1Mn - 1Cr - 0.2Si - 0.5B

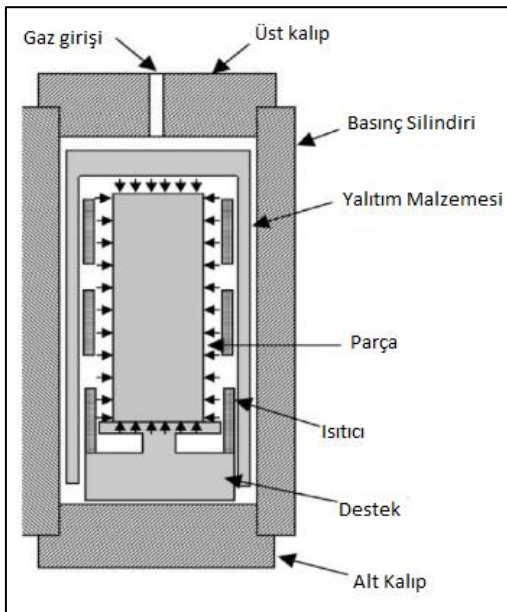
2.4.2. Toz metalurji metotları

Zaman ve maliyet bakımından avantajlı olması sebebiyle toz metalürji üretim teknikleri Ti-Al alaşımı üretimi için son dönemlerde popüler üretim metotları arasında yer almaktadır [101]. Soğuk-sıcak presleme ve sıcak izostatik presleme en çok kullanılan metotlar arasında yer almaktadır. Soğuk presleme metodunda tozlar genellikle soğuktur ve istenilen yoğunluğa göre pres yardımıyla tozlar sıkıştırılmaktadır [102]. Presleme şematiği Resim 2.11’de verilmiştir.



Resim 2.11. Presleme metotları şematik gösterimi [103]

Sıcak izostatik presleme (HIP) işlemi tipik olarak Ti bazlı alaşım tozunun beta geçiş sıcaklığının altında sıkıştırılmasıdır. Beta geçiş sıcaklığı alaşımın kompozisyonuna bağlıdır, böylece farklı içyapılar elde edilmektedir. Bu süreçte şekillendirilmiş kalıp tozla doldurulur ve tek eksenli basınç ve elektrik dirençli ısıtma altında sıcak preslenir. Proses tamamlandığında, kalıp, aşındırma veya işleme ile çıkarılır [104]. Sıcak izostatik presleme şematığı Resim 2.12’de verilmiştir.



Resim 2.12. Sıcak İzostatik presleme şematik gösterimi [105]

Toz metalurji üretim teknikleriyle üretilen bazı Ti-Al alaşımları Çizelge 2.4'te verilmiştir.

Çizelge 2.4. Toz metalurji yöntemleri ile üretilen alaşımlar [106]

Kompozisyon (% at.)	ϵ_{toplam} (%)
Ti - 48Al - 2Cr - 2Nb	0.3
Ti - 48Al - 2Mo	0.42
Ti - 47.4Al - 2.6Cr	1.8-2.0

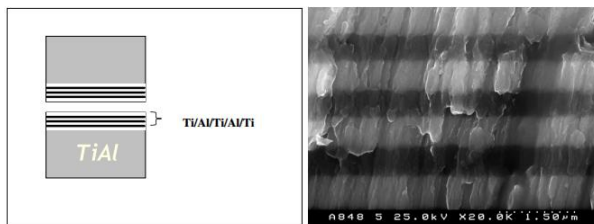
2.4.3. Birleştirme teknikleri ile üretim

Katı hal difüzyonu, TiAl alaşımlarını herhangi bir ergitme olmaksızın üretim için bir yol sağlar. İnce ve kalın malzemelerin birbiri ile birleştirilmesi, deformasyon oranının azlığı gibi avantajları olan bu metodun, proses zamanı ve maliyeti gibi dezavantajları bulunmaktadır. TiAl alaşımlarının birleştirilmesiyle ilgili araştırmaların çoğu difüzyon bağlanmasına odaklanmış olsa da eklemeli imalat, lehimleme ve kaynaklama gibi diğer üretim teknikleri de kullanılmaktadır. Ancak, birleştirme sıcaklığı ve birleştirmeden sonraki soğuma hızının malzemedeki mikroyapıya ve kalıntı gerilimlere neden olduğundan dolayı bu metotlar seçilirken bu konular göz önünde bulundurulmalıdır. Katı hal difüzyon üretim teknikleriyle üretilen bazı Ti-Al alaşımları Çizelge 2.5'te verilmiştir.

Çizelge 2.5. Katı Hal difüzyonu ile üretilen alaşımlar [107]

Kompozisyon (% at.)	Mikroyapı
Ti - 44.5Al	Dupleks
Ti - 45Al - 10Nb	Katmanlı
Ti - 46.5Al	Dupleks
Ti - 46.5Al-5.5Nb	Dupleks
Ti - 54Al	Küresel

Katı hal difüzyonu şematik gösterimi ve örnek içyapı Resim 2.13'te verilmiştir.



Resim 2.13. TiAl alaşımına ait a) Katı hal difüzyonu şematik gösterimi, b) içyapı [108]

3. MALZEME VE METOT

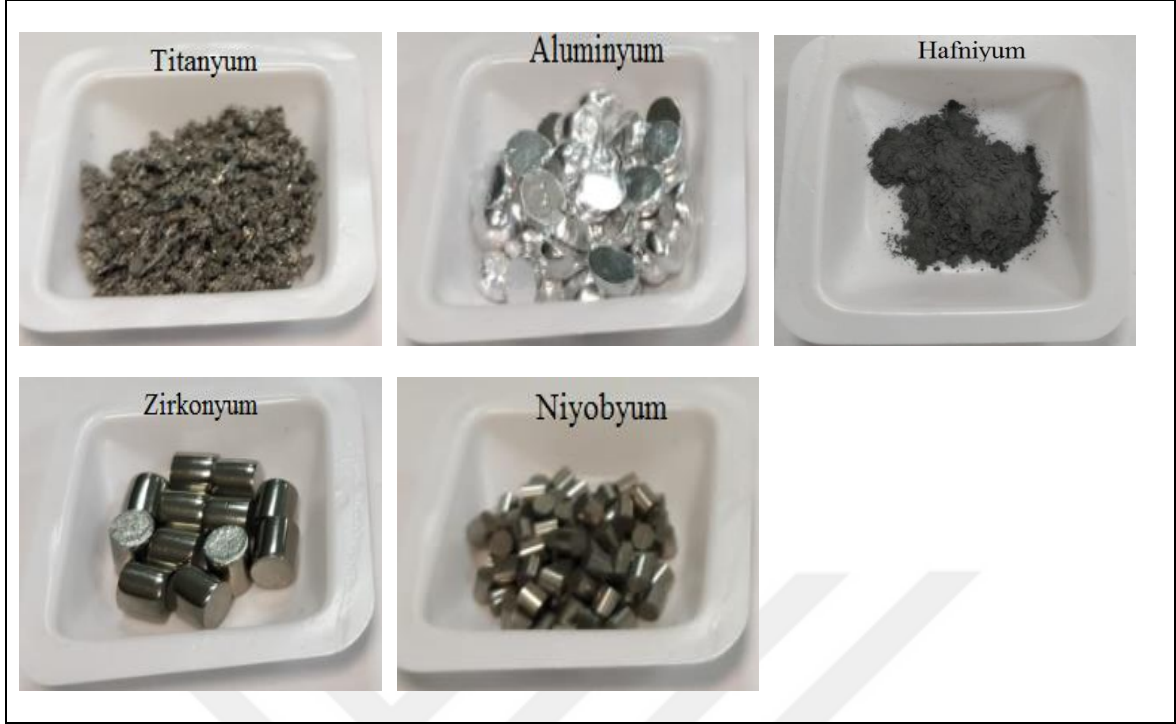
Bu tez çalışması, havacılık ve uzay endüstrisinde kullanılabilecek düşük yoğunluklu, mukavemeti yüksek ve yüksek sıcaklık oksidasyon özellikleri geliştirilmiş TiAl alaşımının tasarımını ve üretimini içermektedir. Havacılık ve uzay sanayinde en çok kullanılan ticari alaşım olan Ti6Al4V alaşımının özellikleri referans olarak alınmış ve karşılaştırılmıştır. Bu kapsamda ana elementler olan titanyum ve alüminyum elementlerinin dışında mukavemet ve yüksek sıcaklık oksidasyon özelliklerini geliştirebilecek olan hafniyum, zirkonyum ve niyobyum elementleri seçilmiştir. Zr ve Hf elementleri için ağırlıkça %0-7, niyobyum için ise ağırlıkça %0-5 arası kompozisyonlar çalışılması hedeflenmiştir.

3.1. Ham Malzemeler

Ti-Al-Hf,Zr-Nb alaşımlarını hazırlamak amacıyla yüksek saflıkta ham malzemeler kullanılmıştır. Kullanılan ham malzemelerin hepsi Alfa Aesar'dan tedarik edilmiş malzemelerdir. Ti elementi süngerimsi form, Al elementi iri hacimli küresel, Zr elementi kesilmiş küçük külçe, Nb elementi granül ve Hf elementi iri toz halinde kullanılmıştır. Ham malzemeler hakkında detaylar Çizelge 3.1'de malzemelerin resimleri de Resim 3.1'de verilmiştir.

Çizelge 3.1. Ham malzemelerin saflık dereceleri

Element	Saflık(%)	Malzeme Formu	CAS Numaraları
Ti	99.99	Granül	7440-32-6
Al	99.99	Külçe	7429-90-5
Hf	99.9	Toz	7440-58-6
Zr	99.9	Külçe	7440-67-7
Nb	99.9	Külçe	7440-03-1



Resim 3.1. Kullanılan ham malzemeler

3.2. Hesaplamalı Metotlar

Üretimsel denemelerden önce üretilebilirliğinin değerlendirilmesi, uygun kompozisyonların seçilmesi ve alaşımların özelliklerini tahmin edebilecek çalışmalar yapılması nedeniyle, alaşım tasarımlarında hesaplamalı metotlar kullanımı son yıllarda büyük önem kazanmıştır. Hesaplamalı metotlar ile en uygun kompozisyonlar seçilmesi hedeflenmiş ve akabinde de belirlenen kompozisyonların üretilmesi ve karakterizasyonunun yapılmasına karar verilmiştir.

3.2.1. Cambridge sıralı toplam enerji paketi (CASTEP) simülasyonları

Teorik çalışmalar yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) esaslarına göre Cambridge Sıralı Toplam Enerji Paketi (CASTEP) kodu ile yapılmıştır. Hesaplamalarda, pseudopotansiyeller kübik yapılar için Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) form içinde genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) kullanılarak yapılmıştır. Elastik özellikler yine CASTEP kodunun elastik hesaplama özelliği kullanılarak hesaplanmıştır. Örnek CASTEP giriş dosyası Resim 3.2’de verilmiştir.

```

%BLOCK lattice_cart
4.594 0.000 0.000
0.000 4.594 0.000
0.000 0.000 2.959
%ENDBLOCK lattice_cart

%BLOCK positions_frac
Ti 0.000 0.000 0.000
Ti 0.500 0.500 0.500
O 0.305 0.305 0.000
O -0.305 -0.305 0.000
O 0.805 0.195 0.500
O -0.805 -0.195 0.500
%ENDBLOCK positions_frac

symmetry_generate

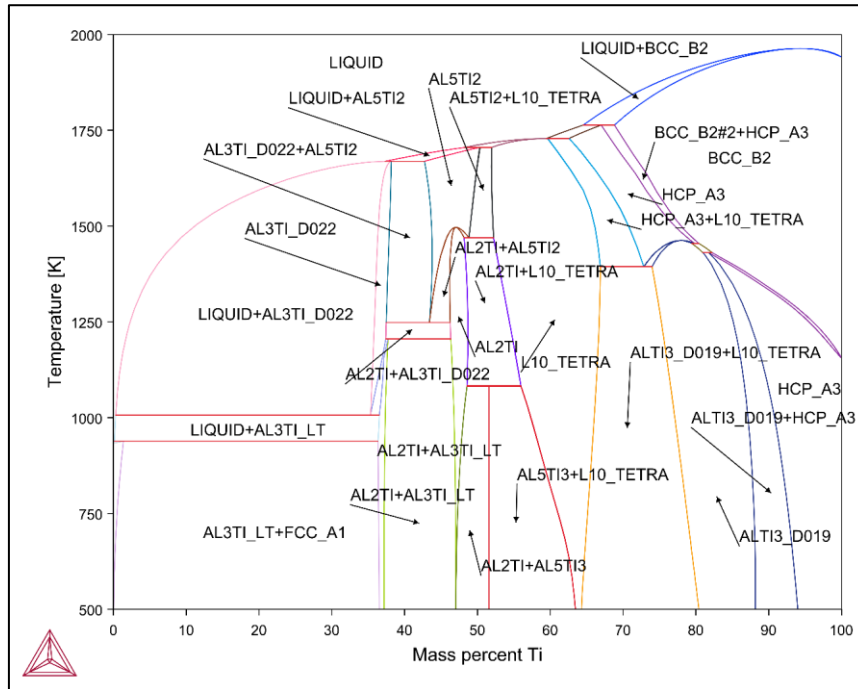
kpoint_mp_grid 3 3 3

```

Resim 3.2. Örnek CASTEP giriş dosyası

3.2.2. Thermo-calc analizleri

İlk prensipler ilkesi ile kompozisyonları belirlenmiş alaşımların üretim öncesi termodinamik özelliklerini belirlemek ve soğuma sonrası oluşacak fazları anlamak amacıyla Thermo-Calc programı kullanılmıştır. Hesaplamalar, CALPHAD yöntemi ile Ti ve Al veri tabanları kullanılarak yapılmıştır. ThermoCalc ile çizilen örnek Ti-Al faz diyagramı Şekil 3.1’de verilmiştir.



Şekil 3.1. Thermo-Calc programı ile hesaplanmış Ti-Al faz diyagramı

3.3 Üretim Metotları

Belirlenen Ti-Al alaşımları, yüksek saflıkta ($\geq 99,5$ % at.) olan ham maddeler 10^{-5} gr hassasiyete sahip terazi ile tartılmış ve alaşımlama için hazırlanmıştır. Bu çalışmada alaşım üretimi için homojen bileşimde üretim sağlayan vakum indüksiyon ergitme tekniği kullanılmıştır.

3.3.1. Vakum indüksiyon ergitme

Vakum indüksiyon ergitme, Indutherm MC 15+ indüksiyon ergitme cihazı (Resim 3.3) kullanılarak yapılmıştır. Alaşımlama için hazırlanan ham malzemeleri eritmek amacıyla cihazın güç ünitesi yardımıyla uygun ergitme sıcaklığına ulaşılmıştır. Ergitme işlemi vakuma alınmış ortamda yüksek saflıkta argon atmosferi altında yapılmıştır. Ergitme işlemi sırasında eriyiğin homojen olması için manyetik alan karıştırılması uygulanmıştır. Ergitilmiş alaşımlar cihaz içerisinde Resim 3.3'te verilen bakır kalıplara dökülmüştür. Döküm sonrası yaklaşık 25 mm boyunda ve 12.5 mm çapında numuneler üretilmiştir.



Resim 3.3. a) Indutherm MC15+ Vakum indüksiyon Cihazı b) Bakır döküm kalıbı

3.4. Karakterizasyon Teknikleri

3.4.1. X-ışını kırınımı (XRD)

Üretilen alaşımlardaki fazların ve kristalografik özelliklerin belirlenmesi XRD tekniği ile yapılmıştır. XRD çalışmaları alaşım karakterizasyonun en kritik adımlarından biridir. Numunelerde hangi ara bileşiklerin bulunduğu karar vermek amacıyla EDS ile XRD

sonuçları birlikte kullanılmıştır. XRD analizleri 1.54056 Å dalga boyuna sahip Cu-K α radyasyonlu Bruker Advance 8 (Resim 3.4) kırınım ölçer cihazı ile yapılmıştır. Veriler 20° ile 90° arasında 2°/dk tarama hızı ile toplanmıştır.



Resim 3.4. Bruker Advance 8 kırınım ölçer cihazı

3.4.2. Elektron mikroskobu

Numunelerdeki fazların morfoloji ve dağılımlarını belirlemek için taramalı elektron mikroskopu kullanılmıştır. Ayrıca, fazların kimyasal bileşimini anlamak amacıyla Enerji Dağılımlı X-ışını Spektrometresi (EDS) kullanılmıştır. Analizler EDS detektörüne sahip Zeiss EVO 10 (Resim 3.5) taramalı elektron mikroskopu ile yapılmıştır. Numunelerin taramalı elektron mikroskopunda incelenmesi amacıyla numuneler 2400 grite kadar zımparalanmış ve 3 ve 1 mikronluk elmas süspansiyonları ile parlatılmıştır. Parlatılmış numuneler hacimce %10 HNO₃+%5 HF+%85 H₂O solüsyonu ile dağlanmış.



Resim 3.5. Zeiss EVO 10 taramalı elektron mikroskobu

3.4.3. Mekanik test

Radyografik muayene sonuçlarına göre yapısal olarak gözeneksiz çıkan numuneye yüksek sıcaklıkta basma testi uygulanmıştır. Yüksek sıcaklık basma testi GLEEBLE 3800 (Resim 3.6) test cihazı ile yapılmıştır. Test için 12 mm çapında ve 12 mm uzunluğunda numune hazırlanmıştır. Numunenin işlemesi tel erozyon tekniği ile yapılmıştır ve hassas toleransta numune elde edilmiştir. Test esnasında 10^{-1} s^{-1} gerinim oranı ve %50 deformasyon test parametreleri uygulanmıştır. Yüksek sıcaklık basma testi 800 °C’de vakum atmosferi altında yapılmıştır.



Resim 3.6. Gleeble 3800 termomekanik test cihazı

3.4.4. Sertlik testleri

Numunelerin sertlik deęerlerini belirlemek amacıyla Mikrosertlik (HV) ve Nanoindentasyon metotları kullanılmıřtır. Mikrosertlik testi EmcoTest Durascan 20 (Resim 3.7 a)) cihazı ile yapılmıřtır. Test ASTM E384 standartına gre HV 0.1 skalası ile 136° aılı elmas kare piramit u yardımıyla yapılmıřtır. Her bir numune iin en az 5 lm alınmıřtır. Numunelerin elastik modl ve nanosertlik zelliklerini bulabilmek amacıyla KLA Instruments iMicro (Resim 3.7 b)) nanoindentasyon cihazı kullanılmıřtır. Testler ASTM E2546 standardına gre Berkovich u kullanarak 500 mN kuvvet uygulanması ile gerekleřtirilmiřtir.



Resim 3.7. a) EmcoTest durascan 20 mikrosertlik cihazı b) KLA instruments iMicro nanoindentasyon cihazı

3.4.5. Yoęunluk lm testleri

Numunelerin yoęunlukları Arřimet prensibi ile llmřtr. Testler Arřimet kitine sahip 10⁻³ gr. hassasiyetinde Mettler Toledo XS 204 (Resim 3.8) analitik terazi kullanılarak yapılmıřtır. ncelikle tm numuneler kuru ortamda tartılmıřtır. Daha sonra, beherde bulunan su ortamında tartımı yapılıp yoęunlukları hesaplanmıřtır.



Resim 3.8. Mettler toledo XS 204 analitik cihazı

3.4.6. Radyografik muayene

Döküm malzemelerin makro boyutta yapısal özelliklerini belirlemek amacıyla tahribatsız muayene metotlarından olan radyografik muayene endüstride sıklıkla uygulanmaktadır. Radyografik muayene veya x-ışını yöntemi, bir döküm içindeki çatlak, döküm boşluğu, ergitme hatalarını belirlemek için en önemli yöntemdir. Bu çalışmada yapılan dökümler sonrası alaşımlara GE Seifert ERSCO cihazı (Resim 3.9) yardımıyla ASTM E1742 standardına göre radyografik muayene yapılmıştır.



Resim 3.9. Radyografik muayene ekipmanları

3.4.7. Yüksek sıcaklık oksidasyon testleri

Numune hazırlama

Yüksek sıcaklık oksidasyon testleri için üretilen alaşımlardan tel erozyon yöntemiyle numuneler kesilmiştir. Testten önce, numuneler 1200 grit SiC zımpara kâğıdıyla zımparalanmış, 3 ve 1 mikronluk elmas süspansiyonlarla parlatılmıştır. Parlatılan

numunelerin temizliđi iin, numuneler aseton ieren ultrasonik temizleme cihazında tutulmuř ve son olarak da kurutulmuřtur.

İzotermal oksidasyon testi

İzotermal oksidasyon testleri, laboratuvar ortamındaki kül fırınında (Resim 3.10) 800 °de gerekleřtirilmiřtir. Fırın ierisine yerleřtirilen numuneler 1, 5, 10, 25, 50 ve 100 saat sonra fırından ıkarılıp, oda sıcaklıđına sođutulmuřtur. Malzeme kaybını ve pullanmayı önlemek amacıyla, numuneleri korumak amacıyla seramik kroze kullanılmıřtır. Numunelerdeki kütle deđiřimi 10^{-2} mg hassasiyeti olan bir elektronik terazi kullanılarak ölçölmüřtür.



Resim 3.10. Kül Fırını



4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ bazlı alaşımlar ile ilgili çalışmalar sunulmaktadır. Alaşımlar ve kompozisyonları, CASTEP simülasyonlarına göre tasarlanmıştır. Üretim aşamasından önce alaşımların termofiziksel özellikleri hesaplanmıştır. Alaşımlar döküm yoluyla üretilip, numuneler üzerinde ayrıntılı olarak yapısal ve mekanik karakterizasyon yapılmıştır. Bu bölümün en son kısmında üretilebilirlik açısından optimum özellikler gösteren alaşım yüksek sıcaklık testlerine tabi tutulmuştur.

4.1. Teorik Çalışma Sonuçları

CASTEP programı kullanılarak, Ti-Al faz diyagramında yer alan ve çalışmadaki temel alaşımları oluşturan $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımlarının geometrik ve mekanik özellikleri incelenmiştir. Hesaplamalarda düzlem dalga ve pseudopotansiyel teorilerini temel alan CASTEP programı ve Perdew tarafından elde edilmiş Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA-PBE) [109] kullanılmıştır. Elektron-iyon etkileşimleri için Ultrasoft [110,111] pseudopotansiyeller kullanılmıştır. Kohn ve Sham [83] denklemleri, Brillouin bölgesi içerisinde bir set olan Monkhorst ve Pack [112] özel k noktaları kullanılarak belirlendi. CASTEP programı, pseudo atomik hesaplamaları için Alüminyum için $Al\ 3s^2\ 3p^1$, Titanyum için $Ti\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^2\ 4s^2$ durumlarını hesaplamıştır. Geometrik ve mekanik özelliklerin hesaplanmasında optimize edilen k noktaları ve kesilim kinetik enerjisi kullanılmıştır.

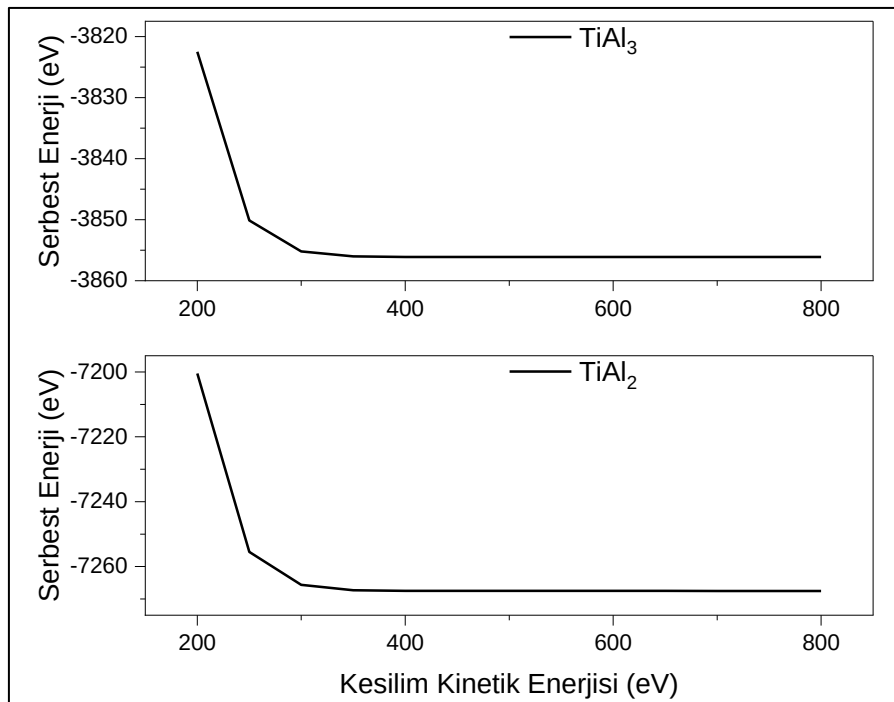
4.1.1. Parametre optimizasyonu

Çalışmaya ilk önce düzlem dalgaların kesilim kinetik enerjisinin belirlenmesiyle başlanılmıştır. Bunu yapmak için farklı kesilim kinetik enerji değerlerinde kristalin toplam enerjisini hesaplanmıştır. 200-800 eV aralığında, 50 eV'luk artışlar ile kristalin toplam enerjisine bakılmıştır. Bu parametre optimizasyon çalışmalarında, ilk önce kesilim kinetik enerjisi değiştirilmiş olup, k noktaları ve diğer değişkenler CASTEP modülünde sabitlenmiştir. Yakınsama çalışmalarında sistem serbest enerjisinin, 1×10^{-3} eV değerlerine yakınsadığı değer, kesilim kinetik enerjisi olarak belirlenmiştir. $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ fazları için kesilim kinetik enerji-Serbest Enerji Değerleri Çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1. TiAl₂ ve TiAl₃ fazları için kesilim kinetik enerji-serbest enerji değerleri

Kesilim Kinetik Enerjisi (eV)	TiAl ₂ Serbest Enerji (eV)	TiAl ₃ Serbest Enerji (eV)
200	-7200.4629	-3822.4904
250	-7255.4863	-3850.1209
300	-7265.6517	-3855.1912
350	-7267.2866	-3856.0039
400	-7267.4960	-3856.1085
450	-7267.5097	-3856.1157
500	-7267.5105	-3856.1160
550	-7267.5119	-3856.1167
600	-7267.5128	-3856.1172
650	-7267.5135	-3856.1175
700	-7267.5145	-3856.1181
750	-7267.5156	-3856.1186
800	-7267.5166	-3856.1191

Bu değerler göz önüne alınarak Şekil 4.1’de verilen kesilim kinetik enerjiye karşılık gelen serbest enerji grafiği çizilmiş ve 1×10^{-3} eV değerlerine yakınsadığı değer TiAl₂ ve TiAl₃ fazları için kesilim kinetik enerjisi olarak kabul edilmiştir. Sonuç olarak hem TiAl₂ hem de TiAl₃ fazı için kesilim kinetik enerjisi 500 eV olarak belirlenmiştir.



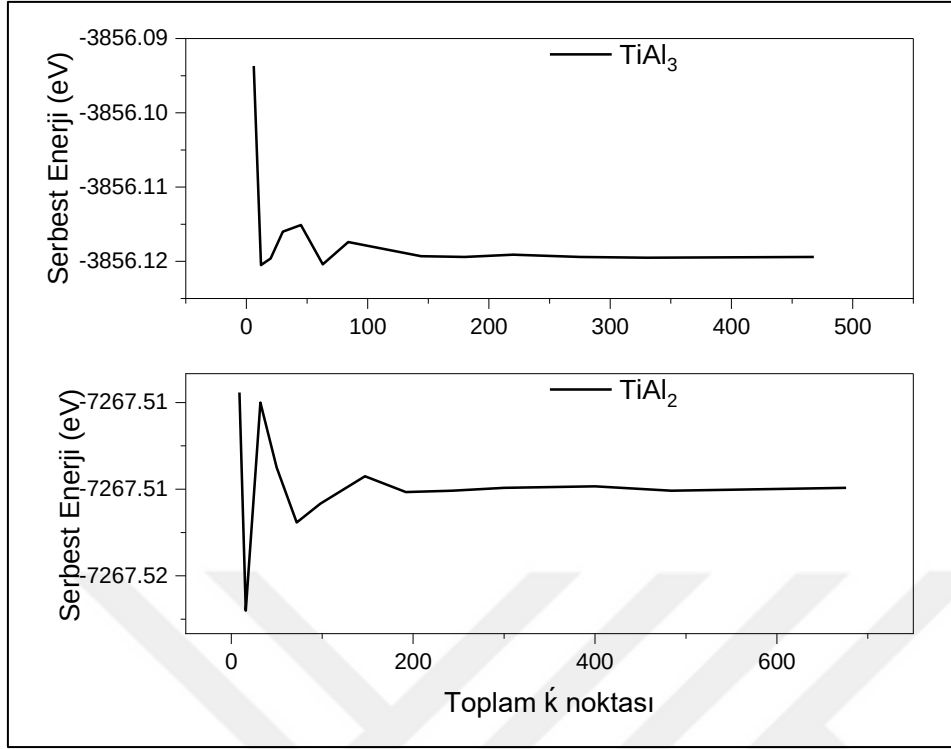
Şekil 4.1. Kesilim kinetik enerji-serbest enerji grafiği

Parametre optimizasyon çalışmalarının ikinci kısmında k noktalarının belirlenmesi çalışmaları yapılmıştır. TiAl_2 ve TiAl_3 intermetaliklerinin kesilim kinetik enerjilerinin 500 eV olarak belirlenmesiyle birlikte, çalışmada bu değer sabit tutulup farklı toplamdaki k noktalarına karşılık gelen kristalin toplam enerjisini hesaplanmıştır. k noktaları belirlenirken Brillouin bölgesinde çok noktada temsil edilmesi dikkate alınmıştır [112]. TiAl_2 ve TiAl_3 intermetalikleri için toplam k noktalarına karşılık gelen sistem serbest enerji değerleri Çizelge 4.2’de verilmiştir.

Çizelge 4.2. TiAl_2 ve TiAl_3 fazları için toplam k noktaları-serbest enerji değerleri

TiAl_2		TiAl_3	
Toplam k noktası	Serbest Enerji (eV)	Toplam k noktası	Serbest Enerji (eV)
9	-7267.5053	6	-3856.0937
16	-7267.5204	12	-3856.1205
32	-7267.5060	20	-3856.1196
50	-7267.5105	30	-3856.1160
72	-7267.5143	45	-3856.1151
98	-7267.5130	63	-3856.1204
147	-7267.5111	84	-3856.1174
192	-7267.5122	144	-3856.1193
243	-7267.5121	180	-3856.1194
300	-7267.5119	220	-3856.1191
400	-7267.5118	275	-3856.1194
484	-7267.5121	330	-3856.1195
676	-7267.5119	468	-3856.1194

Bu değerler göz önüne alınarak, aşağıda verilen kesilim kinetik enerjiye karşılık gelen serbest enerji grafiği (Şekil 4.2) çizilmiş ve 1×10^{-3} eV değerlerine yakınsadığı değerler TiAl_2 ve TiAl_3 fazları için uygun k noktaları olarak belirlenmiştir. Sonuç olarak TiAl_2 fazı için uygun k noktaları, $6 \times 18 \times 18$ olarak, TiAl_3 içinse $18 \times 18 \times 8$ belirlenmiştir.

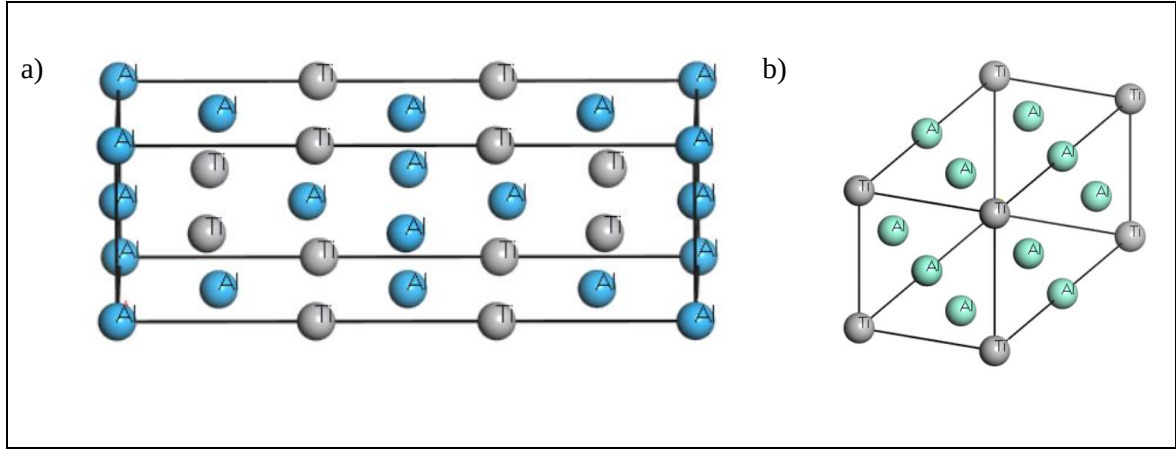


Şekil 4.2. Toplam k noktaları-Serbest Enerji grafiği

4.1.2. Parametrelerin doğrulanması

Optimize edilmiş parametreleri doğrulamak için tez çalışmasında kullanılacak olan TiAl_2 ve TiAl_3 fazlarının yapısal ve mekanik özellikleri CASTEP programı ile çalışılmış ve önceki çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Çalışmalara geometrik optimizasyon ile başlanmış ve sonrasında mekanik özellikleri bulabilmek amacıyla geometrik olarak optimize edilmiş yapının simülasyonu yapılmıştır.

Doğrulama çalışmalarında TiAl_2 için 500 eV kesilim kinetik enerjisi ve $6 \times 18 \times 18$ k noktaları, TiAl_3 içinse 500 eV kesilim kinetik enerjisi ve $18 \times 18 \times 8$ k noktaları kullanılmıştır. Çalışmada, ultrasoft pseudopotensiyeller kullanılmış olup, SCF tolerans değeri 5×10^{-7} eV/atom olarak alınmıştır. Kullanılan geometrik yapıların görselleri Resim 4.1’de verilmiştir.



Resim 4.1. a) TiAl₂ Kristal yapısı- Cmmm (65) b) TiAl₃ Kristal yapısı- I4/mmm (139)

Geometri optimizasyon simülasyonu sonunda elde edilen değerler Çizelge 4.3'te verilmiştir.

Çizelge 4.3. TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının yapısal özellikleri

Faz	Çalışma	a (Å)	b (Å)	c (Å)	Serbest Enerji (kJ/mol)	Entropi (kJ/mol)	Oluşum Entalpisi (kJ/mol)
TiAl ₂	Bu Çalışma	12.1646	39.361	4.0112	-39.92	1.71	-38.2
	teo.[113]	12.164	3.936	4.011			-41.1
	Bu Çalışma	3.8491		8.6314	-38.02	1.64	-36.38
TiAl ₃	teo.[113]	3.8490		8.6320			-38.21
	deney.[114]	4.04		8.75	-35.06		-36.8

Geometrik optimizasyon sonunda elde edilen yapısal ve MAAT yazılımıyla [115] elde edilen termodinamik değerler literatürdeki önceki teorik ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen değerlerin önceki çalışmadaki bulgularla [113,114] mükemmel bir uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının mekanik olarak özelliklerinin ortaya konulması amacıyla CASTEP programı yardımıyla mekanik özelliklerin hesaplanması yapılmış olup sonuçlar Çizelge 4.4'te verilmiştir. Bu hesaplamada optimize edilmiş parametreler kullanılmıştır.

Çizelge 4.4. TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının elastik sabitleri

Faz	Çalışma	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₁₃ (GPa)	C ₂₂ (GPa)	C ₂₃ (GPa)	C ₃₃ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	C ₅₅ (GPa)	C ₆₆ (GPa)
TiAl ₂	Bu Çalışma	207.1	56.9	60.9	197	68.9	187.4	94.3	96.3	78.9
	teo.[113]	211.2	60.2	60.3	201.2	68	188.9	94.4	96.5	81.7
	Bu Çalışma	191	83.7	43.5			215.1	93		125.3
TiAl ₃	teo.[113]	195.6	87.4	46.1			219.7	93.9		128.2
	deney.[116]	217.7	57.7	45.5			217.5	92		116.5

Born-Huang latis dinamik teorisine göre [117], bir fazın mekanik olarak kararlılık göstermesi için aşağıdaki kriterleri [118–120] sağlaması gerekmektedir.

TiAl₂ (Ortorombik kristal yapısı) için

$$C_{11} + C_{12} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23} > 0, C_{11} + C_{22} > 2C_{12}, C_{11} + C_{33} > 2C_{13}, C_{22} + C_{33} > 2C_{23}, C_{ij} > 0 \text{ (i=1-6)} \quad (4.1)$$

TiAl₃ (Tetragonal yapısı) için;

$$C_{44} > 0, C_{66} > 0, C_{11} > [C_{12}], (C_{11} + C_{12})C_{33} > 2C_{13}^2 \quad (4.2)$$

Elde edilen elastik sabitlerin önceki teorik ve deneysel çalışmalar [113,116] ile mükemmel bir uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

Elastik sabitlerin bulunmasının ardından TiAl₂ ve TiAl₃ fazları için Voight, Reuss ve Hill (VRH) yaklaşımı ile bulk modülü (B), kesme modülü (G), elastisite modülü (E) ve poisson's oranı (ν), anizotropi (A^u) ve sertlik (H_{Tian}) değerleri aşağıdaki formüller [120,121] ile hesaplanmış olup, değerler Çizelge 4.5'te verilmiştir. Ayrıca, bir bileşiğin süneklik göstergesi olan Pugh (B/G) oranında [122] 1.75 altı kırılğan, 1.75 üstü ise sünek kabul edilmektedir.

$$B_{VRH} = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (4.3)$$

$$G_{VRH} = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (4.4)$$

$$E = \frac{9 B_{VRH} G_{VRH}}{3B_{VRH} + G_{VRH}} \quad (4.5)$$

$$\nu = \frac{3 B_{VRH} - 2G_{VRH}}{2 (3B_{VRH} + G_{VRH})} \quad (4.6)$$

$$A^U = 5 \frac{G_V}{G_R} + \frac{B_V}{B_R} - 6 \quad (4.7)$$

$$H_{Tian} = 0.92k^{1.137}G^{0.708} \quad (4.8)$$

Çizelge 4.5. TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının mekanik özellikleri

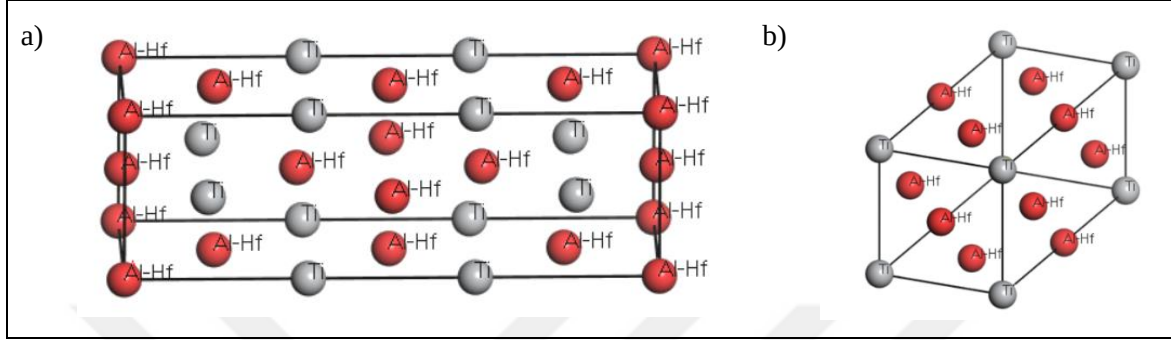
Alaşıım	Çalışma	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)	B/G	ν	A ^U	H _{Tian} (GPa)
TiAl ₂	Bu Çalışma	107.2	79.8	191.7	1.34	0.202	0.143	14.6
	teo.[113]	108.6	81	194.7	1.34	0.201	0.126	15.6
	Bu Çalışma	104.2	87.4	204.9	1.19	0.172	0.392	17.8
TiAl ₃	teo.[113]	103.9	87.4	204.7	1.19	0.171	0.383	19.3
	deney.[116]	105.6	93	208.5	1.14	0.16		

Hesaplanan mekanik değerlerin önceki teorik ve deneysel çalışmalar [113,116] ile mükemmel bir uyum içerisinde olduğu görülmüştür. Küçük sapmaların, kullanılan diğer hesaplama metotları, farklı simülasyon programları k noktaları ve kesilim kinetik enerji değerlerinden kaynaklanabileceği yorumu yapılmıştır. İkili fazlar değerlendirildikten sonra, havacılık ve uzay sanayinde kullanılmak üzere üretilmesi düşünülen parçalar için TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının diğer elementler (Hf, Zr ve Nb) ile teorik alaşımlama çalışmalarına geçilmiştir.

4.2. Hafniyum (Hf) Elementinin TiAl₂ ve TiAl₃ İntermetaliklerine olan Etkisinin İncelenmesi

Ti, Al, Hf atom yarıçapları sırasıyla 1.76, 1.18, 2.08 Å'dur. Aradaki oran 0.59'tan büyük olduğu için aralarında katı çözeltili oluşturma ihtimalleri yüksektir. Hf yüksek erime noktasına sahip olduğu için tane sınırı iyileştirici etkisi göstermesi beklenmektedir. Hf eklenmesi ile mukavemetin artacağı öngörülmektedir. Ancak, süneklikte azalma olması beklenmektedir. Literatürde VCA metoduyla TiAl₃ ve TiAl₂ 'ye Hf ilavesi içeren bir çalışmaya rastlanılmamıştır. Bu yüzden katma değeri olacak bir element olarak değerlendirilmiştir [123]. Ti-Al faz diyagramına göre TiAl₂ fazının bileşimi ağırlıkça % Ti

49-Al 51 ve saf $TiAl_3$ (bundan sonra $TiAl_3$ olarak belirtilmiştir) fazı ise ağırlıkça % Ti 38 - Al 62'den oluşmaktadır. Bu sebeple, Hf katkılı $TiAl_2$ alaşımları ağırlıkça $Ti-(51-x)Al-xHf$ ($x = \% 0 - 4.0$) olarak, Hf katkılı $TiAl_3$ ise ağırlıkça $Ti-(62-x)Al-xHf$ ($x = \% 0-4.0$) olarak tasarlanmıştır. Çalışılmış kristal yapılar Resim 4.2'de verilmiştir.

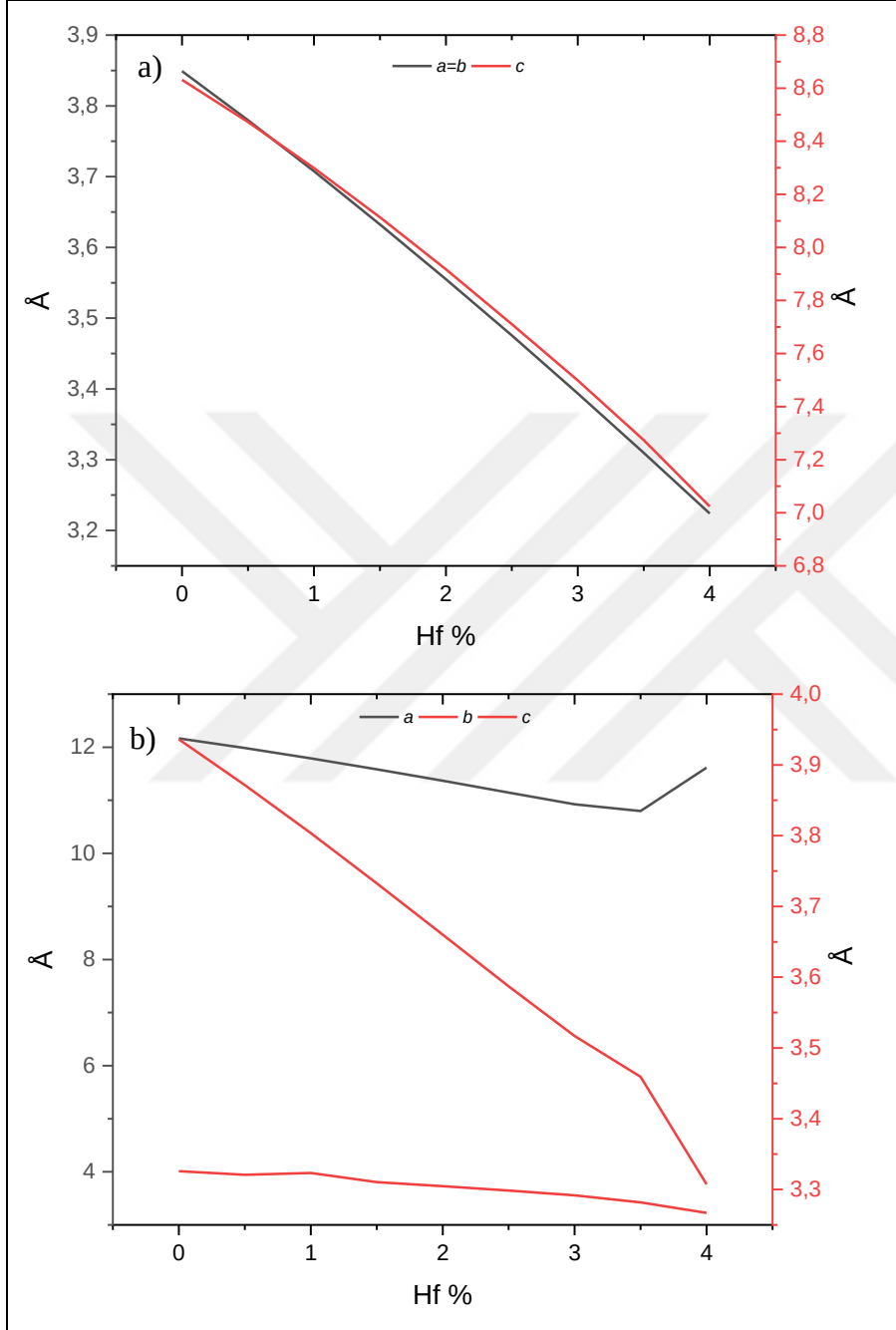


Resim 4.2 a) $Ti-(51-x)Al-xHf$ ve b) $Ti-(62-x)Al-xHf$ alaşımları kristal yapıları

Çizelge 4.6. $Ti-(51-x)Al-xHf$ ve $Ti-(62-x)Al-xHf$ alaşımları için hesaplanmış kafes parametreleri ve termodinamik özellikler $Ti-(51-x)Al-xHf$ ve $Ti-(62-x)Al-xHf$

Alaşım	Ağırlıkça Hf %	a (Å)	b (Å)	c (Å)	Serbest Enerji (kJ/mol)	Entropi (kJ/mol)	Oluşum Entalpisi (kJ/mol)
$Ti-(51-x)Al-xHf$	0	12.1646	3.9361	4.0112	-39.92	1.71	-38.20
	teo.[113]	12.164	3.936	4.011			-41.10
	0.5	11.9842	3.8714	3.9455	-40.17	1.78	-38.38
	1.0	11.7897	3.8036	3.9769	-40.38	1.83	-38.54
	1.5	11.5833	3.7327	3.8045	-40.56	1.88	-38.67
	2.0	11.3675	3.66	3.7284	-40.71	1.92	-38.79
	2.5	11.1453	3.5871	3.6471	-40.85	1.96	-38.88
	3.0	10.9238	3.517	3.5556	-40.96	1.99	-38.96
	3.5	10.7986	3.4593	3.4234	-41.05	2.03	-39.01
	4.0	11.6147	3.3075	3.225	-41.11	2.06	-39.05
$Ti-(62-x)Al-xHf$	0	3.8491		8.6314	-38.02	1.64	-36.38
	teo.[113]	3.849		8.632			-38.21
	deney.[114]	4.04		8.75	-35.06		-36.80
	0.5	3.7798		8.4727	-38.48	1.71	-36.76
	1.0	3.7077		8.2991	-38.89	1.77	-37.12
	1.5	3.6323		8.1138	-39.28	1.82	-37.46
	2.0	3.5549		7.9173	-39.64	1.86	-37.78
	2.5	3.4756		7.7112	-39.98	1.90	-38.07
	3.0	3.3936		7.4989	-40.29	1.94	-38.35
	3.5	3.3097		7.2739	-40.59	1.97	-38.61
	4.0	3.2241		7.0241	-40.86	2.01	-38.84

Çizelge 4.6’da bulunan sonuçlar literatürdeki sonuçlar [113,114] ile uyumludur ve hata oranı 1 %’den az olarak gerçekleşmiştir.

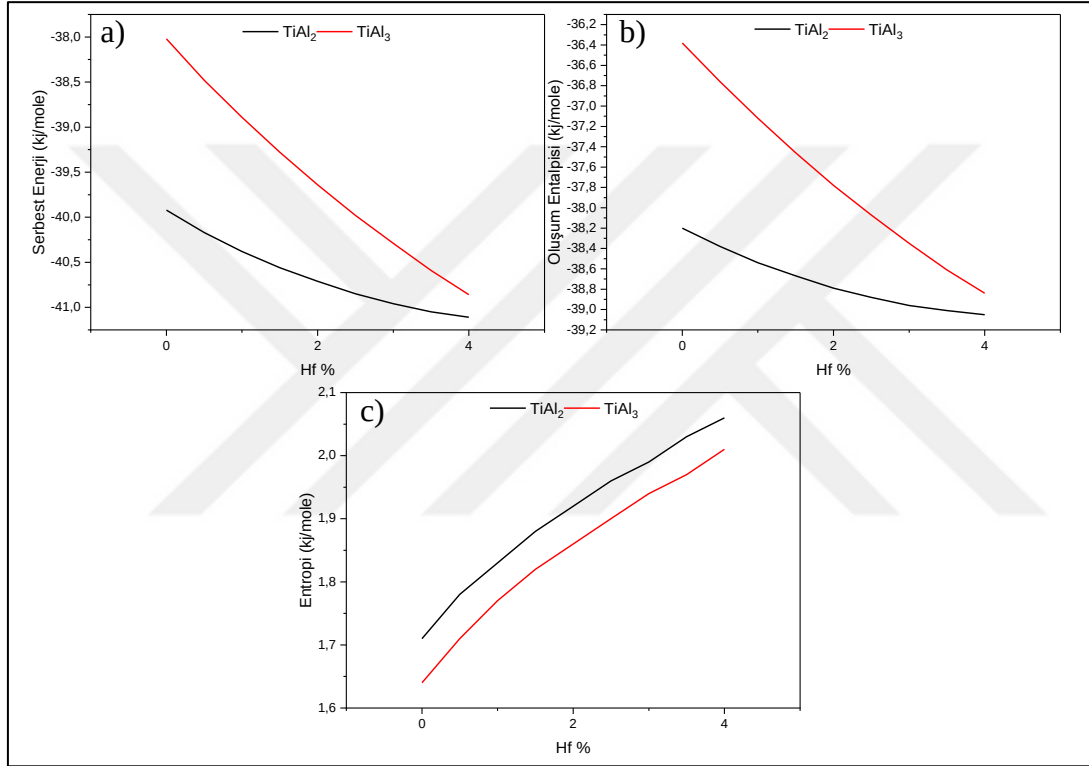


Şekil 4.3. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b)Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının kafes parametrelerinin Hf katkısı ile değişimi

Şekil 4.3’te görüleceği üzere Hf katkısı Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının kafes parametrelerinde düşüşe yol açmıştır. Bunun sebebi Hf ve Al elementleri arasındaki atomik çaplarındaki farklılıktır. Song [67] tarafından yapılan araştırmalarda Hf katkısının kafes parametresini düşürdüğü gözlenmiştir. Ayrıca, Muellauer [77] tarafından yapılan

deneysel çalışmada atomik olarak % 2 ve 5 katkılı Ti-49Al ve Ti-51Al alaşımlarında kafes parametrelerinde düşüş gözlenmiştir. Sonuç olarak, elde edilen sonuçlar literatürdeki çalışmalarla uyum içerisindedir.

Alaşımların termodinamik kararlılığına ise Serbest enerji, entropi ve oluşum entalpileri bulunarak karar verilmiştir. Termodinamik özellikler, Miedema [124] ve Bakker[125] modellerini kullanan MAAT yazılımı ile hesaplanmıştır.



Şekil 4.4. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri

Saf haldeki TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının termodinamik değerleri literatürdeki teorik ve deneysel bulgularla uyumludur [113,116]. Şekil 4.4 ve Çizelge 4.6’da gösterildiği üzere, Hf katkısı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının entalpilerini ve serbest enerjilerini düşürmektedir. Diğer tarafta ise, Hf içeriği arttıkça entropi değerleri de artmaktadır. Tüm bu termodinamik değerler, Hf ilavesinin TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarını daha kararlı hale getirdiğini göstermektedir.

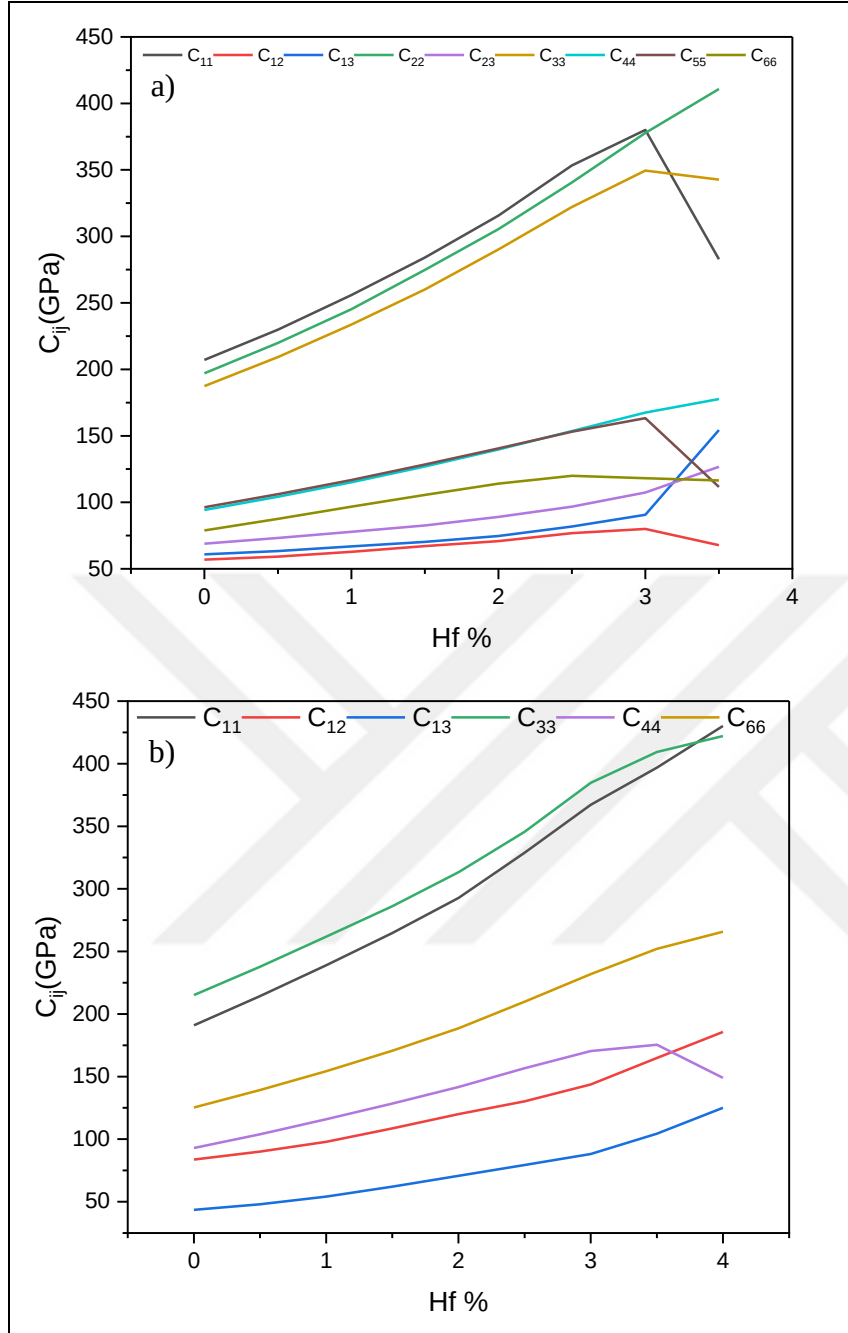
Hf katkısının mekanik özelliklere olan etkisini görmek amacıyla hem katkısız hem de Hf katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımları çalışılmıştır. Çizelge 4.7’de sunulan TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının mekanik değerlerinin literatürdeki önceki sonuçlarla [113,116] uyumlu olduğu

görülmüştür. Elastik sabitler ve mekanik kararlılık arasındaki ilişki, Born-Huang teorisi [117] ile incelenmiş ve alaşımların kararlı olduğu bulunmuştur.

Çizelge 4.7. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımları için hesaplanmış elastik sabitler

Alaşım	Ağırlıkça Hf %	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₁₃ (GPa)	C ₂₂ (GPa)	C ₂₃ (GPa)	C ₃₃ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	C ₅₅ (GPa)	C ₆₆ (GPa)
Ti-(51-x)Al-xHf	0	207.1	56.9	60.9	197.0	68.9	187.4	94.3	96.3	78.9
	teo.[113]	211.2	60.2	60.3	201.2	68.0	188.9	94.4	96.5	81.7
	0.5	229.8	59.2	63.4	219.9	73.2	209.2	104.2	106.1	87.6
	1.0	255.9	62.8	66.9	245.3	77.8	233.7	115.1	116.8	96.8
	1.5	284.1	67.1	70.3	274.8	82.6	260.1	127.0	128.4	105.6
	2.0	315.7	70.8	74.7	305.5	89.0	290.2	139.8	140.5	114.1
	2.5	353.3	76.8	81.8	340.6	96.8	322.1	153.6	153.1	120.0
	3.0	380.1	80	90.6	377.8	107.4	349.5	167.5	163.3	118.1
	3.5	282.8	67.8	154.4	410.8	126.7	342.7	177.7	111.6	116.4
	4.0	170.8	110.8	50.1	437.5	38.3	396.3	171.9	< 0	170.7
Ti-(62-x)Al-xHf	0	191.0	83.7	43.5			215.1	93.0		125.3
	teo.[116]	195.6	87.4	46.1			219.7	93.9		128.2
	deney.[126]	217.7	57.7	45.5			217.5	92.0		116.5
	0.5	214.3	90.1	48.0			237.8	103.9		139.2
	1.0	239.0	97.9	54.1			261.8	115.9		154.3
	1.5	264.7	108.6	62.1			286.1	128.4		170.6
	2.0	292.7	120.0	70.7			313.3	141.6		188.6
	2.5	328.9	130.2	79.4			345.6	156.7		209.8
	3.0	367.1	143.7	88.1			384.7	170.4		231.9
	3.5	396.9	164.9	104.4			409.3	175.5		252.1
	4.0	430.2	185.7	125.1			422.1	149.0		265.8

Çizelge 4.7 ve Şekil 4.5'ten görülebileceği üzere, Ti-(62-x)Al-xHf bileşikleri için elastik sabitler ağırlıkça % 4 Hf 'a kadar Born kriterini karşılamaktadır. Bununla birlikte, Ti-(51-x)Al-xHf bileşikleri, ağırlıkça % 3.5 Hf 'a kadar mekanik olarak kararlıdır. Hf konsantrasyonu ağırlıkça % 4 olduğunda Ti-(51-x)Al-xHf bileşiği için C₅₅ elastik sabiti negatiftir. Çizelge 4.7'de verildiği üzere, mekanik özellikler %4 Hf katkılı TiAl₂ bileşiği hesaplanmamış ve bu noktadan sonra gösterilmemiştir.



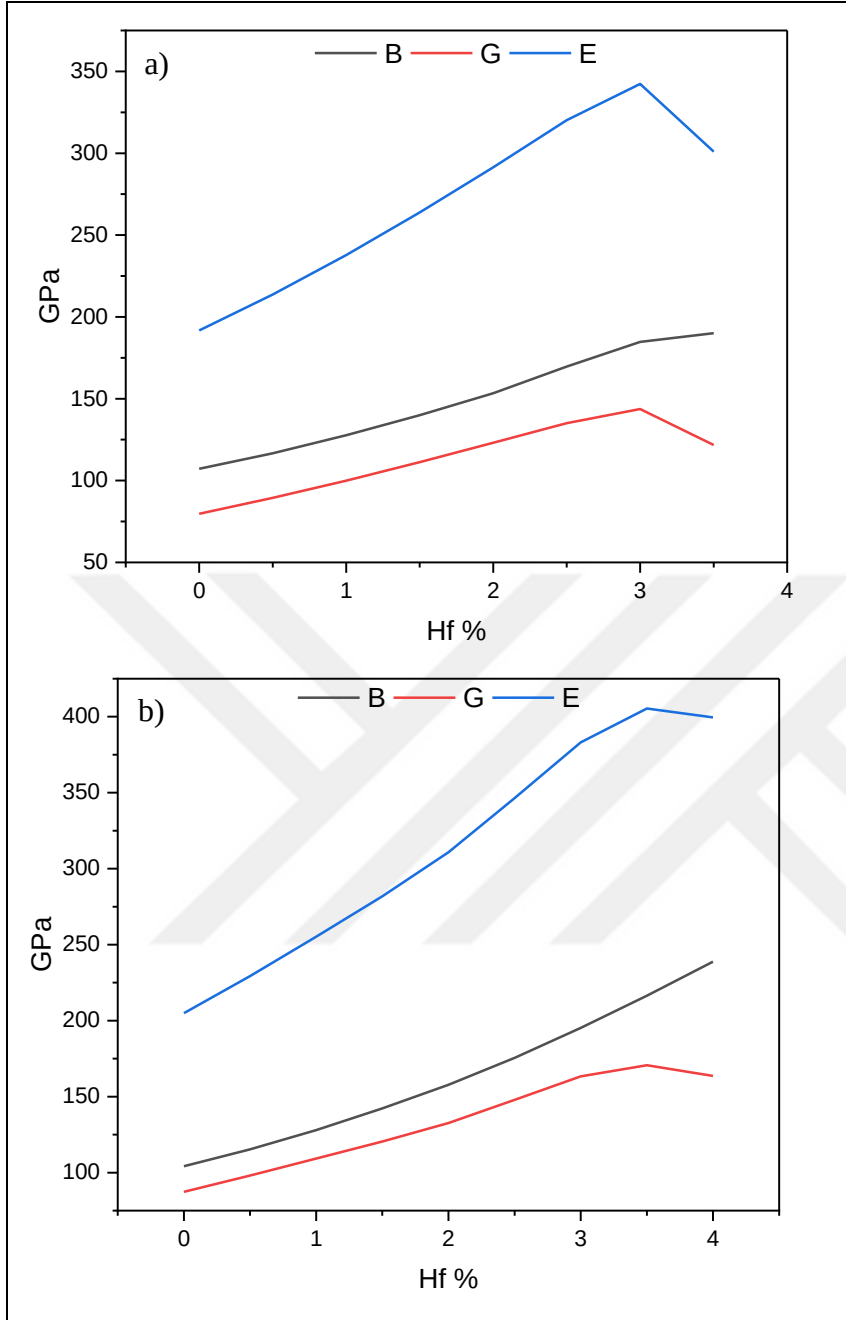
Şekil 4.5. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b) Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının elastik sabitlerinin Hf %'ne göre değişimi

Hf elementinin Ti-(51-x)Al-xHf alaşımları üzerindeki etkisinin aksine, Hf katkılı Ti-(62-x)Al-xHf bileşiklerinde elastik sabitleri (C_{44} elastik sabiti hariç) ağırlıkça % 4 Hf'a kadar artmaktadır. Şekil 4.6 ve Çizelge 4.8, Hf katkılı TiAl_2 ve TiAl_3 alaşımlarının elastik modülleri hakkında bilgi vermektedir. Bulk (B), kesme (G) ve elastisite (E) modülleri, Voight-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımına göre hesaplanmıştır [127].

Çizelge 4.8. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının hesaplanmış mekanik özellikleri

Alaşım	Ağırlıkça Hf %	B (GPa)	G (GPa)	E (GPa)	B/G	ν	A^U	H_{Tian} (GPa)
Ti-(51-x)Al-xHf	0	107.2	79.8	191.7	1.34	0.202	0.143	14.6
	teo.[113]	108.6	81.0	194.7	1.34	0.201	0.126	15.6
	0.5	116.7	89.5	213.7	1.30	0.195	0.117	16.4
	1.0	127.8	100.0	237.8	1.28	0.190	0.096	18.1
	1.5	139.9	111.3	263.8	1.26	0.186	0.080	19.9
	2.0	153.4	123.2	291.4	1.25	0.183	0.069	21.7
	2.5	169.7	135.1	320.2	1.26	0.185	0.069	22.9
	3.0	184.8	143.7	342.3	1.29	0.191	0.100	23.3
	3.5	190.1	121.8	301.0	1.56	0.236	0.478	16.6
	0	104.2	87.4	204.9	1.19	0.172	0.392	17.8
Ti-(62-x)Al-xHf	teo.[113]	103.9	87.4	204.7	1.19	0.171	0.383	19.3
	deney.[116]	105.6	93.0	208.5	1.14	0.160		
	0.5	115.4	98.1	229.3	1.18	0.169	0.350	19.7
	1.0	128.0	109.3	255.2	1.17	0.168	0.329	21.3
	1.5	142.2	120.5	281.8	1.18	0.170	0.331	22.6
	2.0	157.8	132.7	310.8	1.19	0.172	0.331	24.0
	2.5	175.6	147.9	346.5	1.22	0.179	0.303	26.0
	3.0	195.3	163.3	383.1	1.20	0.173	0.284	27.7
	3.5	216.5	170.7	405.4	1.27	0.188	0.320	26.7
	4.0	238.9	163.6	399.6	1.46	0.221	0.359	22.1

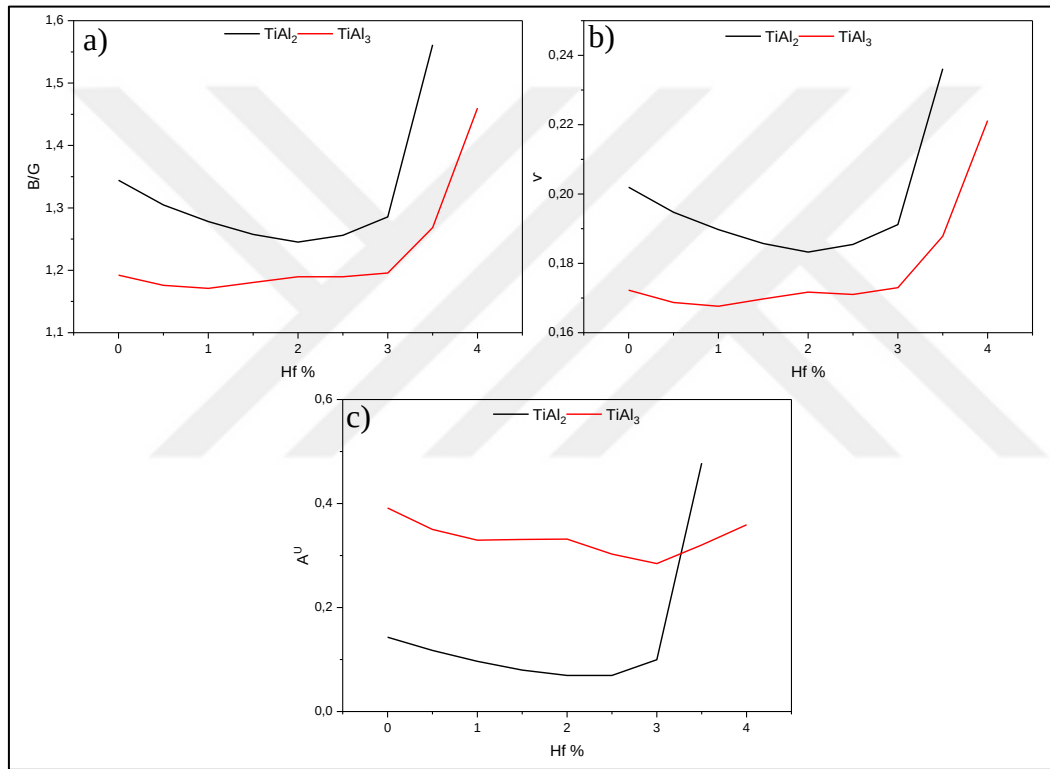
Ti-(51-x)Al-xHf ağırlıkça ($x = \% 0 - 3.5$) ve Ti-(62-x)Al-xHf ($x = \% 0 - 4.0$) için elastik modül grafiklerine bakıldığında, Hf ilavesinin elastik modülleri önemli ölçüde iyileştirdiği anlaşılmaktadır. Her iki bileşik de üç önemli elastik modül (B, G ve E) aynı eğilimi göstermektedir. Bulk modülü (B), her iki bileşik için de artan % Hf içeriği ile artmıştır. Elastisite modülü, Ti-(51-x)Al-xHf için Hf içeriği ağırlıkça %3 ve Ti-(62-x)Al-xHf bileşikleri için ağırlıkça % 3.5 olduğunda katkısız hallerine kıyasla yaklaşık iki kat artmıştır. Bu değerlerden sonra elastisite modül değerlerinde hafif bir düşüş görülmektedir. Aynı durum her iki bileşiğin kesme modülü için de gözlenmektedir.



Şekil 4.6. a) Ti-(51-x)Al-xHf ve b) Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının elastik modüllerinin Hf %'ne göre değişimi

Süneklik, malzemelerin imalat kabiliyetini etkileyen önemli bir parametredir. Pugh oranı (B/G) [122], bir malzemenin sünek-kırılgan davranışını tahmin etmek için kullanılır. B/G oranı değeri 1,75'ten büyük ise malzeme sünek, küçük olduğu durumlarda ise kırılgan olarak kabul edilir. Hf katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının süneklik davranışı Şekil 4.7'de verilmiştir. Şekil 4.7'den anlaşılacağı üzere, tüm değerler kritik değerden düşük olduğu için her iki alaşım da kırılgan davranış göstermektedir. Bununla birlikte, ağırlıkça %3'ten fazla Hf ilavesi, alaşımların B/G oranını önemli ölçüde artırmaktadır. Bu olgunun fiziksel nedeni,

alaşımlamada meydana gelen atomlar arasındaki etkileşimlerin yanı sıra atomik ve elektronik yeniden düzenlenme ile ilgilidir. B/G oranı, literatürde verildiği üzere, bulk modülünün bağ kuvvetine ve kesme modülünün bağ açılarının değiştirilmesine karşı dirence karşılık geldiği yönsel bağın derecesini belirtir [128]. Hf konsantrasyonu ağırlıkça 3 %'den fazla olduğunda, elastik modüllerin önce artış hızı azalmakta daha sonra da modül değerleri azalmaktadır. Bu nedenle, bu kompozisyonlarda yüksek Poisson oranının yanı sıra elastisite ve kesme modüllerinin düşük değerleri, daha zayıf ve daha az yönlü atomlar arası bağlanma ile ilişkilidir, dolayısıyla sünek davranış artmaya başlamıştır [129].

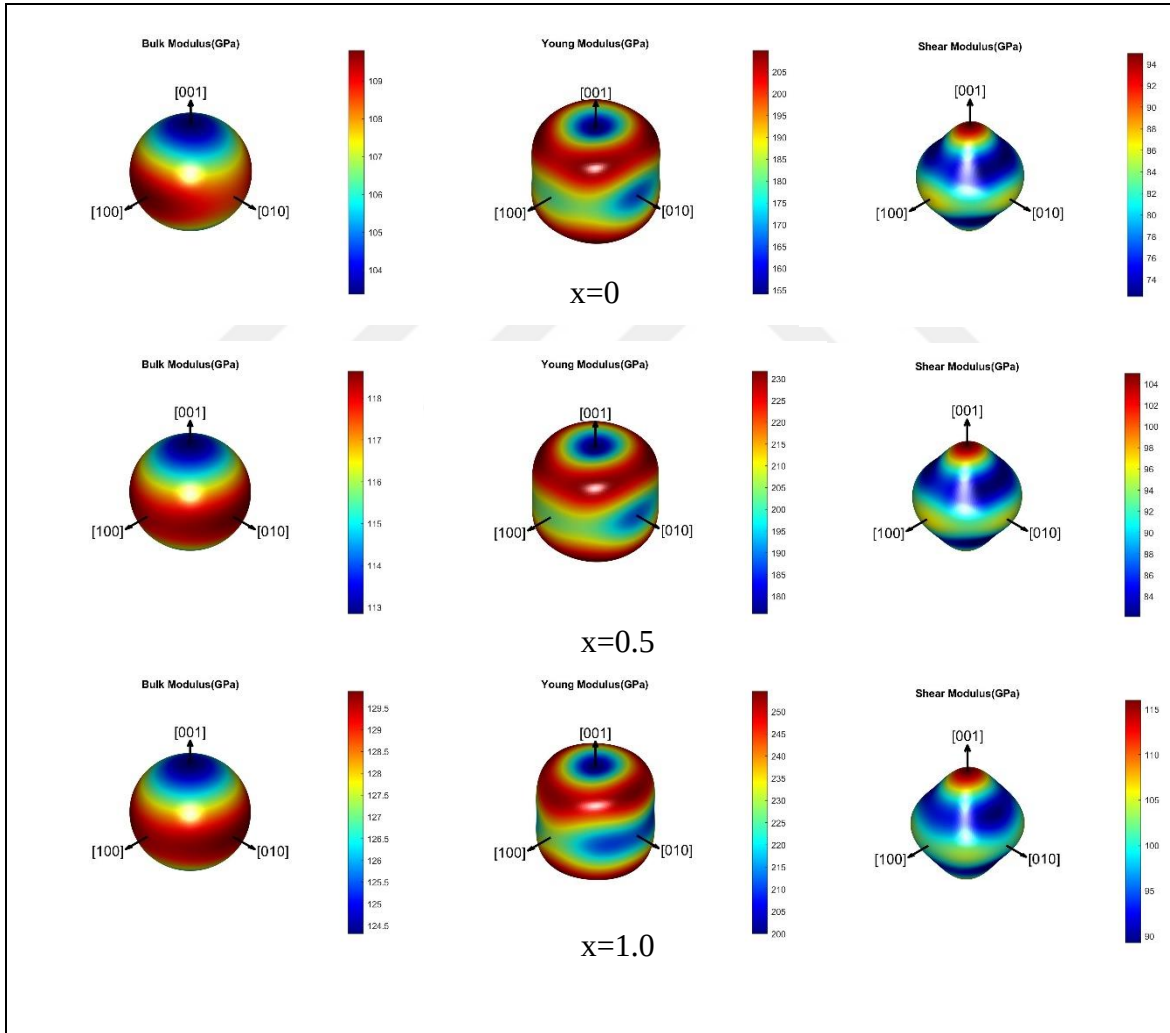


Şekil 4.7. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının a) B/G oranı b) ν ve c) anisotropi özelliklerinin Hf %'ne göre değişimi

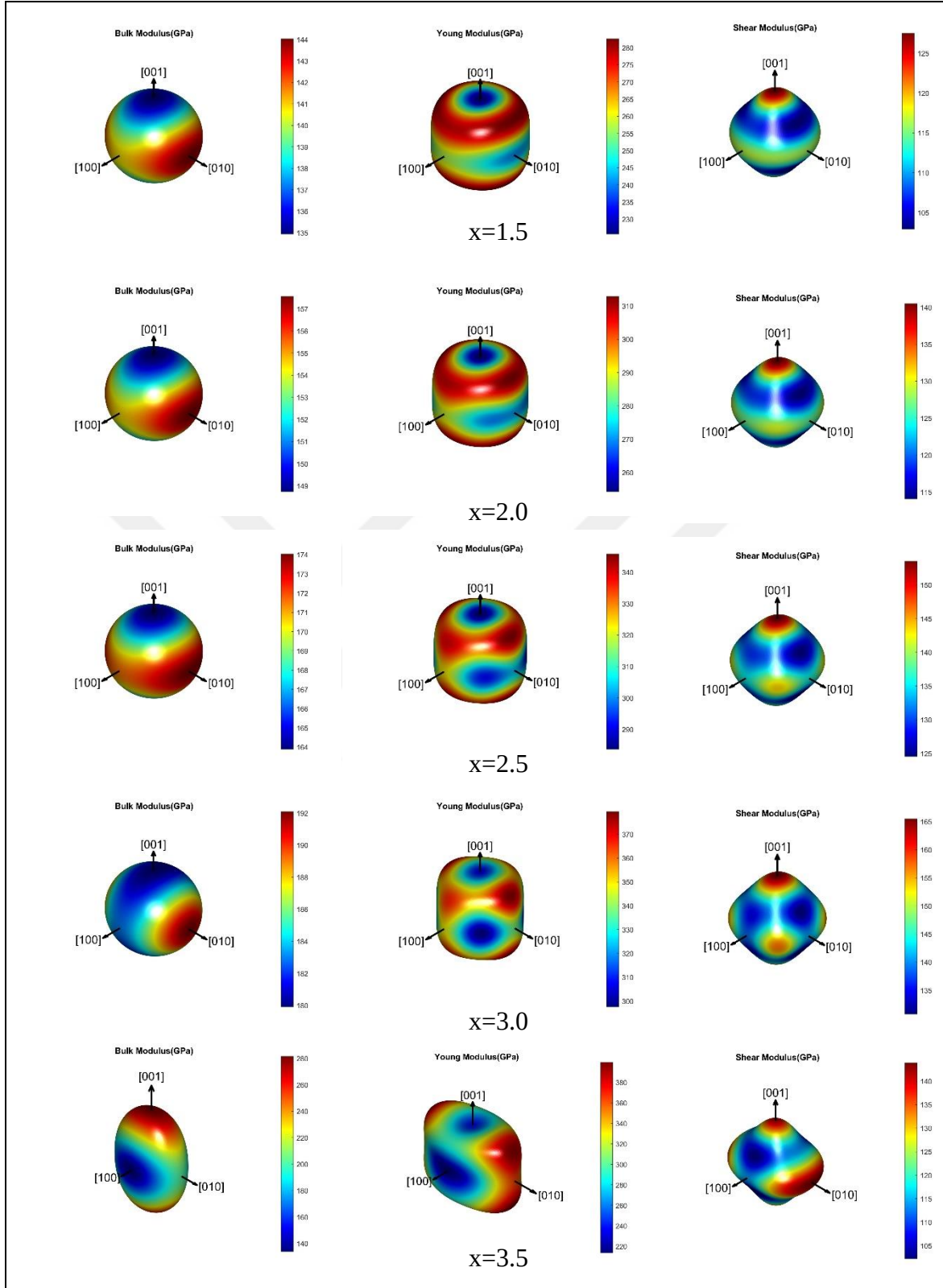
Poisson oranı, birçok metal ve alaşım için genellikle 0.25-0.50 arasında olan yanal ve eksenel gerinimlerin oranı olarak tanımlanır [130]. Ayrıca, Poisson oranı süneklik ile yakından ilişkilidir. ν 'nin kritik değeri, kırılman ve sünek fazlar için 0.26'dır. Poisson oranı değeri 0,26'dan büyükse malzeme sünek, küçükse kırılman davranış gösterir. Şekil 4.7'de görüleceği üzere, ν değerleri kritik değer olan 0,26'dan küçüktür. Hf konsantrasyonu ağırlıkça %3 'den fazla olduğu durumlarda ν değerleri artsa da Poisson oranı değerleri alaşımların kırılman davranışını göstermektedir.

Diğer bir önemli mekanik özellik ise elastik anizotropidir. Anizotropi kristallerdeki plastik deformasyon üzerinde geliştirici bir etkiye sahip olmasıdır [131].

Hesaplanan A^U değeri sıfırdan farklıysa malzeme anizotropik olarak tanınır. Hesaplanan değerler göz önüne alındığında, Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf bileşikleri anizotropik olduğu görülmüştür. Şekil 4.7'den anlaşılacağı üzere, Hf katkısının TiAl₃ intermetalik üzerinde az etkiye sahip olduğu, diğer yandan TiAl₂'nin elastik anizotropisinin ise Hf konsantrasyonunun ağırlıkça %3' ten fazla olduğu durumlarda önemli ölçüde etkilendiği gözlenmiştir.



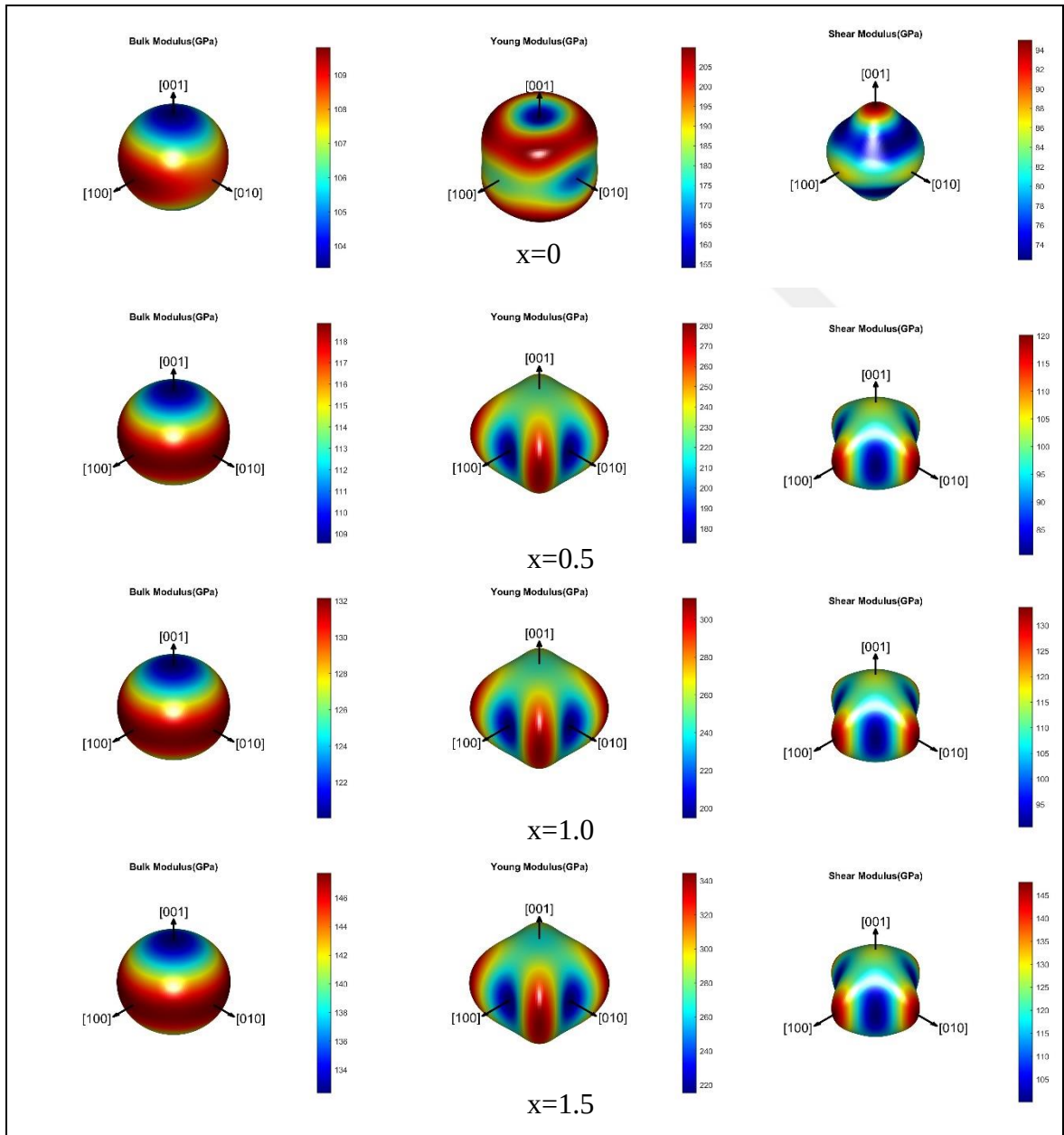
Resim 4.3. Ti-(51-x)Al-xHf alaşımlarının elastik modüllerinin 3B modellemesi



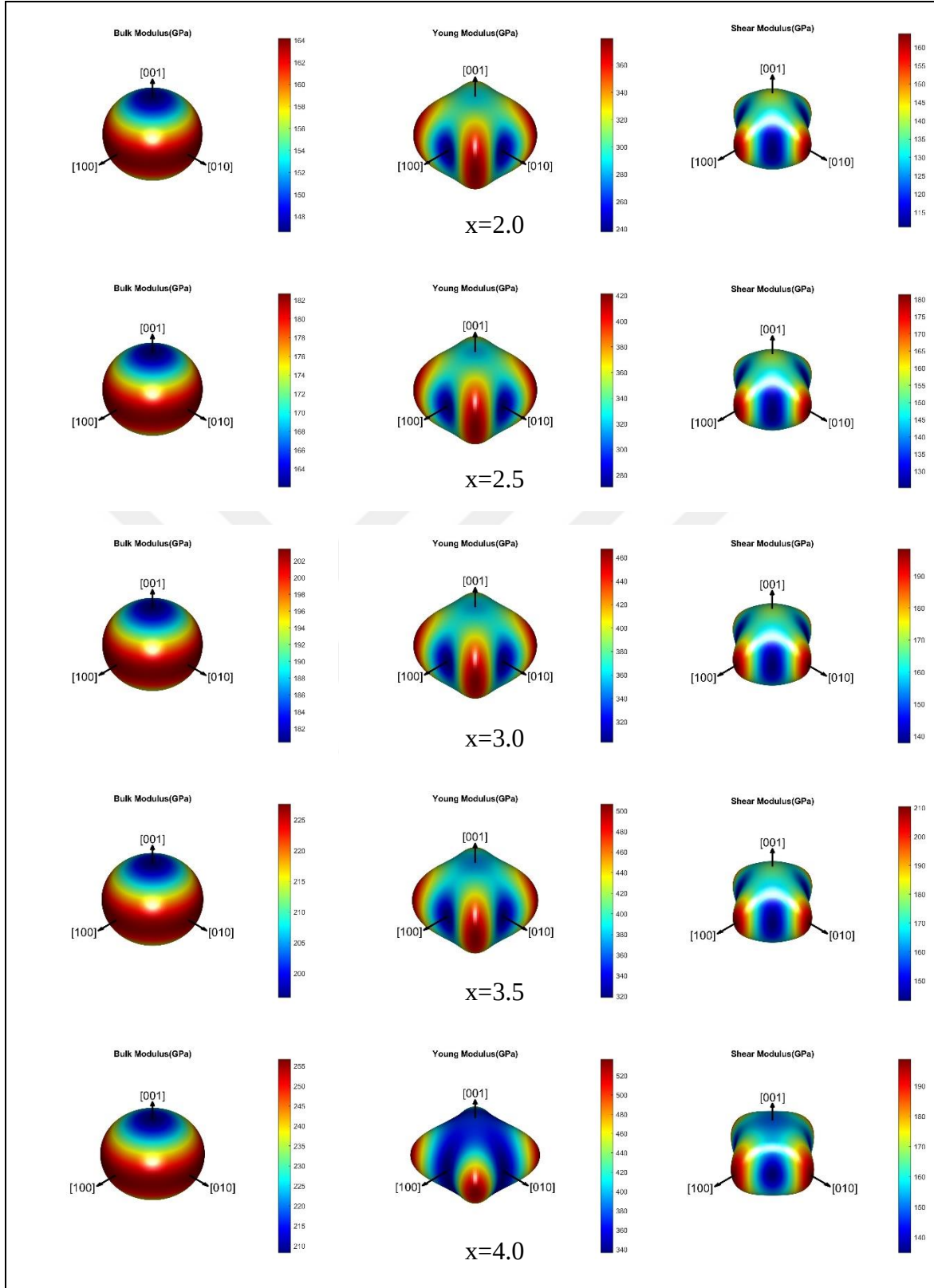
Resim 4.3. (devam) Ti-(51-x)Al-xHf alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

Bulk, elastisite ve kesme Modüllerinin yön bağımlılığı ElasticPOST kodu [132] ile görselleştirilmiştir. Mükemmel bir küre, izotropi anlamına gelirken, mükemmel küreden

sapma anizotropiyi göstermektedir. Resim 4.3'teki görseller incelendiğinde, TiAl_2 alaşımının bulk modülü $[100]$ yönünde yüksekken, Hf konsantrasyonu ağırlıkça %3'e kadar arttığında baskın yön $[010]$ yönü olmaktadır. Daha yüksek Hf konsantrasyonu, anizotropinin artmasına ve baskın yönün $[001]$ yönüne dönmesine neden olmaktadır. Bulk modülü, Hf ilavesinden büyük ölçüde etkilenmesine rağmen, elastisite modülü ve kesme modülü, bulk modülü kadar etkilenmemektedir. Elastisite modülü ve kayma modülleri arasındaki benzerlik ise, Hf konsantrasyonu ağırlıkça %3'ten yüksek olduğunda baskın yönün $[001]$ olmasıdır.



Resim 4.4. Ti-(62-x)Al-xHf alaşımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

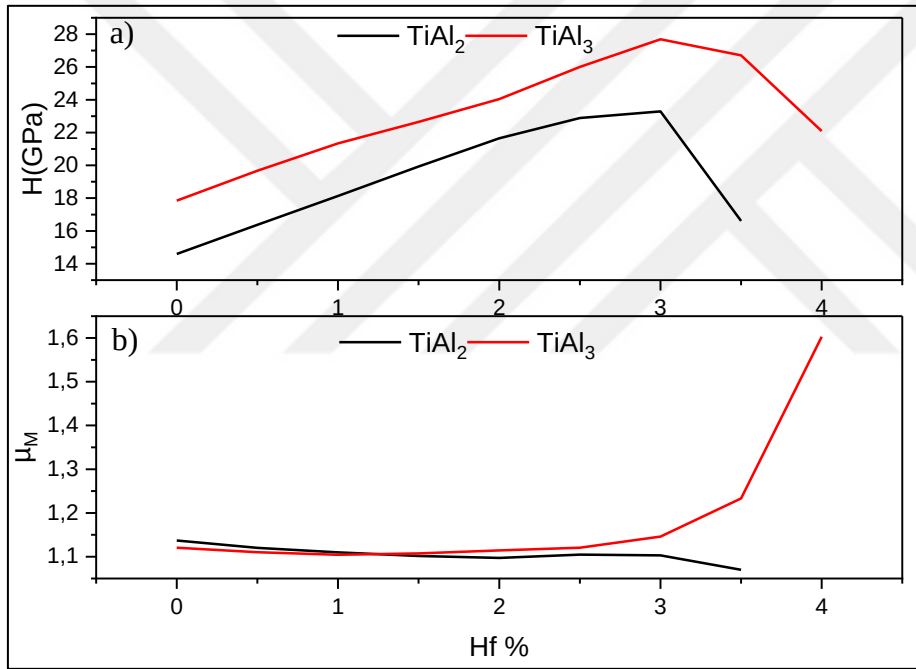


Resim 4.4. (devam) Ti-(62-x)Al-xHf alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

Resim 4.4'te verildiđi üzere Hf katkılı TiAl₃ elastik modüllerinin yön bağımlılığı, Hf katkılı TiAl₂ alařımları ile karşılaştırıldığında farklı bir eğilim gösterdiđi anlaşılmaktadır. Bulk

modülü [100] yönünde Hf katkısız faza göre daha yüksektir. Artan Hf içeriği, [010] yönünde de yüksek basma direnci göstermektedir. Kesme modülü analiz edildiğinde, Hf konsantrasyonunun kesme modülünü [100] ve [010] yönünde artırdığı, [001] yönünde azalttığı görülebilir. Ayrıca, elastisite modülünde Hf katkısı ile şekil bozulması net bir şekilde gözlenmektedir.

Malzemeler için önemli kabul edilen bir diğer mekanik özellik ise, bir malzemenin plastik deformasyona karşı gösterdiği direnç olan sertliktir. Ayrıca sertlik, elastik özelliklerle yakından ilişkilidir ve malzemelerin mekanik özelliklerini tanımlayan en yaygın özelliklerden biridir.



Şekil 4.8. Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf alaşımlarının Hf % değişimi ile a) Sertlik ve b) İşlenebilirlik indeksi değişimi

Şekil 4.8'den anlaşılabacağı üzere Hf katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ intermetaliklerinde Hf konsantrasyonu %3'e kadar artmaktadır. Bununla birlikte, ağırlıkça %3 'ten fazla Hf konsantrasyonu, bu alaşımların sertlik değerleri düşmektedir. Böylece, azalan sertlik değerleri sünekliğin artmasını sağlamaktadır.

Havacılık, uzay ve otomotiv gibi endüstrilerde işlenebilirlik indeksi, önemli bir rol oynar. Daha yüksek bir işlenebilirlik indeksi, endüstride tercih edilen temel noktalardan birdir. İşlenebilirlik indeksi aşağıdaki eşitlik [133] ile hesaplanabilir.

$$\mu_M = \frac{B}{C_{44}} \quad (4.9)$$

Denklemden yer alan bulk modülü (B) sıkıştırılabilirlik ölçüsü ile ilişkili olup, C_{44} sabiti ise kristalin kesme tepkisi [134,135]. Yüksek bulk modülü ve düşük C_{44} sabiti, daha iyi yağlama özelliklerini, daha düşük sürtünme değerlerini, daha düşük besleme kuvvetlerini ve daha yüksek plastik gerinmeyi göstermektedir [136–138]. Şekil 4.8'de gösterildiği üzere, hesaplanan sonuçlar, Ti-(51-x)Al-xHf ve Ti-(62-x)Al-xHf bileşiklerinin işlenebilirlik indekslerinin ağırlıkça %3 Hf 'a kadar hemen hemen aynı olduğunu göstermektedir. Hf içeriğinin ağırlıkça %3'ün üzerinde çıktığında ise % TiAl₃ alaşımını daha işlenebilir hale gelmektedir, bunu nedeni ise bulk modül değeri artış hızının, ağırlıkça %3.5 Hf değerinde hafifçe artan C_{44} değerine kıyasla daha yüksektir bununla beraber bu kompozisyonundan sonra azalmaktadır. Öte yandan, TiAl₂'nin işlenebilirlik indeksi ağırlıkça %3 Hf kompozisyonundan sonra azalmaktadır, çünkü C_{44} elastik sabit değeri, bulk modülünden daha fazla artış göstermektedir.

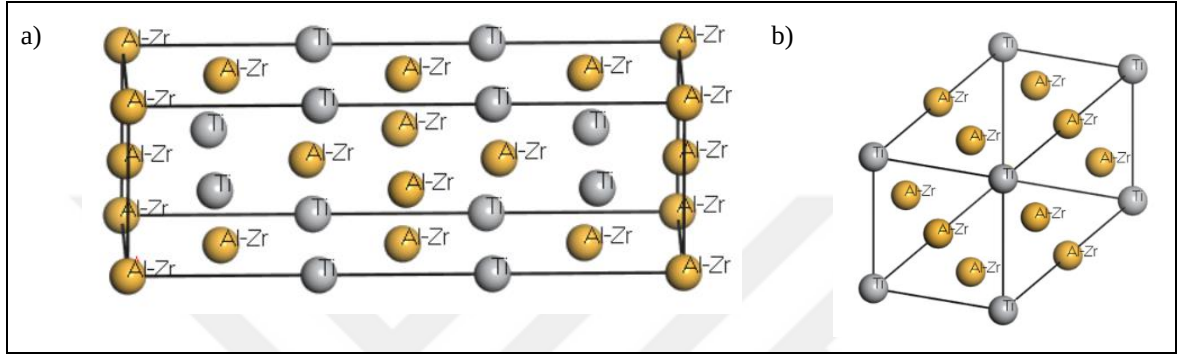
Hf katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının yapısal, elastik ve mekanik özellikleri ilk kez VCA yöntemi ile teorik olarak hesaplanmıştır. Geometrik olarak optimize edilmiş kafes parametreleri, önceki bulgularla iyi bir uyum içindedir. Oluşum entalpi sonuçları, Hf'nin ağırlıkça %2'den fazla eklendiğinde TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarını daha kararlı hale getirmektedir. Elastik sabitler ve elastik modüller, Hf ilavesi ile önemli ölçüde iyileştirilmiştir. Süneklik, % Hf konsantrasyonu ağırlıkça 2,5'tan yüksek olduğunda artmaktadır. TiAl₃ için ağırlıkça %3.5 Hf TiAl₂ alaşımları ise % 4 Hf katkısı bileşiklerde yüksek mukavemet ve süneklik kombinasyonu sağlamaktadır.

Özetlemek gerekirse, Hf ilavesi TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının mekanik özelliklerini iyileştirici rol oynamıştır.

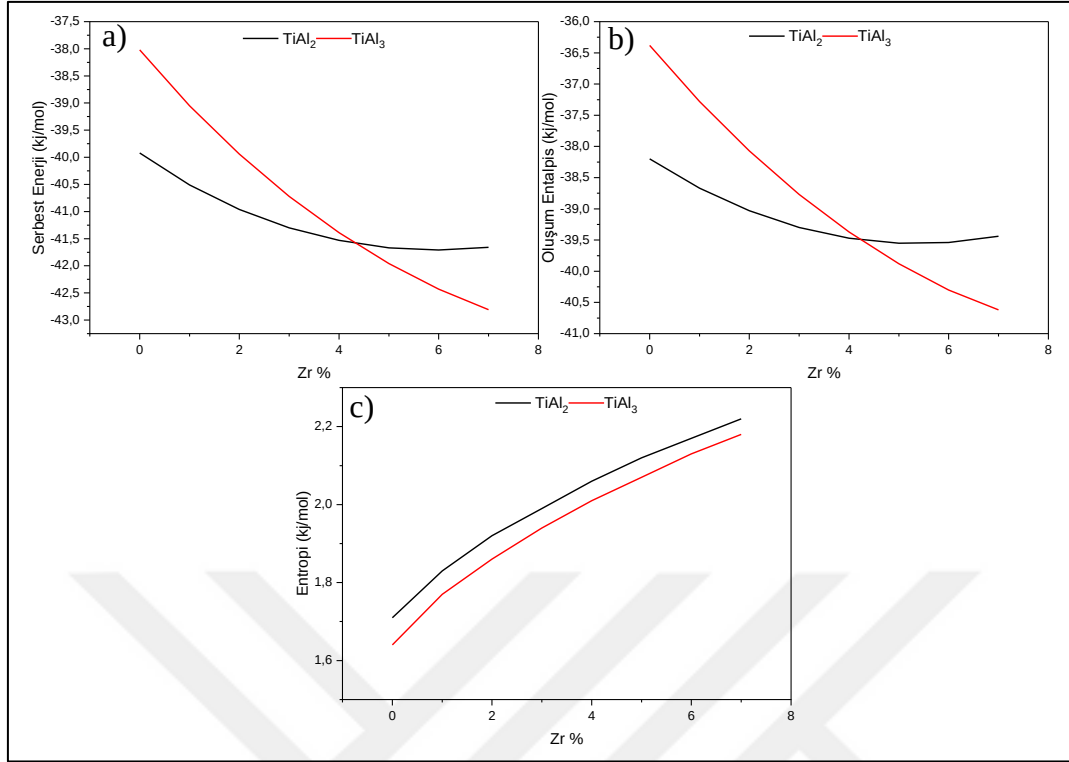
4.3. Zirkonyum (Zr) elementinin TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarına etkisinin incelenmesi

Bu kısımda Zr elementinin TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarına etkisi incelenecektir. Ti ,Al ve Zr atom yarıçaplarına bakıldığında (1.76, 1.18, 2.08 Å) aradaki oranın 0.59'tan büyük olduğu görülmektedir. Dolayısıyla, bu elementlerin oluşturacağı bileşiklerde katı çözültü oluşturma olasılıkları bulunmaktadır. Zr elementinin sünekliği ve mukavemeti arttırması beklenmektedir. Literatürde VCA metoduyla TiAl₃ ve TiAl₂ ara metalik fazlarına

Zirkonyum ilavesi içeren bir çalışmaya rastlanılmamıştır. Bu yüzden özgün bir çalışma olarak düşünülmüştür. Çalışmanın bu kısmında konu üzerine yazılan [139] makaleden esinlenilmiştir. Ti-Al faz diyagramına göre $TiAl_2$ fazının bileşimi ağırlıkça % Ti 49-Al 51 ve saf $TiAl_3$ fazı ise ağırlıkça % Ti 38 – Al 62 'dan oluşmaktadır. Bu sebeple, Zr katkılı $TiAl_2$ alaşımları $Ti-(51-x)Al-xZr$ ağırlıkça ($x = \% 0 - 7.0$) olarak, Zr katkılı $TiAl_3$ ise $Ti-(62-x)Al-xZr$ ağırlıkça ($x = \% 0 - 7.0$) olarak tasarlanmıştır (Resim 4.5).



Zr katkılı $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ intermetaliklerinin faz kararlılıkları, oluşum entalpisi, Gibbs serbest enerjisi ve entropi cinsinden hesaplanmıştır. Bu özellikleri hesaplamak için termodinamik (MAAT) yazılımı kullanılmıştır.



Şekil 4.9. Zr katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri

Katkısız haldeki TiAl₂ ve TiAl₃ intermetaliklerinin oluşum entalpi değerleri önceki çalışmalarla iyi bir uyum içindedir. Şekil 4.9 ve Çizelge 4.9'da görüleceği üzere, Zr ilavesi TiAl₂ ve TiAl₃ intermetaliklerinin oluşum entalpilerini ve Gibbs serbest enerjilerini düşürüp, entropi değerlerini de arttırmaktadır. Bu sonuçlar, Zr ilavesinin TiAl₂ ve TiAl₃ intermetaliklerini daha kararlı hale getirdiğini göstermektedir.

Çizelge 4.9. Zr katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ fazlarının hesaplanmış termodinamik değerleri

Özellik	Alaşım							
	Ti-(51-x)Al-xZr							
	saf	x=1	x=2	x=3	x=4	x=5	x=6	x=7
Serbet Enerji	-39.92	-40.51	-40.96	-41.30	-41.53	-41.67	-41.71	-41.66
Oluşum Entalpisi	-38.20	-34.0 ^a -37.10 ^b	-38.67	-39.03	-39.30	-39.47	-39.55	-39.54
Entropi	1.71	1.83	1.92	1.99	2.06	2.12	2.17	2.22
	Ti-(62-x)Al-xZr							
Serbest Enerji	-38.02	-39.05	-39.94	-40.72	-41.39	-41.96	-42.43	-42.81
Oluşum Entalpisi	-36.38	-31.60 ^a -37.10 ^c	-37.28	-38.07	-38.77	-39.37	-39.8	-40.30
Entropi	1.64	1.77	1.86	1.94	2.01	2.07	2.13	2.18

^a teo.[140], ^b deney.[141], ^c deney.[20]

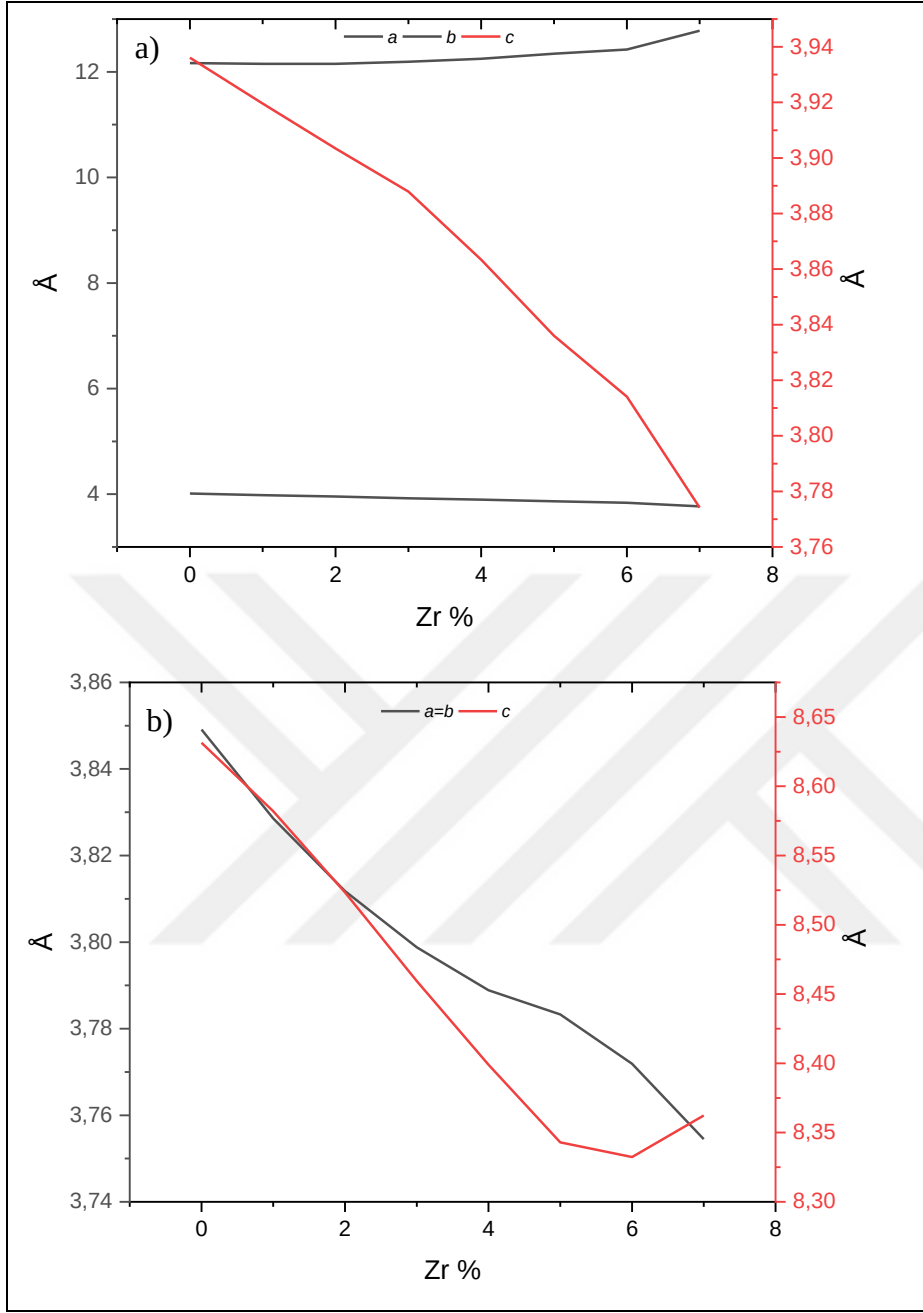
Bilindiği üzere, TiAl_2 alaşımının kristal yapısı Cmmm (No.#65) ortorombik iken, TiAl_3 alaşımının kristal yapısı $I4/mmm$ (No.#139) ise tetragonalıdır. Çizelge 4.10 hesaplanan Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr bileşiklerinin kafes parametrelerini göstermektedir.

Çizelge 4.10. Zr katkılı TiAl_2 ve TiAl_3 fazlarının hesaplanmış kafes parametreleri

Özellik	Alaşım								
	Ti-(51-x)Al-xZr								
	saf		x=1	x=2	x=3	x=4	x=5	x=6	x=7
a (Å)	12.1646	12.1640 ^a	12.1529	12.1513	12.1928	12.2488	12.3435	12,4239	12.7805
b (Å)	3.9361	3.9360 ^a	3.9196	3.9034	3.8879	3.8634	3.8360	3.8141	3.7742
c (Å)	4.0112	4.0110 ^a	3.9821	3.9547	3.9222	3.8954	3.8660	3.8379	3.7697
	Ti-(62-x)Al-xZr								
a (Å)	3.8491	3.849 ^a 4.040 ^b	3.8286	3.8118	3.7988	3.7889	3.7833	3.7719	3.7545
c (Å)	8.6314	8.6320 ^a 8.750 ^b	8.5820	8.5234	8.4593	8.3990	8.3429	8.3323	8.3623

^ateo.[140], ^b deney.[141]

Katkısız TiAl_2 ve TiAl_3 intermetaliklerinin Çizelge 4.10'da verilen kafes parametresi değerleri literatür sonuçlarıyla [140,141] oldukça uyumludur. Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımlarının kafes parametrelerinin Zr katkısı ile değişimi Şekil 4.10'da gösterilmiştir. TiAl_2 bileşiğine Zr ilavesi " a " kafes değerini arttırırken, " b " ve " c " parametrelerini azaltmaktadır. Bu sonuçlar, Ouadah ve diğerlerinin [142] TiAl alaşımındaki Al bölgesine Zr ilavesi çalışmalarına oldukça benzer sonuçlar ortaya koymuştur. Diğer taraftan, TiAl_3 alaşımında Zr ilavesi arttıkça kafes parametreleri genellikle azalan eğilim göstermektedir, yani birim hücre hacmi azalmaktadır. Bu gözlemler, Ponchel ve arkadaşları tarafından Zr katkılı TiAl alaşımındaki sonuçlarla uyumludur [75]. Kafes parametreleri sonuçları, Zr ilavesinin TiAl_2 ve TiAl_3 intermetalikleri üzerinde farklı yapısal etkilere sahip olduğunu göstermektedir. Sonuçlar, Chen ve arkadaşlarının Zr ilaveli TiAl alaşımları ile ilgili deneysel [143] bulgularıyla uyumludur.



Şekil 4.10. Zr katkılı a) TiAl₂ ve b) TiAl₃ alaşımlarının Zr katkısı ile kafes parametrelerinin değişimi

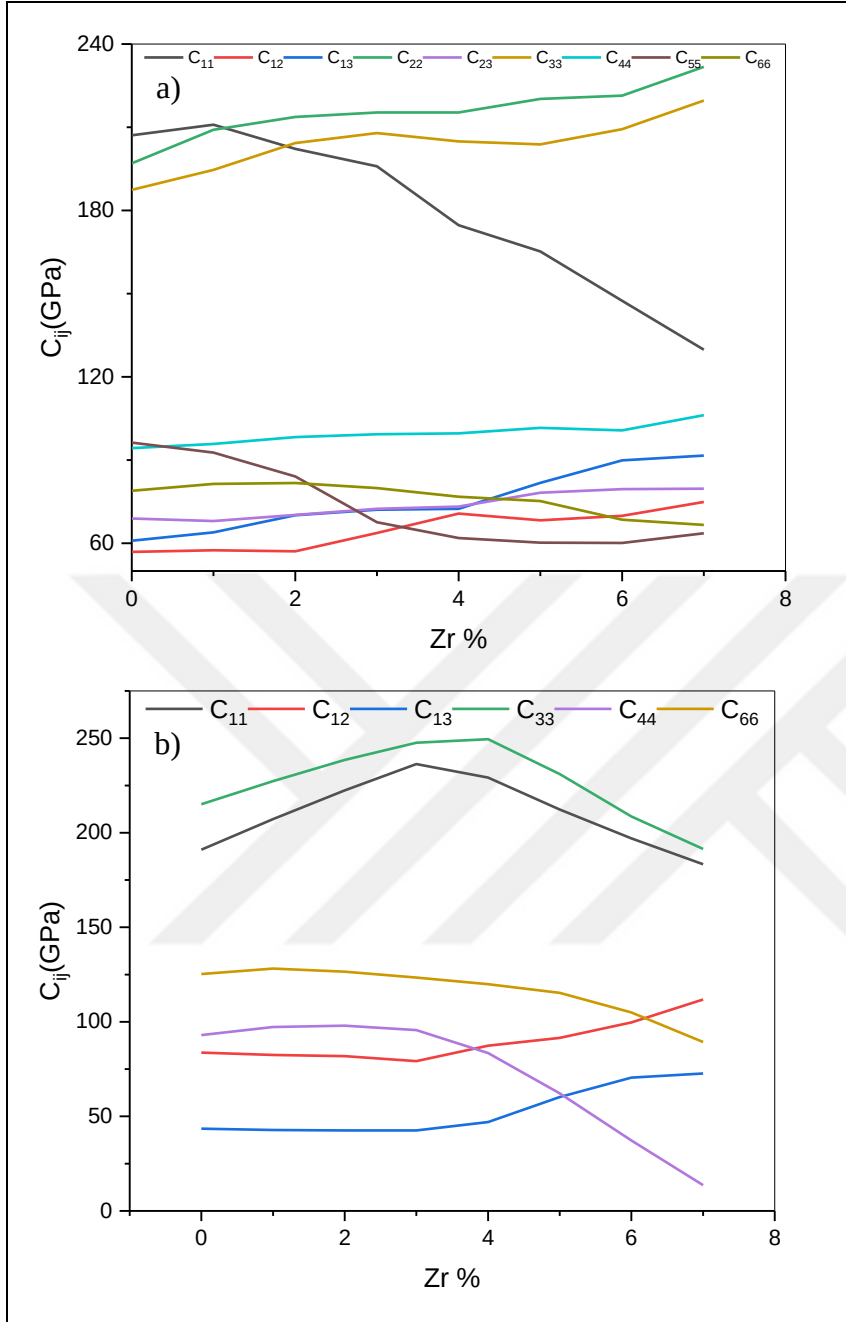
Zr elementinin TiAl₂ ve TiAl₃ bileşiklerinin mekanik özellikleri üzerindeki etkisini anlamak için saf ve Zr katkılı hallerdeki alaşımların DFT hesaplamaları yapılmıştır. Çizelge 4.11’de belirtildiği gibi, katkısız alaşımların elastik sabitlerinin literatürde verilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.11. Zr katkılı TiAl_2 ve TiAl_3 alaşımlarının elastik sabitleri

Özellik	Alaşım								
	Ti-(51-x)Al-xZr								
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4	x=5	x=6	x=7	
C_{11}	207.1	211.2 ^a	210.9	202.2	195.9	174.7	165.2	147.4	129.8
C_{12}	56.9	60.2 ^a	57.5	57.1	63.7	70.7	68.3	69.9	74.9
C_{13}	60.9	60.3 ^a	63.9	70.1	72.1	72.4	81.8	89.9	91.6
C_{22}	197.0	201.2 ^a	209.1	213.7	215.3	215.3	220.2	221.4	231.8
C_{23}	68.9	68.0 ^a	68.0	70.2	72.4	73.2	78.2	79.5	79.7
C_{33}	187.4	188.9 ^a	194.6	204.3	207.9	204.9	203.8	209.3	219.6
C_{44}	94.3	94.4 ^a	95.8	98.3	99.3	99.6	101.6	100.7	106.2
C_{55}	96.3	96.5 ^a	92.7	84.1	67.6	61.9	60.2	60.1	63.6
C_{66}	78.9	81.7 ^a	81.4	81.7	79.9	76.8	75.2	68.5	66.6
	Ti-(62-x)Al-xZr								
C_{11}	191.0	195.6 ^b 217.7 ^c	207.2	222.4	236.3	229.2	212.3	197	183.3
C_{12}	83.7	87.4 ^b 57.7 ^c	82.5	81.9	79.2	87.4	91.5	99.7	111.8
C_{13}	43.5	46.1 ^b 45.5 ^c	42.8	42.6	42.6	47.0	60.2	70.5	72.7
C_{33}	215.1	219.7 ^b 217.5 ^c	227.3	238.5	247.6	249.5	231.0	208.6	191.4
C_{44}	93.0	93.9 ^b 92.0 ^c	97.3	98.0	95.6	83.5	62.2	37.3	13.6
C_{66}	125.3	128.2 ^b 116.5 ^c	128.2	126.5	123.4	119.9	115.3	105.0	89.3

^a teo.[113], ^b teo.[116]

Bölüm 4.1’de detayları verildiği üzere Born-Huang [117] yaklaşımı ile alaşımların mekanik kararlılıkları araştırılıp olup, alaşımların mekanik olarak kararlı olduğu gözlenmiştir.



Şekil 4.11. Zr katkılı a) TiAl₂ ve b) TiAl₃ alaşımlarının elastik sabitlerinin değişimi

Şekil 4.11’de görüleceği üzere, Zr içeriği arttığında, doğrusal basmaya karşılık gelen C_{11} , (100) yönünde kaymaya karşılık gelen C_{55} ve (010) yönünde kaymaya karşılık gelen C_{66} elastik sabitleri dışında Ti-(51-x)Al-xZr’nin elastik sabitlerinin arttığını göstermektedir. Ti-(62-x)Al-xZr bileşikleri için elastik sabitler büyük ölçüde Zr konsantrasyonuna bağlıdır. C_{11} , C_{33} belirli bir kompozisyona kadar artıp, akabinde azalış eğilimindedir. Zr ilavesi ağırlıkça % 4’ten fazla olduğunda C_{12} ve C_{13} artarken, C_{44} ve C_{66} elastik sabitleri azalmaktadır.

Elastik sabitlerinin değerlendirilmesinden sonra, hacim (B), kesme (G) ve elastisite modülleri Voight-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımı ile [144] hesaplanmıştır ve Çizelge 4.12’de verilmiştir.

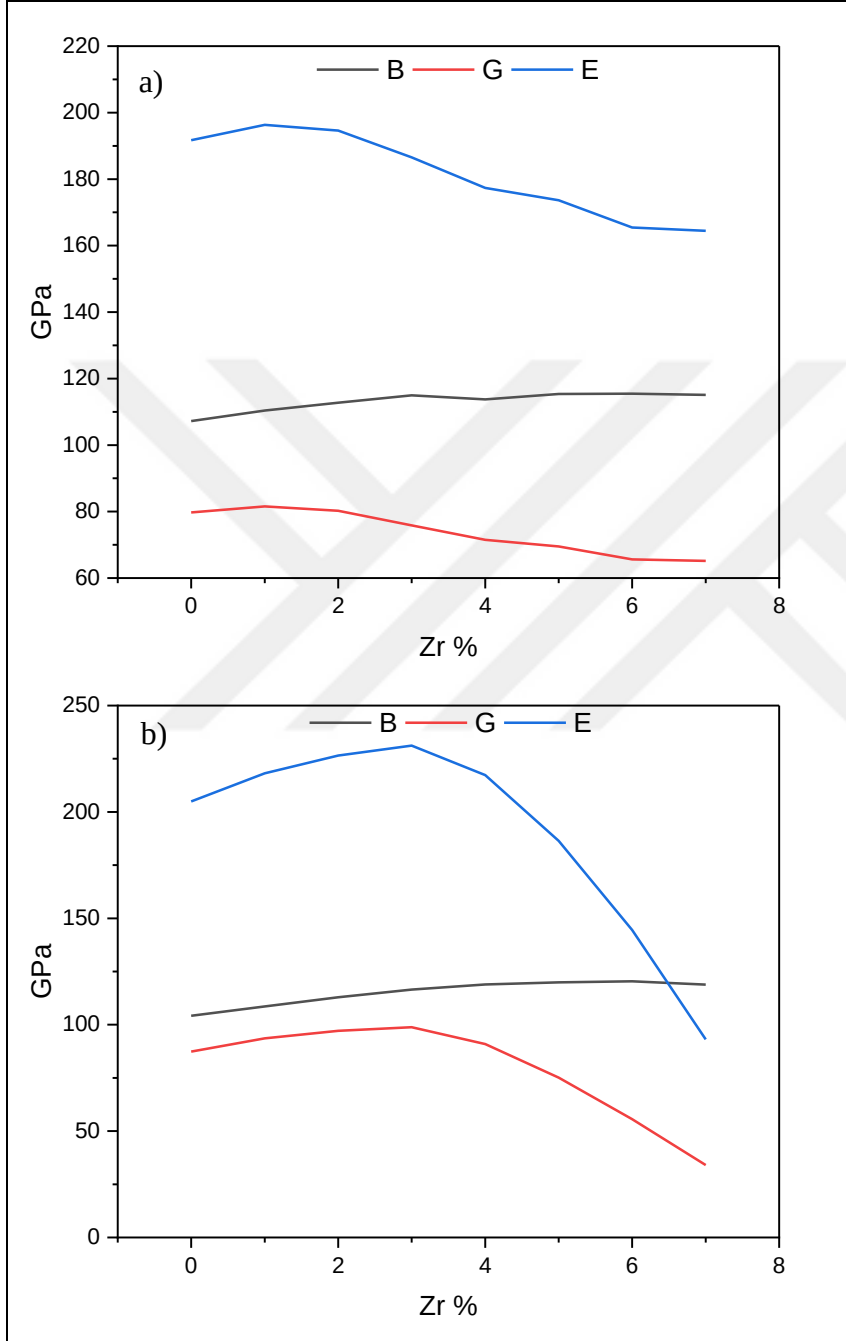
Çizelge 4.12. Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımlarının hesaplanmış mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım								
	Ti-(51-x)Al-xZr								
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4	x=5	x=6	x=7	
B (GPa)	107.2	108.6 ^a	110.4	112.8	115	113.8	115.4	115.5	115.1
G (GPa)	79.8	81.0 ^a	81.6	80.3	75.9	71.5	69.5	65.6	65.2
E (GPa)	191.7	194.7 ^a	196.3	194.6	186.5	177.3	173.6	165.5	164.4
B/G	1.34	1.34 ^a	1.35	1.40	1.52	1.59	1.66	1.76	1.77
ν	0.202	0.201 ^a	0.20	0.21	0.23	0.24	0.25	0.26	0.26
A^U	0.143	0.126 ^a	0.098	0.096	0.122	0.207	0.310	0.483	0.806
H_{Tian} (GPa)	14.6	15.6 ^a	14.70	13.90	12.30	11.20	10.40	9.40	9.30
	Ti-(62-x)Al-xZr								
B (GPa)	104.2	103.9 ^a 105.6 ^b	108.6	112.9	116.5	118.9	119.9	120.4	118.9
G (GPa)	87.4	87.4 ^a 93.0 ^b	93.6	97.2	98.9	90.9	75.1	55.6	34
E (GPa)	204.9	204.7 ^a 208.5 ^b	218.1	226.5	231.2	217.3	186.4	144.5	93.1
B/G	1.19	1.19 ^a 1.14 ^b	1.16	1.16	1.18	1.31	1.6	2.17	3.5
ν	0.172	0.171 ^a 0.160 ^b	0.165	0.166	0.169	0.195	0.241	0.300	0.369
A^U	0.392	0.383 ^a	0.277	0.184	0.115	0.178	0.335	0.860	3.764
H_{Tian} (GPa)	17.8	19.3 ^a	19.3	19.8	19.7	16.5	11.5	6.6	2.7

^ateo.[113], ^bdeney.[116]

Zr katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ alaşımlarının elastik modül değişim Şekil 4.12’de verilmiştir. Bulk modülü deformasyona karşı direnç, kesme modülü kesme kuvvetlerine direnç, elastisite modülü ise gerilmelere karşı direnç olarak kabul edilmektedir [145]. Zr ilavesinden önce katkısız TiAl₂ ve TiAl₃’ün elastik modülleri çalışılarak, sonuçların literatür verileriyle uyumluluğuna bakılmıştır. Elde edilen sonuçların, literatür bulgularıyla uyumlu olduğu gözlenmiştir. Şekil 4.12’den anlaşılabileceği üzere, her iki bileşiğin bulk modülleri Zr ilavesi ile artarken, kesme modülü ve elastisite modül değerlerinde Zr miktarı ağırlıkça %3’ten sonra

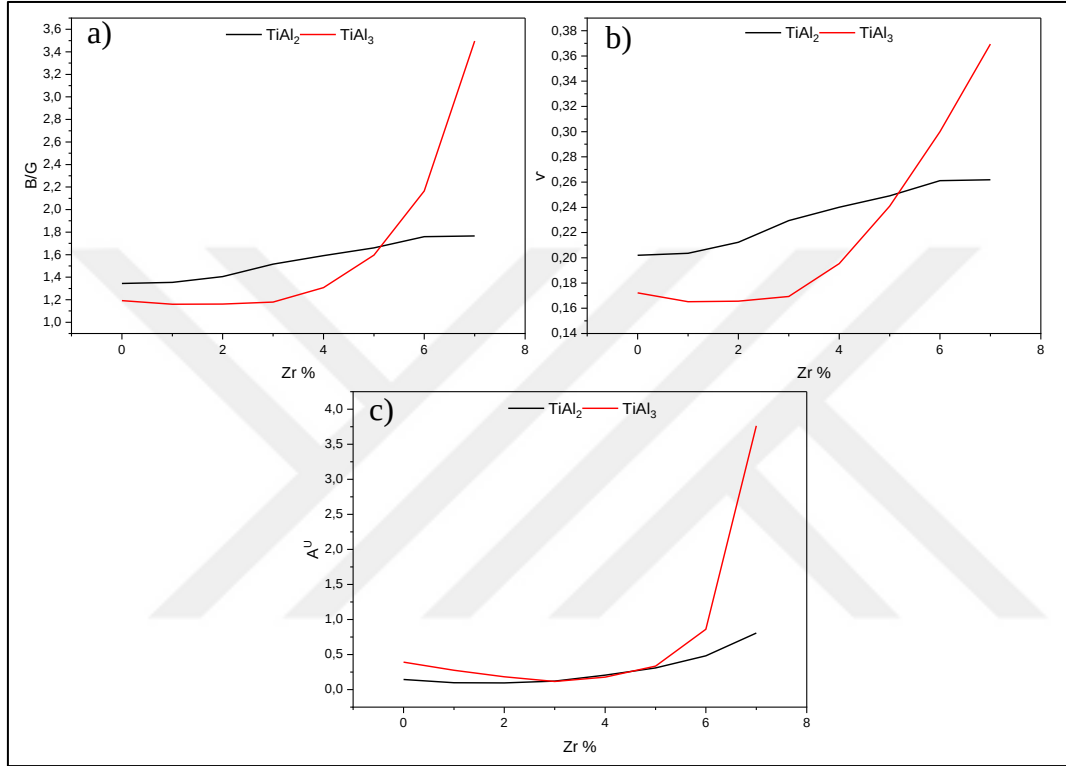
TiAl₃ alařımı iin ağırlıka %2'den sonra TiAl₂ iin dūřuř gzlenmiřtir. Bu davranıřın fiziksel tahmini, alařımlama sırasında atomlar ve elektronlar arasındaki etkileřime ek olarak atomik ve elektronik yeniden dūzenlemelerle ilgilidir.



řekil 4.12. a) Ti-(51-x)Al-xZr ve b) Ti-(62-x)Al-xZr alařımlarının elastik mod llerinin Zr %'ne g re deęiřimi

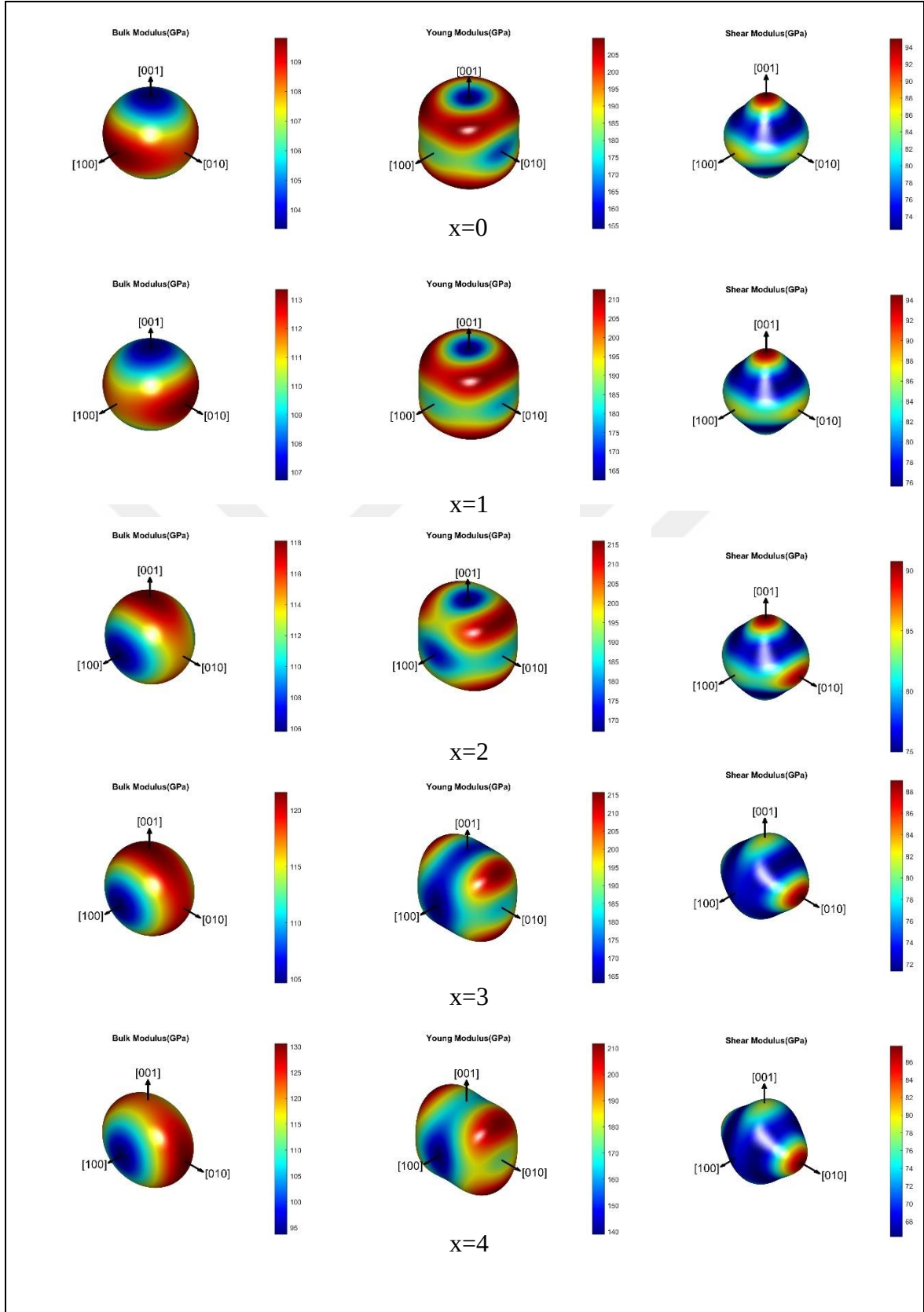
Mod l deęerleri hesaplandıktan sonra, elastik anizotropi analizlerine geilmiřtir. Daha  nceden bahsedildięi  zere, elastik anizotropi, faz d n ř mleri ve dislokasyon dinamikleri

hakkında bilgi sunan önemli bir malzeme özelliğidir [146]. Hesaplanan anizotropi değerleri sıfırdan farklı olduğu için, Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr bileşiklerinin anizotropik olduğu görülmektedir. Her iki bileşik de Zr kompozisyonu arttıkça benzer artış eğilimi göstermiş olup, TiAl₃ için Zr konsantrasyonu ağırlıkça %7 olduğunda, anizotropi indeksinde keskin bir artış gözlenmiştir.

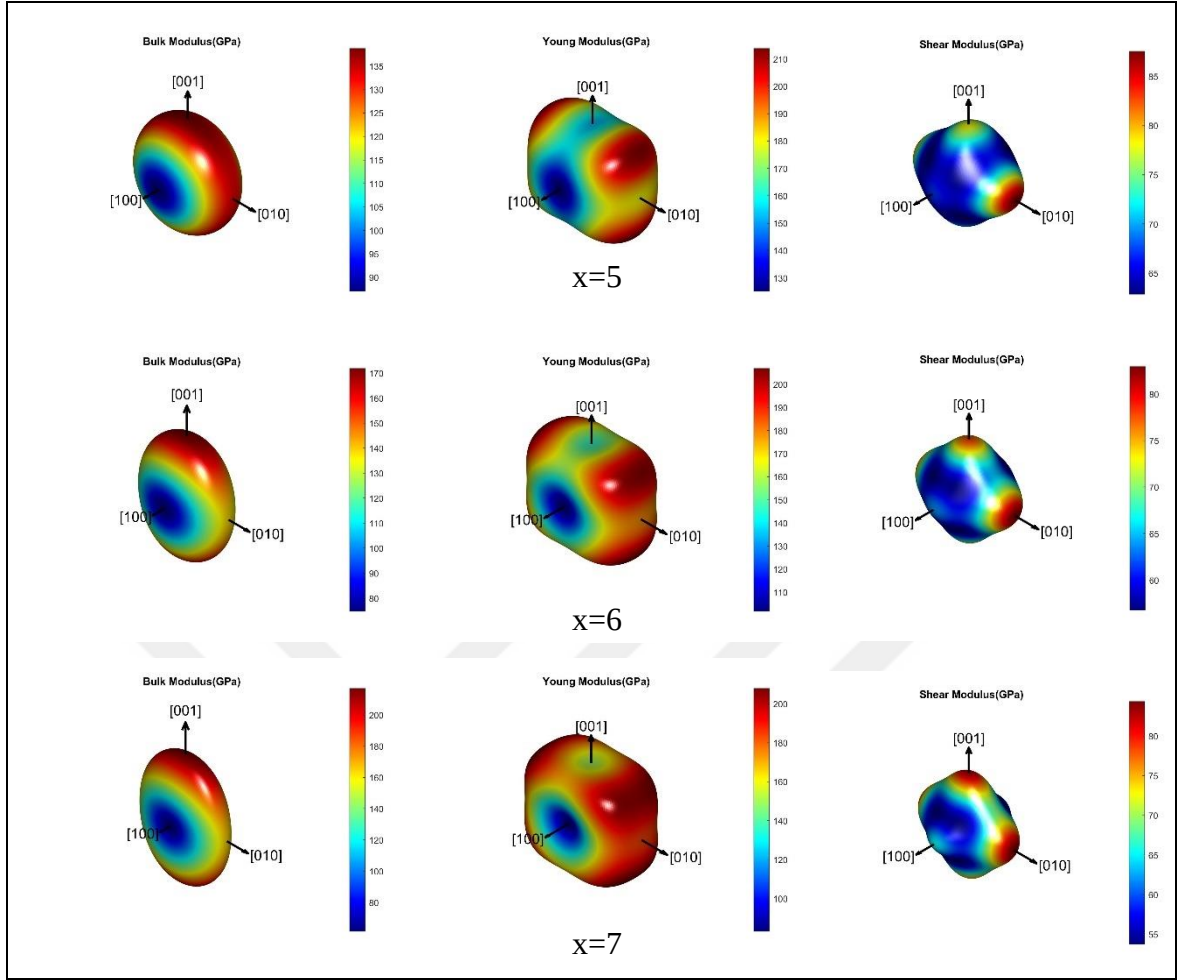


Şekil 4.13. Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımlarının a) Serbest enerji, b) Oluşum entalpisi ve c) Entropi grafikleri

Bulk, kesme ve elastisite modüllerinin yöne bağlı davranışlarını ayrıntılı olarak anlamak amacıyla ElasticPOST kodu kullanılarak üç boyutlu (3B) analizler gerçekleştirilmiştir. B, G ve E değerlerinin mükemmel küreye benzemesi durumu izotropik, aksi durum ise anizotropi olarak kabul edilmiştir. Şekil 4.13'den anlaşılabacağı üzere, Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımları anizotropik davranış göstermiş olup, hesaplama ile yapılan yorumlar doğrulanmıştır.

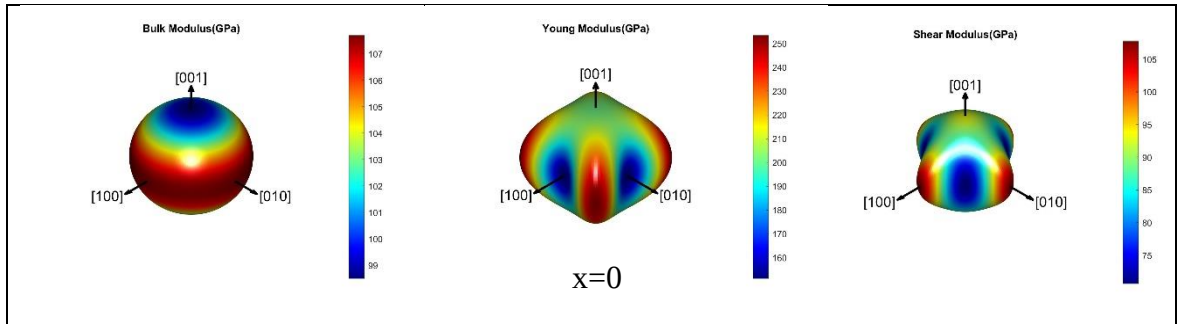


Resim 4.6. Ti-(51-x)Al-xZr alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

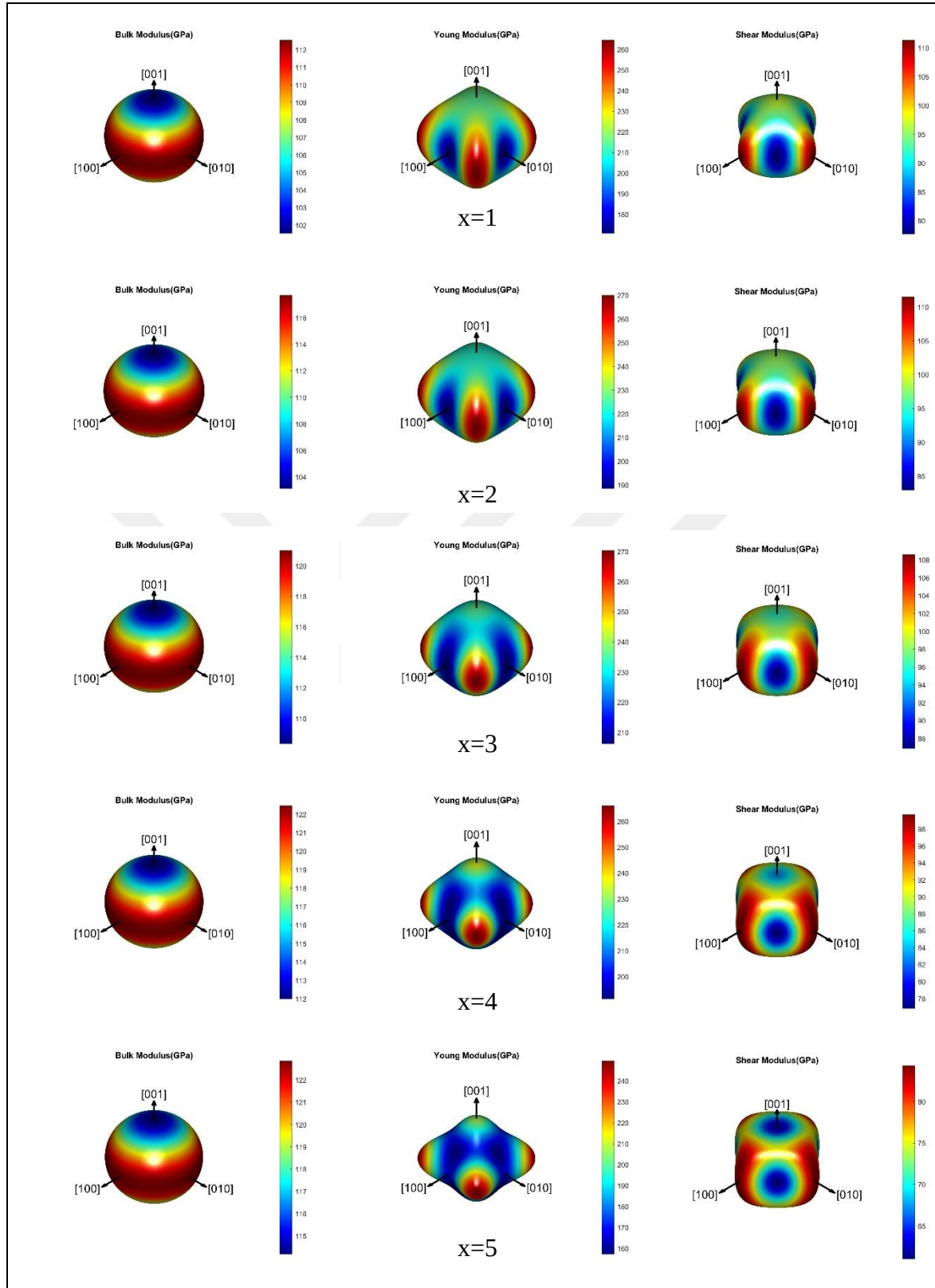


Resim 4.6. (devam) Ti-(51-x)Al-xZr alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

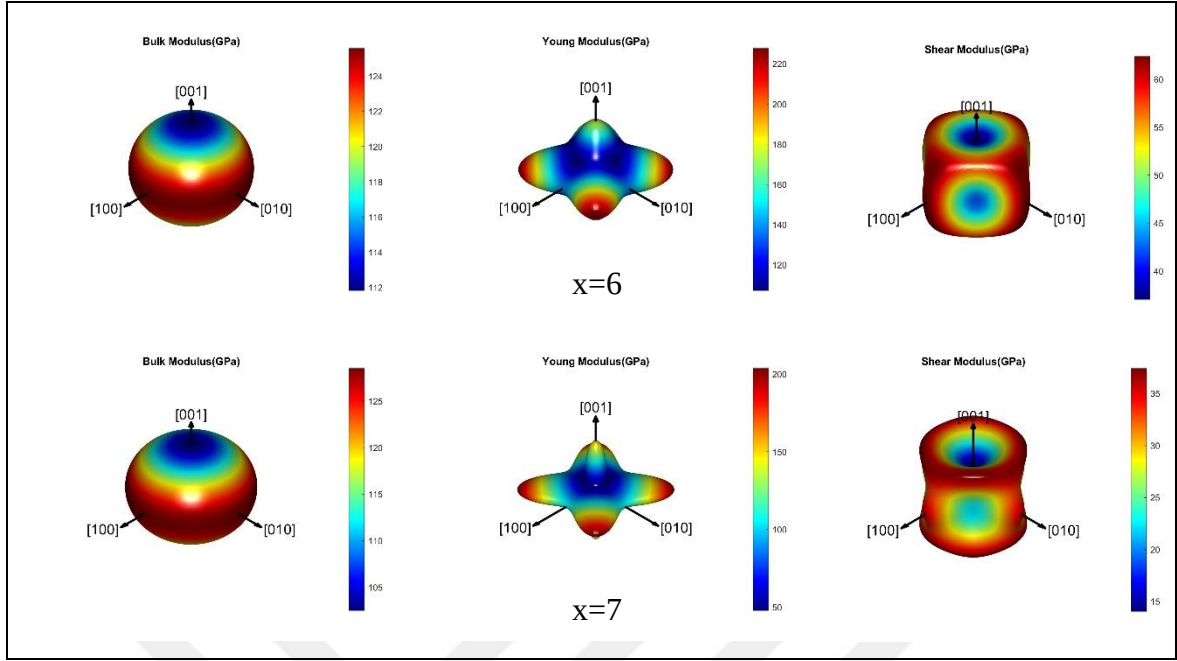
Resim 4.6'ya ayrıntılı olarak bakıldığında, TiAl_2 bileřiđi için [100] yönünde bulk modülünün yüksek olduđunu gözlenmiřtir. Zr konsantrasyonu arttıkça, [001] yönü baskın yön olmuřtur. Diđer taraftan, Zr konsantrasyonu arttıkça, kesme ve elastisite modüllerindeki baskın yön [010] olmuřtur.



Resim 4.7. Ti-(51-x)Al-xZr alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi



Resim 4.7. (devam) Ti-(51-x)Al-xZr alaşımlarının elastik modüllerinin 3B modellemesi

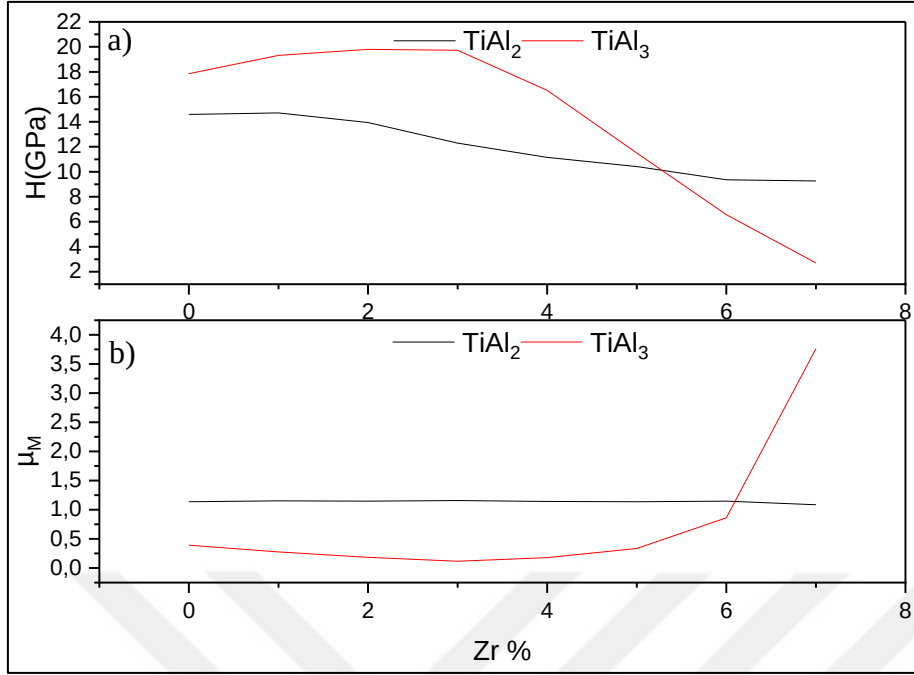


Resim 4.7. (devam) Ti-(51-x)Al-xZr alařımının elastik modüllerinin 3B modellemesi

Zr katkılı TiAl_3 alařımında durum daha farklı gözlenmiřtir. Zr katkılı TiAl_2 bileřiklerinde olduđu gibi baskın yön Zr konsantrasyonu arttıkça deđiřmemiřtir. Resim 4.7’de gösterildiđi gibi [100] ve [010] yönlerinde basma direnci ve sertlik daha yüksektir.

Endüstri için önemli bir parametre olan süneklik, kısım 4.1’de olduđu gibi, Pugh oranı (B/G) [122] ile incelenmiřtir. B/G oranı deđerinin 1,75’ten yüksek olduđu durumlarda alařımlar sünek olarak kabul edilmiřtir. řekil 11’den de anlařılacađı üzere, Zr ilavesinin ađırlıkça %6’dan yüksek olduđu durumlarda her iki alařım da sünek davranıř göstermiřtir. Bu kompozisyonlarda elastik ve kesme modül deđerlerinin düşmesi ve yüksek poisson oranı yönlemsel bađlanmanın azaldıđı ve bađın daha zayıf olduđunu göstermektedir, dolayısıyla sünek davranıř gözlenmiřtir.

řekil 4.14, alařımların sertlik deđerlerinin Zr konsantrasyonuna göre deđiřimini göstermektedir. Zr ilavesi TiAl_2 ’nin sertliđini azaltmaktadır. Diđer taraftan, TiAl_3 bileřiđinin sertliđi ađırlıkça %3 Zr konsantrasyonuna kadar artıp, bu kompozisyondan sonra azalmaktadır. Daha düşük sertlik deđerleri, bu intermetaliklerin süneklik özelliklerinin iyileřmesini sađlamaktadır.



Şekil 4.14. Ti-(51-x)Al-xZr ve Ti-(62-x)Al-xZr alaşımlarının Zr % değişimi ile a) Sertlik ve b) İşlenebilirlik indeksi değişimi

Poisson oranı, enine ve boyuna gerinimler arasındaki oran olarak belirtilir. Metallerin ve alaşımların Poisson oranı değeri daha kısım 4.1’de belirtildiği gibi genellikle 0,25-0,42 arasındadır [144]. Ayrıca, 0,26’dan yüksek ν değerleri, malzemenin sünek özellik gösterebileceğini göstermektedir. Şekil 4.14’ten görüleceği üzere, Zr konsantrasyonu ağırlıkça %6 ’dan yüksek olduğunda ν değerlerinin 0.26’dan büyük olduğu görülmektedir. Böylece alaşımın süneklik özelliği poisson oranı ile de kanıtlanmış olmaktadır.

Endüstri için önemli bir parametre olan işlenebilirlik indeksi, malzemenin düşük maliyetle işlenebilme kolaylığını göstermektedir. Daha yüksek işlenebilirlik indeksi, malzemelerin daha yüksek işlenebilirliğini beraberinde getirmektedir. Bu nedenle, Zr katkılı TiAl₃ ve TiAl₂ alaşımlarının işlenebilirlik indeksleri de değerlendirilmiştir.

Ti-(51-x)Al-xZr alaşımlarının işlenebilirlik indeksleri, Şekil 4.14’ten anlaşıldığı üzere Zr konsantrasyonu ile çok fazla değişmemektedir. Öte yandan, Ti-(62-x)Al-xZr alaşımları için işlenebilirlik indeksi ağırlıkça %3 Zr ilavesine kadar düşüp akabinde artmaktadır.

Zr katkılı TiAl₂ ve TiAl₃ intermetaliklerinin faz kararlılığı, elastik ve mekanik özellikleri DFT bazlı VCA yöntemi ile ilk kez incelenmiştir. Bu çalışmadan, aşağıdaki sonuçları özetleyebiliriz:

Zr ilavesi, termodinamik değerler incelendiğinde $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımlarını daha kararlı hale getirmiştir. Elastik sabit sonuçları, $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve $Ti-(62-x)Al-xZr$ alaşımlarının ağırlıkça % 0 – 7 Zr ilavesi aralığında mekanik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Zr katkısı ağırlıkça %6 'dan yüksek olduğunda alaşımlar sünek davranış göstermektedir. Ayrıca, %3 Zr ilavesinden sonra $TiAl_3$ alaşımı için işlenebilirlik indeksinde artış gözlenmiştir.

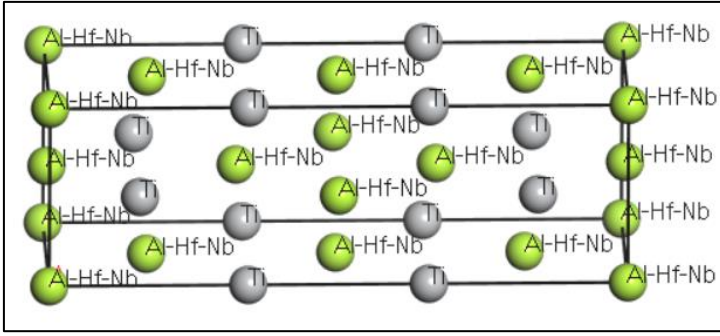
4.4. Niyobyum (Nb) elementinin Zr ve Hf katkılı üçlü alaşımlara etkisinin incelenmesi

Hf ve Zr katkılı $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımları incelendikten sonra alaşımların mekanik kararlılıkları, mukavemetleri ve süneklik değerleri göz önüne alınarak aşağıda verilen alaşımlara Nb eklenerek dördü alaşımların yapısal ve mekanik özellikleri araştırılmıştır.

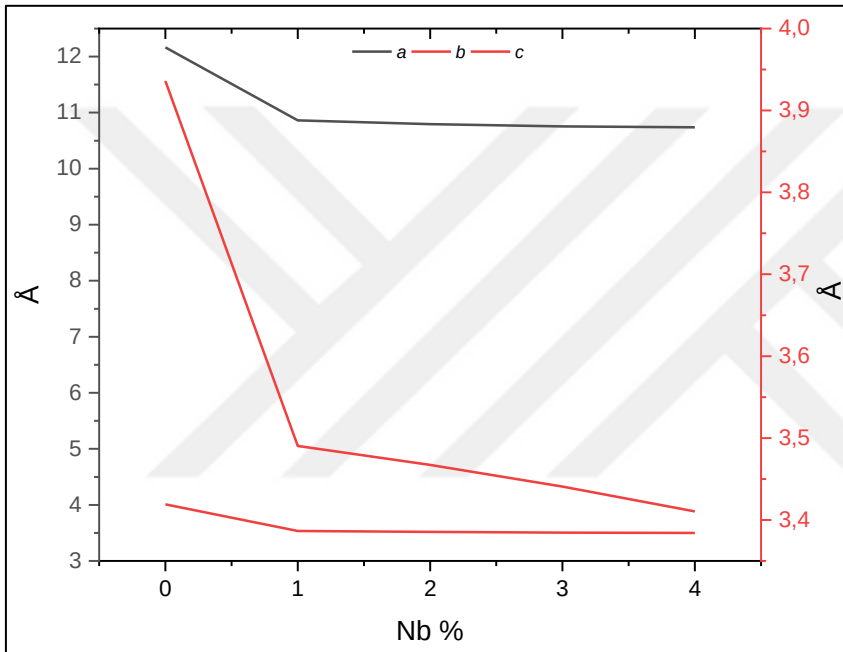
- $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$
- $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$
- $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$
- $Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb$
- $Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb$

4.4.1. $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımları

Literatürde yapılan çalışmalarda, Nb elementinin $TiAl$ fazlarında oksidasyon direncini ve yüksek sıcaklıklarda mekanik arttırdığı gözlenmiştir [147]. Dolayısıyla, çalışmalara belirlenen üçlü alaşımlara Nb eklenerek devam edilmiştir. Öncelikle $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarının Nb konsantrasyonuna bağlı olarak kafes parametreleri çalışılmıştır. $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ alaşımlarında Nb konsantrasyonu için % 0-5 aralığı düşünülmüş ancak % 5 Nb içeriğinde mekanik olarak negatif değerler elde edildiği için çalışma % 0-4 Nb içeriği ile tamamlanmıştır. Dolayısıyla, bundan sonraki sonuçlar $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$ ağırlıkça ($x = \% 0-4 Nb$) şeklinde sunulmuştur. Daha önce de belirtildiği üzere ana kristal yapı uzay grubu $Cmmm$ (No.#65) olan ortorombik yapısıdır. Hf ve Nb elementleri ilgili yapıya eklenmiş olup Resim 4.8’de yapı verilmiştir.



Resim 4.8. Hf ve Nb ilaveli Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb kristal yapısı



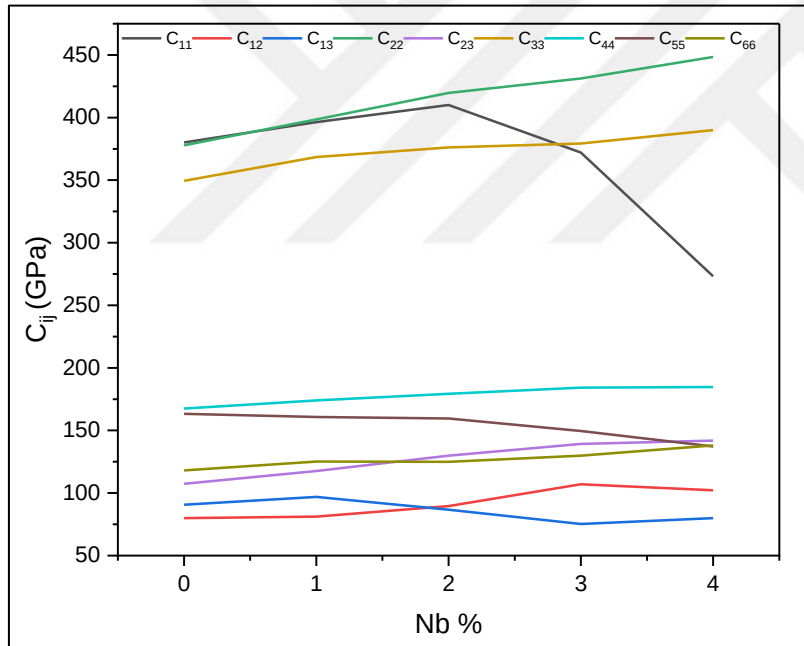
Şekil 4.15. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi

Şekil 4.15'ten de görüleceği üzere Nb ilavesi %1 'e olduğunda kafes parametrelerinde azalma, bu kompozisyondan sonra da önem sabit kalmıştır. Literatürde yapılan çalışmalarda Nb elementinin TiAl alaşımlarına olan etkisi incelendiğinde de benzer sonuçlara rastlanmaktadır [148]. MAAT yazılımı dörtlü alaşımlarda uygulanamadığı için termodinamik kararlılıklara CASTEP simülasyonlarının sonucu olan serbest enerji değerleri ile karar verilmiş ve Çizelge 4.13'te görüleceği üzere alaşımların termodinamik olarak kararlı olduğu gözlenmiştir.

Çizelge 4.13. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının Kafes parametreleri ve sistem enerjileri

Özellik	Alaşım				
	Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb				
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4
a (Å)	121.646	108.603	107.951	107.536	107.391
b (Å)	39.361	34.904	34.672	34.409	34.104
c (Å)	40.112	35.353	35.182	35.060	34.993
Sistem enerjisi (eV)	-3480	-3503	-3523	-3543	-3565

Geometrik optimizasyondan sonra elastik sabitlerinin hesaplanması yapılmıştır. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik sabit değişimleri Şekil 4.16'da sunulmuştur.



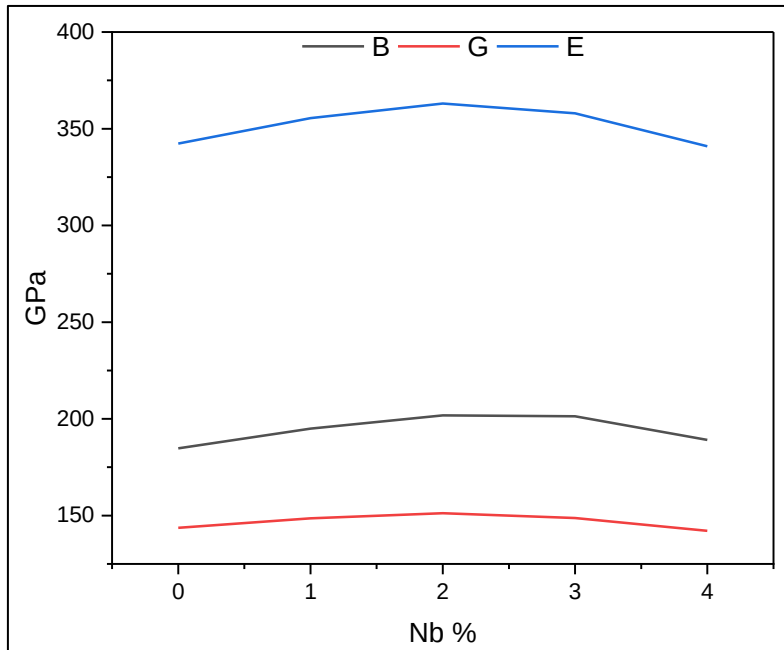
Şekil 4.16. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi

Çizelge 4.14'te sunulan değerler ışığında Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımları % 0-4 Nb bileşim aralığında mekanik olarak kararlıdır. Şekil 4.16'dan anlaşılacağı üzere, C_{11} elastik sabiti haricindeki diğer elastik sabitlerde önemli bir değişim olmazken, C_{11} elastik sabiti %2 Nb konsantrasyonuna kadar artmış, bu kompozisyon sonrasında azalmıştır.

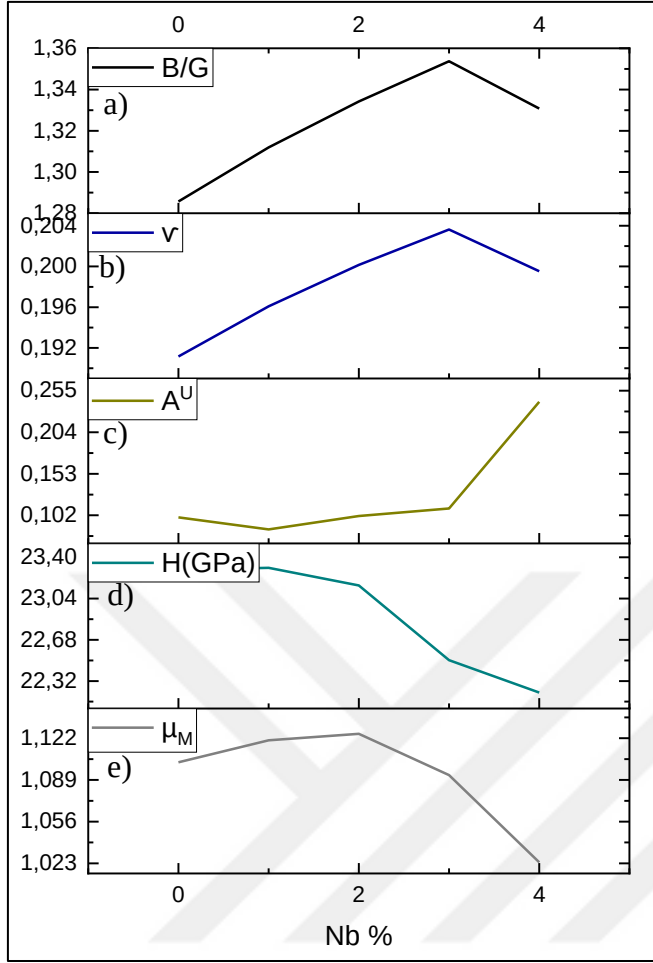
Çizelge 4.14. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım				
	Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb				
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4
C ₁₁	380.1	396.4	410	372.1	273.2
C ₁₂	80	81.1	89.6	107	102.2
C ₁₃	90.6	96.9	86.7	75.3	79.9
C ₂₂	377.8	398.5	419.7	431.2	448.4
C ₂₃	107.4	117.6	129.8	139.2	141.9
C ₃₃	349.5	368.5	376.1	379.3	390
C ₄₄	167.5	174	179.3	184.2	184.7
C ₅₅	163.3	160.7	159.6	149.6	137.2
C ₆₆	118.1	125.2	124.9	129.9	138
B	184.8	195	201.8	201.3	189.1
G	143.7	148.6	151.3	148.7	142.1
E	342.3	355.5	363.0	358	340.9
B/G	1.29	1.31	1.33	1.35	1.33
ν	0.19	0.20	0.20	0.20	0.20
A ^U	0.01	0.08	0.10	0.11	0.24
H _{Tian}	23.3	23.3	23.2	22.5	22.2

Şekil 4.17’de görüleceği üzere modül değerleri elastik sabitlerde olduğu gibi bir eğilim izlemiştir. Modül değerleri %2 Nb ilavesine kadar yaklaşık %10’luk artış göstermiş, bu kompozisyondan sonra başlangıç değerlerine yakın değerlere kadar azalmıştır.



Şekil 4.17. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının bulk, kesme ve elastisite modülleri



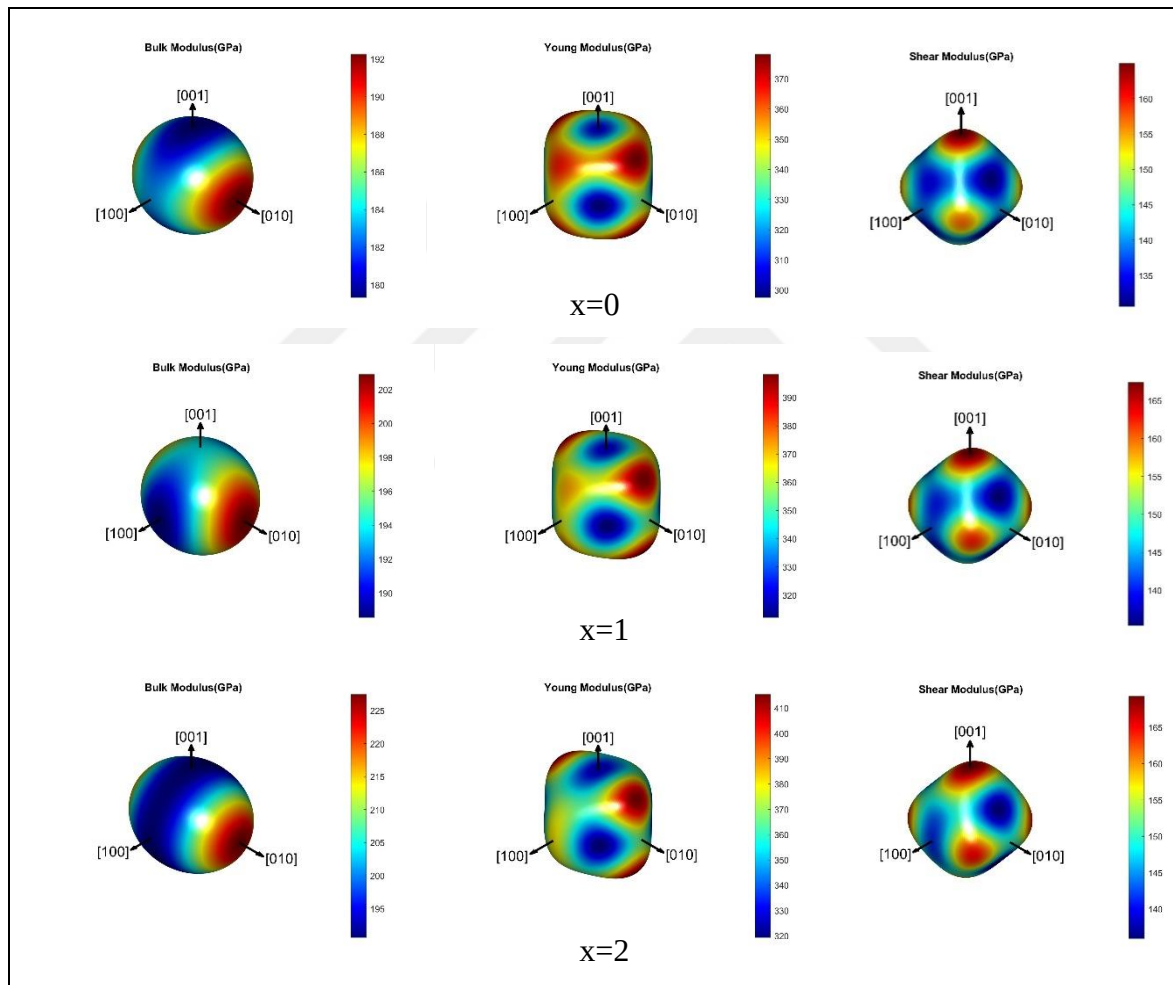
Şekil 4.18. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri

Süneklik/kırılğanlığın, endüstride kullanılması amaçlanan bir alaşımın temel bir parametresi olduğu genel olarak kabul edilmektedir. Pugh oranı (B/G) [122] malzemenin sünek-kırılğan özelliğinin bir işareti olarak kabul edilmektedir. B/G oranı değeri 1,75'ten büyükse malzeme sünek, aksi takdirde kırılğandır. Şekil 4.18'den görüleceği üzere, Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımları kırılğan özellik göstermektedir. Nb konsantrasyonuna bağlı değişim incelendiğinde alaşımların ν değerlerinin 0,26'dan küçük olduğu anlaşılmaktadır. Dolayısıyla kırılğan yapı poisson oranı ile de doğrulanmıştır.

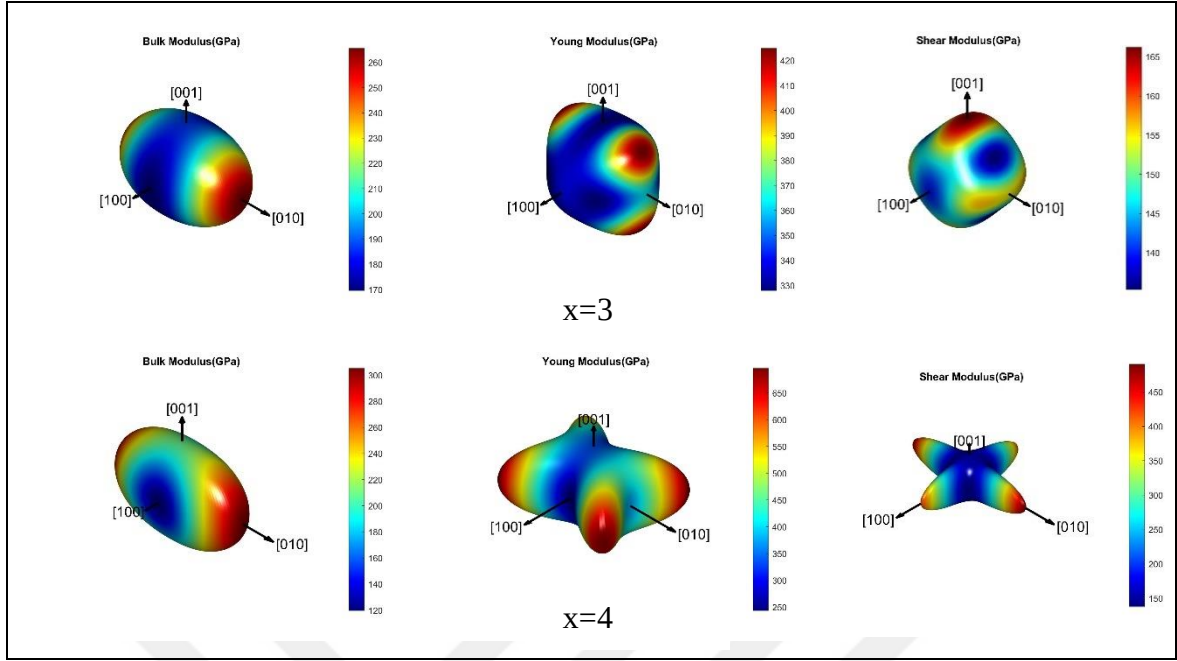
Sertlik, bir malzemenin plastik deformasyona karşı gösterdiği dirençtir. Sertlik değerleri genel anlamda değişmemiştir. Değerler incelendiğinde ise Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımının oldukça sert olduğu anlaşılmıştır.

Endüstri için oldukça önemli bir parametre olan işlenebilirlik indeksi incelendiğinde değerlerin düşük olduğu gözlenmiştir, dolayısıyla Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımları işlenebilirlik açısından uygun alaşımlar olarak görünmemektedir.

Elastik anizotropi, faz dönüşümleri ve dislokasyon dinamikleri hakkında ipucu veren önemli bir mekanik özellik olan anizotropi değerlerine bakıldığında Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının anizotropik olduğu anlaşılmıştır. Elastik modül değerlerinin de anizotropik davranışını görmek amacıyla 3B modellemesi yapılmıştır.



Resim 4.9. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri

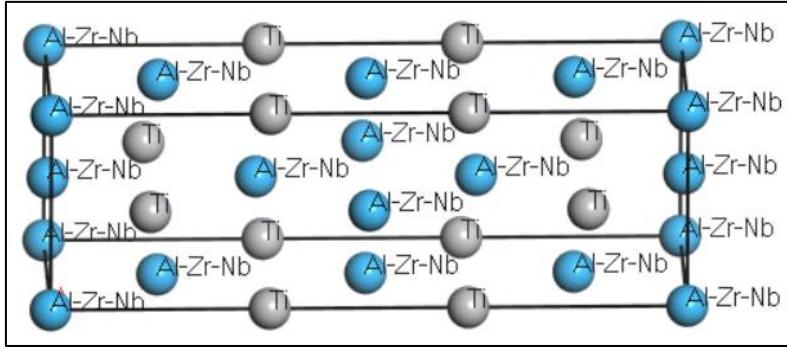


Resim 4.9. (devam) Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının elastik modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri

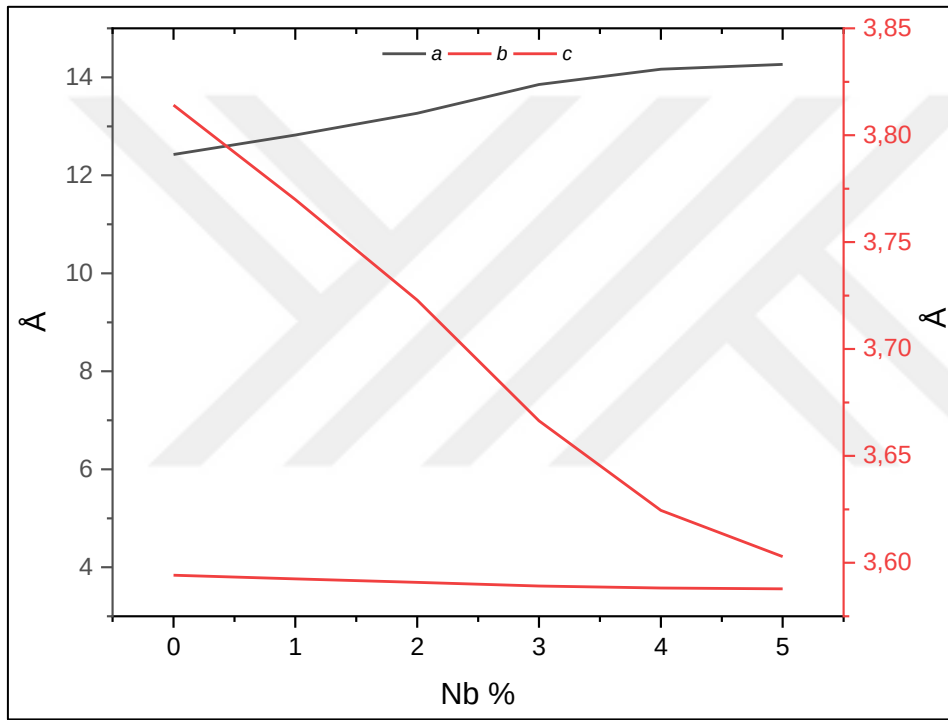
Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alaşımlarının bulk modülünün yöne bağlı 3B modelleri incelendiğinde baskın yönün (010) olduğu görülmektedir. Baskın yön Nb konsantrasyonu arttıkça değişmemiştir ancak Resim 4.9'da görüleceği üzere kürenin şekli Nb konsantrasyonu ile bozulmuş olup, anizotropi artmıştır. Elastisite modülü incelendiğinde ise baskın yönün (111) olduğu görülmüştür. Anizotropi de Nb %'si arttıkça artmaktadır. Kesme modülünde ise baskın yön (001) iken, Nb %'si 4 olduğunda baskın yön (010) yönü olmuştur.

4.4.2. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımları

Havacılık sektöründe kullanılma amacıyla aday alaşımlardan olan Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımı % 0-5 aralığı Nb konsantrasyonunda çalışılmıştır. Öncelikle, alaşımın Nb konsantrasyonuna bağlı olarak kafes parametreleri değişimi çalışılmıştır. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımının kristal yapısı uzay grubu Cmmm (No.#65) olan ortorombik yapıdır. Zr ve Nb elementleri ilgili yapıya eklenmiş olup Resim 4.10'da yapı verilmiştir.



Resim 4.10. Zr ve Nb ilaveli Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb kristal modeli



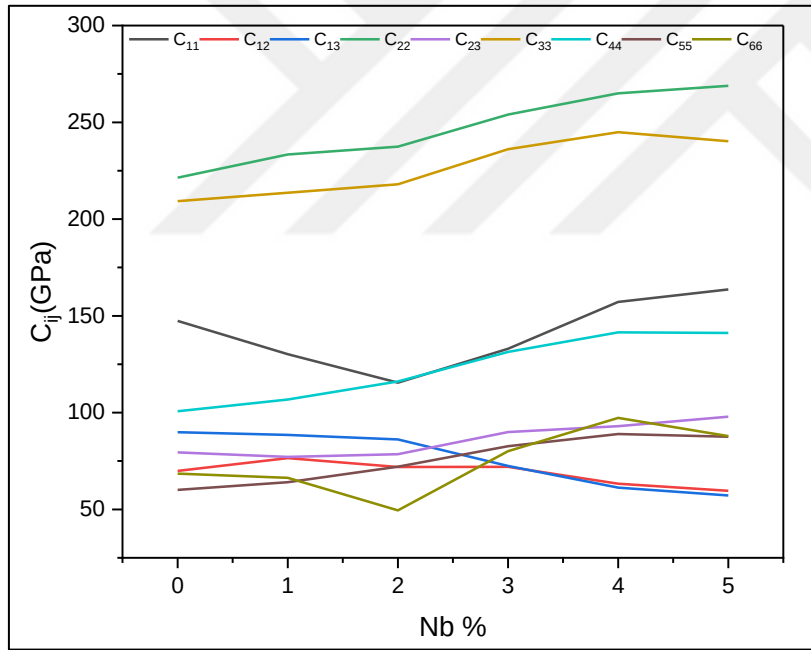
Şekil 4.19. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi

Şekil 4.19'dan da görüleceği üzere Nb ilavesi arttıkça “a” kafes parametresi artmış, “b” ve “c” kafes parametreleri azalmıştır. Nb elementinin diğer TiAl alaşımlarının kafes parametrelerine olan etkisi incelendiğinde, aynı etki gözlenmiştir. Sistemin kararlılığını görmek amacıyla, geometrik optimizasyon sonucu oluşan serbest enerji değerleri incelenmiştir. Çizelge 4.15'ten anlaşılabacağı üzere alaşımların termodinamik olarak kararlı olduğu gözlenmiştir.

Çizelge 4.15. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri

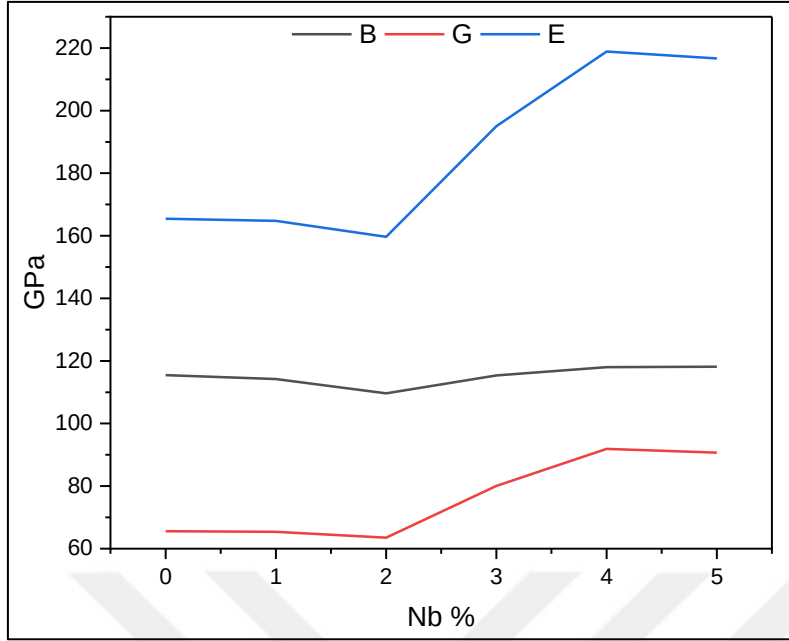
Özellik	Alaşım					
	Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb					
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4	x=5
a (Å)	12.4239	12.8206	13.2674	13.8547	14.1667	14.2641
b (Å)	3.8141	3.7699	3.7228	3.6664	3.6245	3.6029
c (Å)	3.8379	3.7634	3.6932	3.6167	3.5784	3.5590
Sistem enerjisi (eV)	-3550	-3551	-3572	-3594	-3617	-3640

Mekanik özellikleri bulabilmek amacıyla, elastik sabitlerinin hesaplanması yapılmıştır. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının elastik sabit değişimleri Şekil 4.20'de sunulmuştur.



Şekil 4.20. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi

Ortorombik yapılu kristal sistemlerde kullanılan mekanik kararlılık kriterleri doğrultusunda Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının mekanik olarak kararlı oldukları görülmüştür. Şekil 4.20'den anlaşılacağı üzere, C_{11} ve C_{66} elastik sabitleri %2 Nb konsantrasyonuna kadar azalmış, sonrasında artmıştır. C_{22} , C_{33} ve C_{44} elastik sabitleri ise Nb % konsantrasyonu arttıkça artma eğilimindedir.

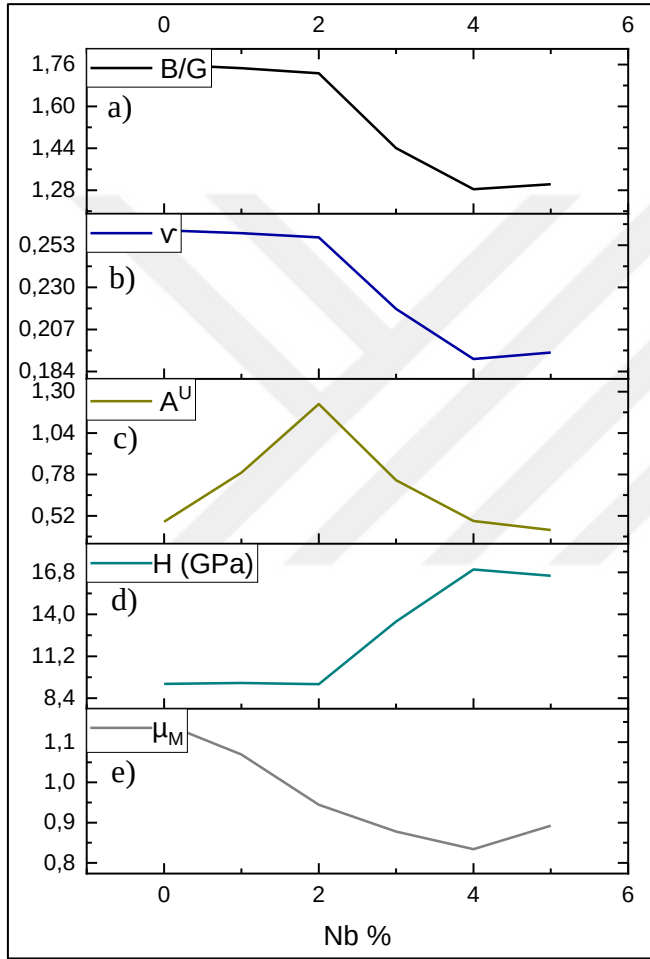


Şekil 4.21. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi

Çizelge 4.16. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım					
	Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb					
	x=0	x=1	x=2	x=3	x=4	x=5
C ₁₁	147.4	130.2	115.5	133	157.2	163.7
C ₁₂	69.9	76.5	71.9	72	63.3	59.6
C ₁₃	89.9	88.5	86.2	72.5	61.3	57.2
C ₂₂	221.4	233.4	237.4	254	265	268.9
C ₂₃	79.5	77.1	78.5	90	93	97.9
C ₃₃	209.3	213.6	218	236.1	244.9	240.2
C ₄₄	100.7	106.8	116.1	131.4	141.5	141.2
C ₅₅	60.1	64.1	72.1	82.7	89	87.6
C ₆₆	68.5	66.3	49.5	80.1	97.3	87.9
B	115.45	114.2	109.65	115.35	118	118.15
G	65.6	65.4	63.5	80.05	91.9	90.7
E	165.5	164.8	159.7	195	218.9	216.7
B/G	1.76	1.75	1.73	1.44	1.28	1.30
v	0.26	0.26	0.26	0.22	0.19	0.19
A ^U	0.482	0.791	1.223	0.744	0.488	0.431
H _{Tian}	9.4	9.4	9.3	13.5	17.0	16.6
(μM)	1.15	1.07	0.94	0.88	0.83	0.89

Şekil 4.21 ve Çizelge 4.16'dan görüleceği üzere elastisite modülleri %2 Nb ilavesine kadar önemli bir değişiklik göstermemiş, artan Nb konsantrasyonlarında artış eğilimi göstermiştir. Benzer kompozisyona bağlı durumlar Şekil 4.22'de verilen Pugh oranı, Poisson oranı ve sertlik değerlerinde de gözlenmiştir. Pugh ve Poisson oranları, elastisite modüllerinin artmasına paralel olarak azalmıştır. Bu sonuçlardan yola çıkarak, %2 Nb ilavesinden sonra alaşımın süneklik değerinin azaldığı ve daha kırılkan olduğu görülmektedir

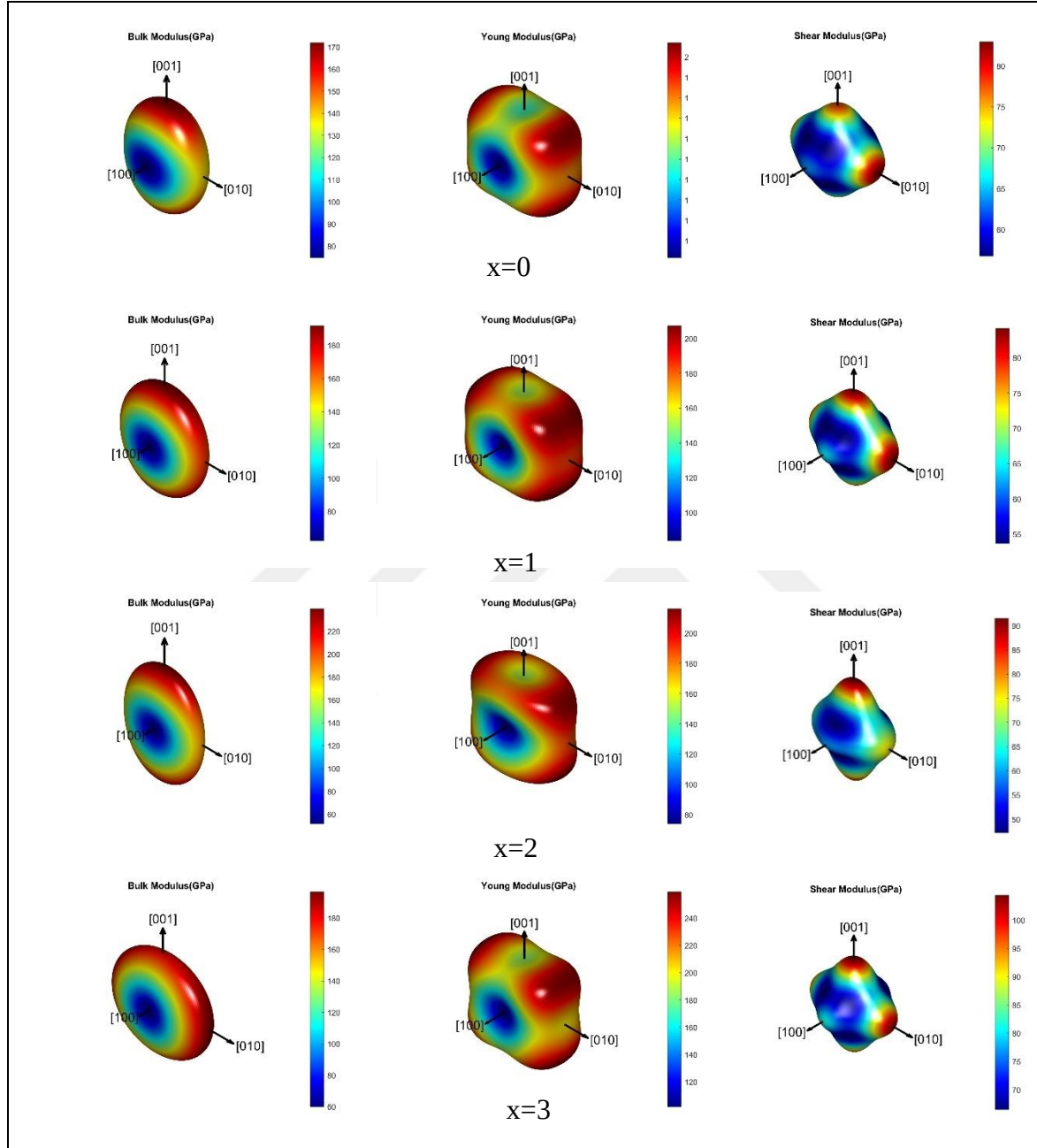


Şekil 4.22. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri

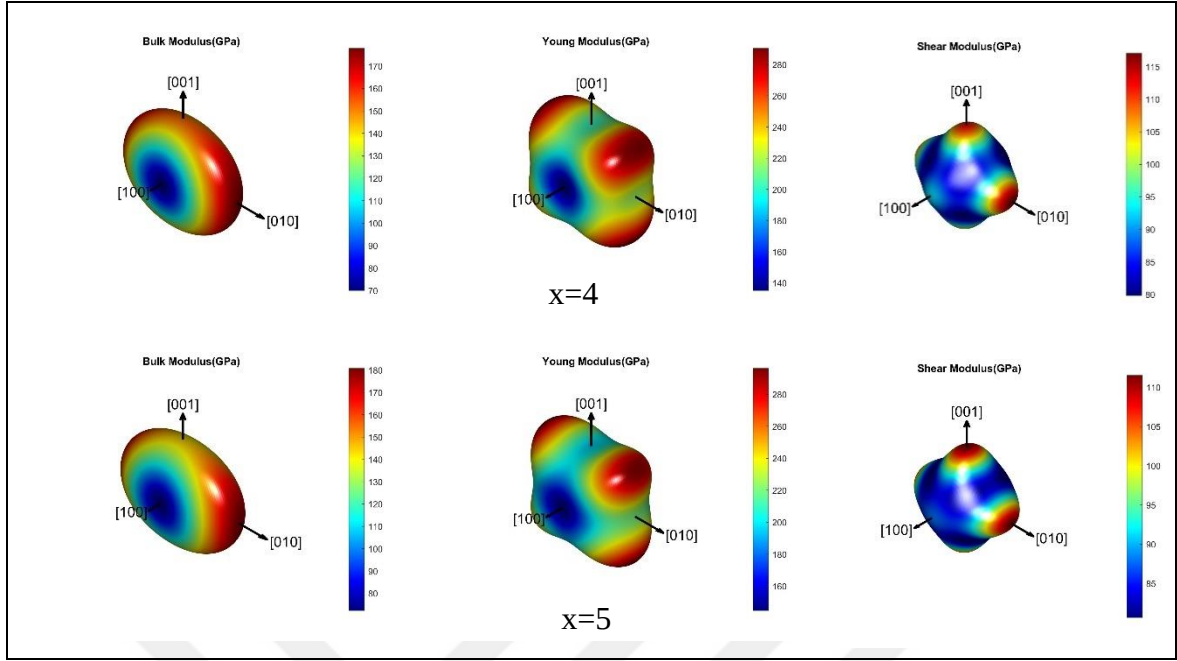
Sertlik değerlerine bakıldığında ise malzemenin sertlik değerlerinde %2 Nb konsantrasyonunda sonra yaklaşık iki kat artış olduğu belirlenmiştir. Bu durum, süneklik değerindeki azalmayı da doğrulamaktadır.

İşlenebilirlik indeksi incelendiğinde ise değerlerin Nb konsantrasyonuna bağlı olarak azaldığı gözlenmiştir. Bu durum malzemenin işlenebilirliğini azaltmaktadır.

Alařım tasarımında önemli bir rol oynayan elastik anizotropiyi detaylı bir řekilde incelemek amacıyla, elastik modüllerin 3B modelleri yapılmıřtır ve Resim 4.11’de verilmiřtir.



Resim 4.11. Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alařımlarının elastik modüllerinin yöne baėlı 3B modelleri

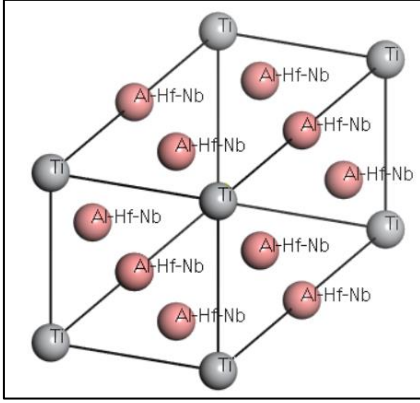


Resim 4.11. (devam) Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alařımlarının elastik modüllerinin yöne baęlı 3B modelleri

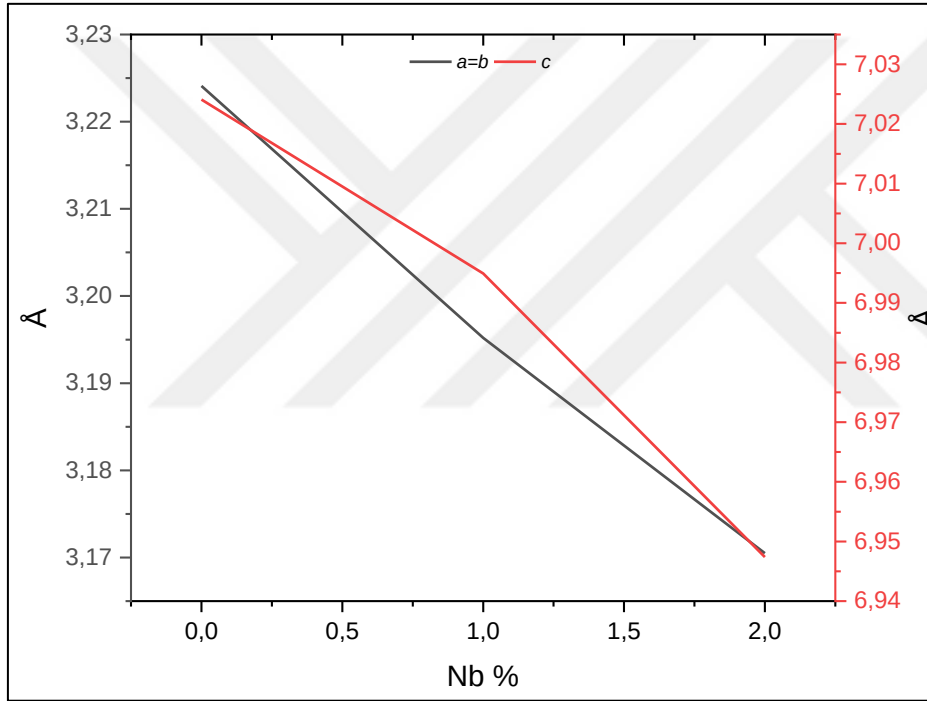
Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alařımlarının bulk modülünün yöne baęlı 3B modelleri incelendięinde baskın yönün %2 Nb konsantrasyonuna kadar (001) olduęu görülmektedir. Nb konsantrasyonu oranı %2'den fazla olduęunda ise baskın yön (010) yönüne doęru deęiřmiřtir. Elastisite modülde ise Nb konsantrasyonu arttıkça deęiřim gözlenmemiřtir. Kesme modülünde ise sadece %2 Nb konsantrasyonunda baskın yön yalnızca (001) iken dięer Nb bileřimlerinde ise (001) ve (010) yönleri baskın yönler olarak gözlenmiřtir.

4.4.3. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alařımları

Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alařımı % 0-2 Nb konsantrasyonunda alıřılmıřtır. %2 Nb sonrası artan konsantrasyonlarda alařım kararsız hale geldięi için sonuçlar %0-2 Nb konsantrasyonu için verilmektedir. Teorik alıřmaların bařlangıcında, alařımın Nb konsantrasyonuna baęlı olarak kafes parametreleri deęiřimi incelenmiřtir. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alařımının kristal yapısı uzay grubu I4/mmm (No.#139) yapıdır. İlgili yapı Resim 4.12'de sunulmuřtur.



Resim 4.12. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb kristal modeli



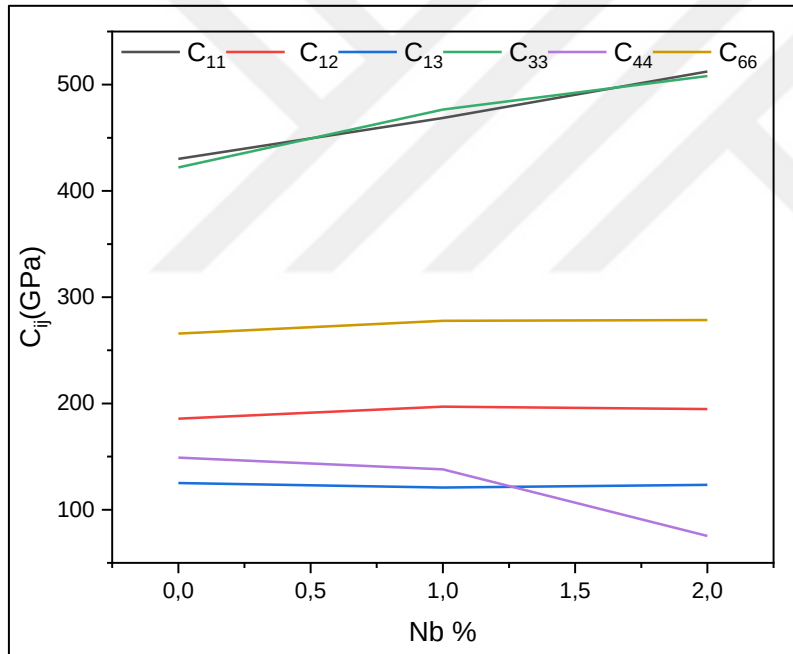
Şekil 4.23. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi

Şekil 4.23'ten de görüleceği üzere Nb ilavesi arttıkça “a”, “b” ve “c” kafes parametreleri azalmıştır. Benzer etki, Nb elementinin diğer TiAl alaşımlarının kafes parametrelerine olan etkisinde de gözlenmiştir [149]. Sistemin kararlılığını anlamak amacıyla, geometrik optimizasyon sonucu oluşan serbest enerji değerleri incelenmiştir. Çizelge 4.17'den görüleceği üzere alaşımların kararlı olduğu gözlenmiştir.

Çizelge 4.17. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri

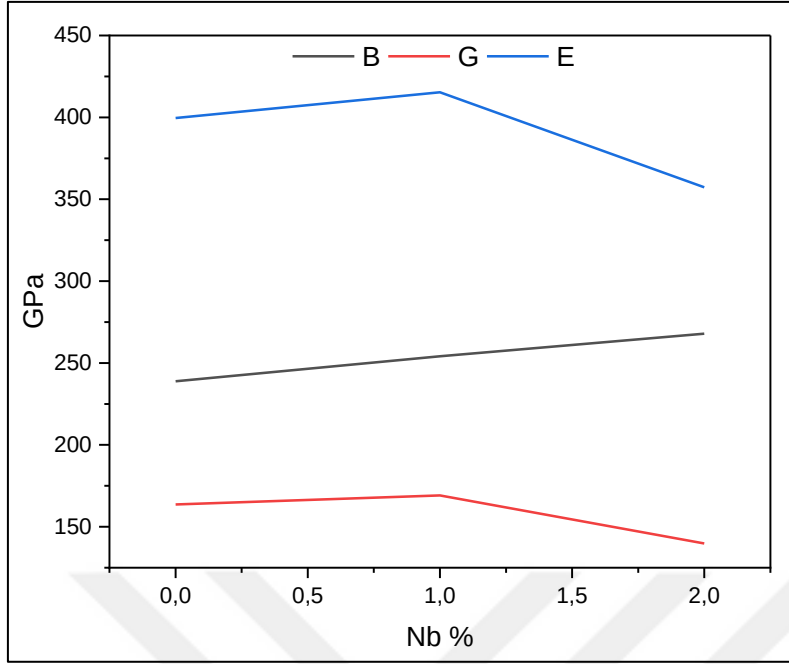
Özellik	Alaşım		
	Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb		
	x=0	x=1	x=2
$a=b$ (Å)	3.2241	3.1952	3.1705
c (Å)	7.0241	6.9949	6.9474
Sistem enerjisi (eV)	-1829	-1845	-1860

Mekanik özellikleri bulabilmek amacıyla, öncelikle elastik sabitleri hesaplanmıştır. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastik sabit değişimleri Şekil 4.24'te sunulmuştur.



Şekil 4.24. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi

Tetragonal yapıli kristal sistemlerde kullanılan mekanik kararlılık kriterleri doğrultusunda Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının mekanik olarak kararlı oldukları görülmüştür. Şekil 4.24'ten anlaşılaçağı üzere, C_{11} ve C_{33} elastik sabitleri Nb konsantrasyonu arttıkça artmış, C_{12} , C_{13} ve C_{66} elastik sabitleri sabit kalmış, C_{44} elastik sabiti ise azalmıştır.



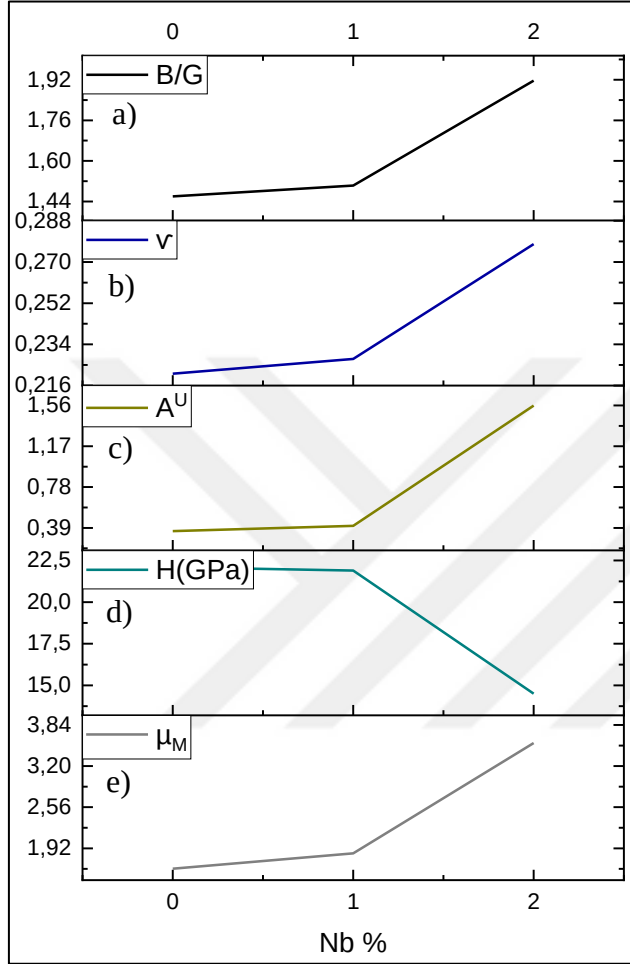
Şekil 4.25. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi

Çizelge 4.18. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım		
	Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb		
	x=0	x=1	x=2
C_{11}	430.2	468.7	512.4
C_{12}	185.7	197	194.7
C_{13}	125.1	120.9	123.5
C_{33}	422.1	476.5	508.1
C_{44}	149	138	75.3
C_{66}	265.8	277.8	278.5
B	238.9	254.2	268
G	163.6	169.2	139.8
E	399.6	415.3	357.3
B/G	1.46	1.50	1.91
ν	0.22	0.23	0.28
A^U	0.36	0.41	1.56
H_{Tian}	22.1	21.9	14.5
μ_M	1.60	1.84	3.56

Şekil 4.25 ve Çizelge 4.18'den görüleceği üzere kesme ve elastik modülleri % 1 Nb ilavesine kadar artmış, daha sonra azalmıştır. Bulk modülü ise artan Nb konsantrasyonu ile artmıştır. Şekil 4.26'dan anlaşılabacağı üzere, Pugh oranı alaşım %2 Nb konsantrasyonu içeriğine

sahipken, kritik deęer olan 1.75 deęerinin üzerine çıkmıř ve teorik olarak suneđek olarak gözlenmiřtir. Aynı řekilde poisson oranı %2 Nb bileřiminde 0.28 olarak bulunmuřtur. Bu deęer, alařımın bu kompozisyonda metalik karaktere sahip olduęunu göstermektedir.

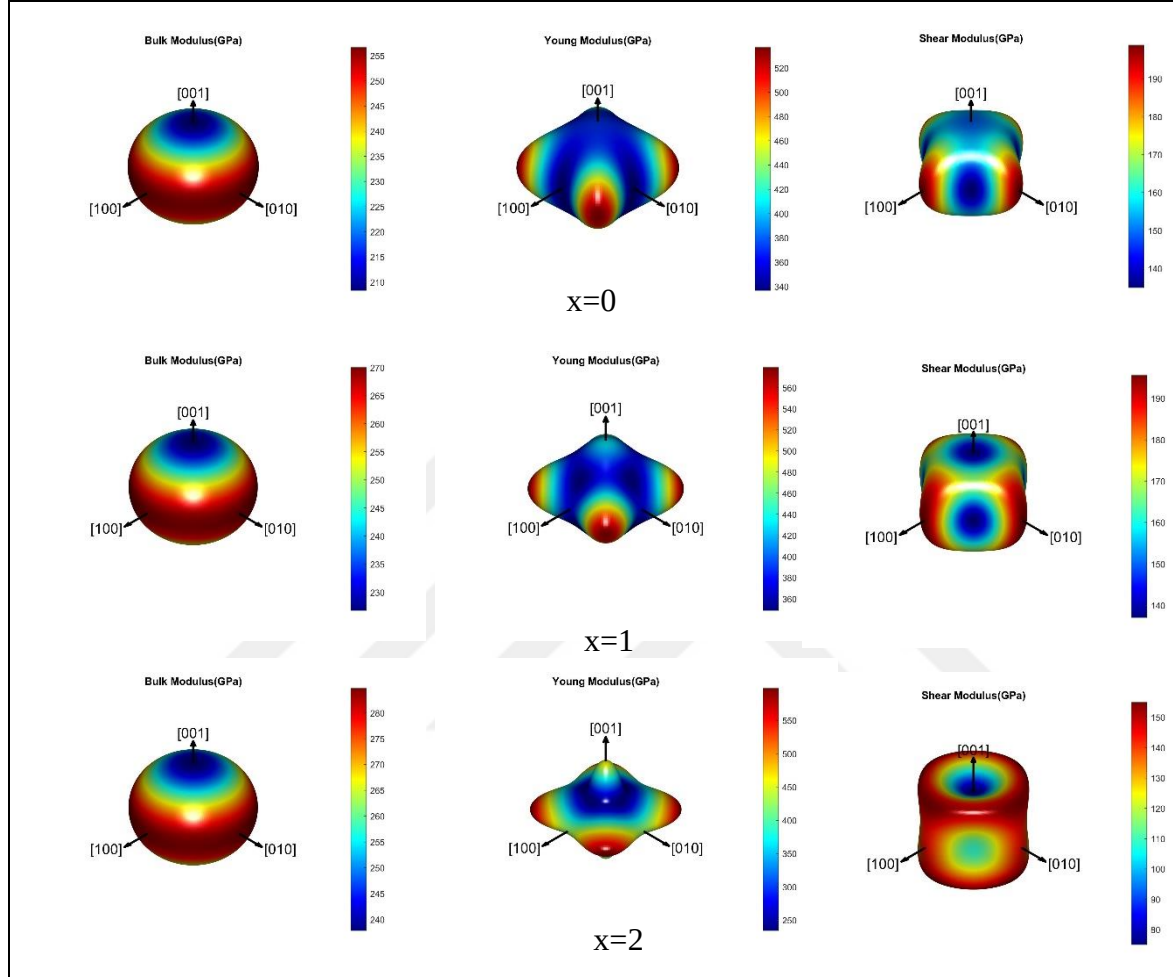


řekil 4.26. Nb %'ne baęlı olarak Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alařımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İřlenebilirlik indeksi deęiřimleri

Sertlik deęeri Nb konsantrasyonu ile azalmıřtır. Bu durum, suneđklik deęerindeki artıřı doęrulamaktadır.

İřlenebilirlik indeksi incelendięinde ise deęerlerin Nb konsantrasyonuna baęlı olarak arttıęı gözlenmiřtir. Nb konsantrasyonu %2 olduęunda iřlenebilirlik indeksi kritik deęer olan iki deęerinin üzerine çıkmıřtır.

Elastik anizotropi incelendiğinde, anizotropi değerlerinin Nb konsantrasyonu ile arttığı görülmüştür. Elastisite modüllerinin anizotropik davranışlarını görmek amacıyla 3B modelleri Resim 4.13'te verilmiştir.



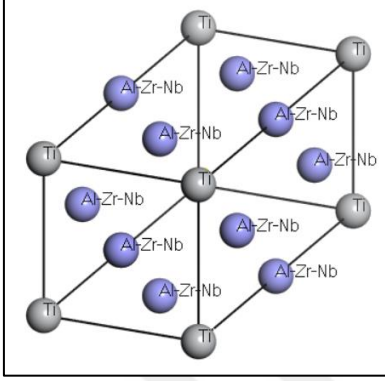
Resim 4.13. Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri

Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alaşımlarının bulk modülünün yöne bağlı 3B modelleri incelendiğinde baskın yönlerin (010) ve (100) yönleri olduğu ve artan Nb konsantrasyonu ile birlikte değişmediği görülmektedir. Benzer durum kesme ve elastik modülleri için de geçerli olup, Nb konsantrasyonu ile baskın yönlerde değişiklik olmamıştır.

4.4.4. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımları

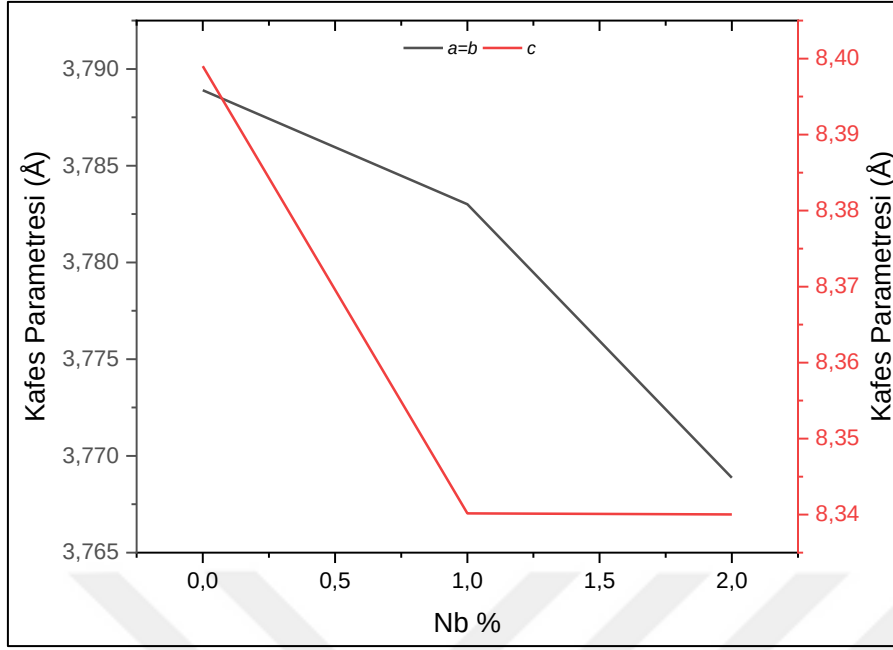
Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımı % 0-2 Nb konsantrasyonunda çalışılmıştır. %2 Nb sonrası artan konsantrasyonlarda alaşım mekanik olarak kararsız hale geldiği için sonuçlar % 0-2

Nb konsantrasyonu için verilmektedir. Teorik çalışmalara Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının Nb konsantrasyonuna bağlı olarak kafes parametreleri değişimi incelenerek başlanmıştır. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının kristal yapısı uzay grubu $I4/mmm$ (No.#139) olan tetragonal yapıdır. İlgili yapı Resim 4.14’te sunulmuştur.



Resim 4.14. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb kristal modeli

Şekil 4.27 ve Çizelge 4.19’den anlaşılabileceği üzere Nb ilavesi arttıkça “a”, “b” ve “c” kafes parametreleri azalmıştır. Benzer etki, daha önce de belirtildiği gibi, TiAl alaşımlarına Nb eklenmesi çalışmasında da gözlenmiştir. Sistemin kararlılığını anlamak amacıyla, geometrik optimizasyon sonucu oluşan serbest enerji değerlerine bakıldığında alaşımların kararlı olduğu görülmüştür.

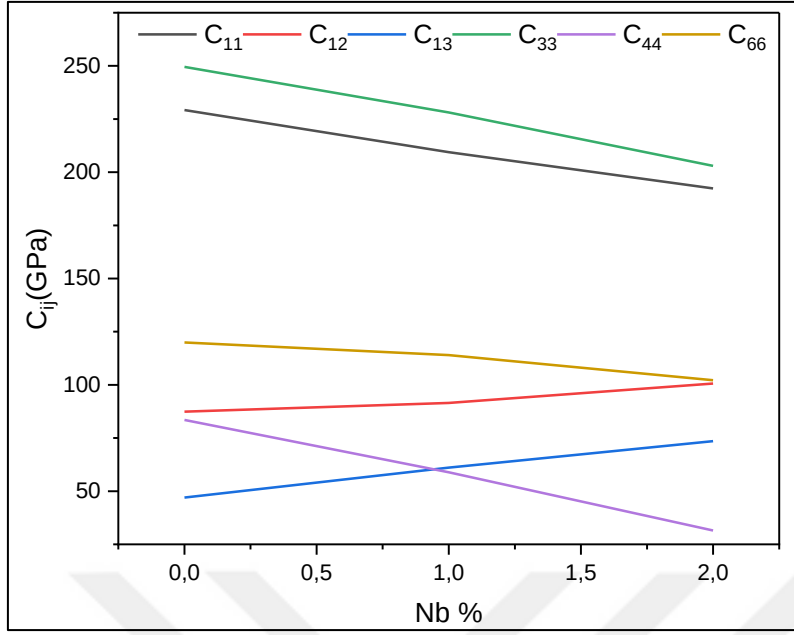


Şekil 4.27. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının Nb %'ne bağlı kafes parametreleri değişimi

Çizelge 4.19. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri

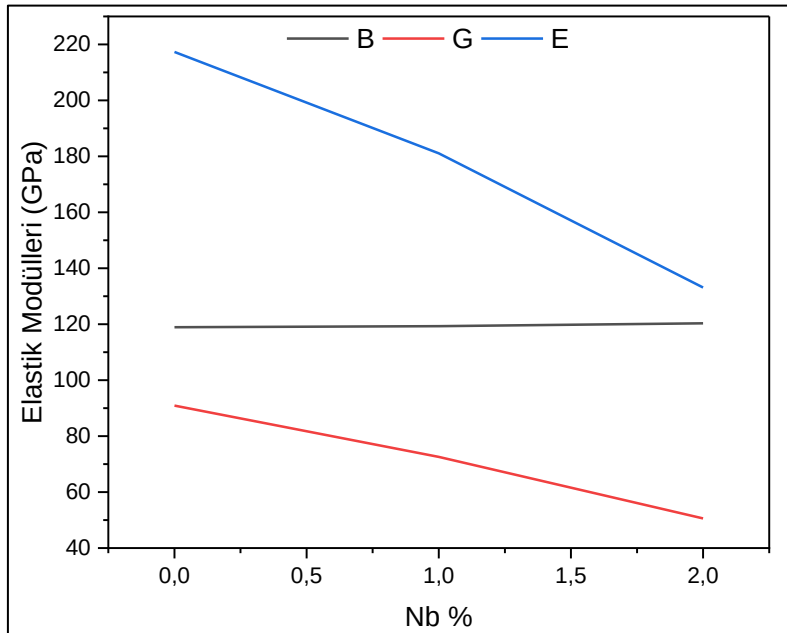
Özellik	Alaşım		
	Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb		
	x=0	x=1	x=2
a=b (Å)	3,7789	3,7830	3,7487
c (Å)	8.3990	8.3400	8.3840
Sistem enerjisi (eV)	-1821	-1835	-1849

Mekanik özellikleri incelemek amacıyla, öncelikle elastik sabitleri hesaplanmıştır. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik sabit değişimleri Şekil 4.28'de sunulmuştur.



Şekil 4.28. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi

Tetragonal yapılu kristal sistemlerde kullanılan mekanik kararlılık kriterleri doğrultusunda Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının mekanik olarak kararlı oldukları görülmüştür. Şekil 4.28'den anlaşılabacağı üzere, C_{11} , C_{33} , C_{44} ve C_{66} elastik sabitleri Nb bileşimi arttıkça azalırken, C_{12} ve C_{13} artmıştır.



Şekil 4.29. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi

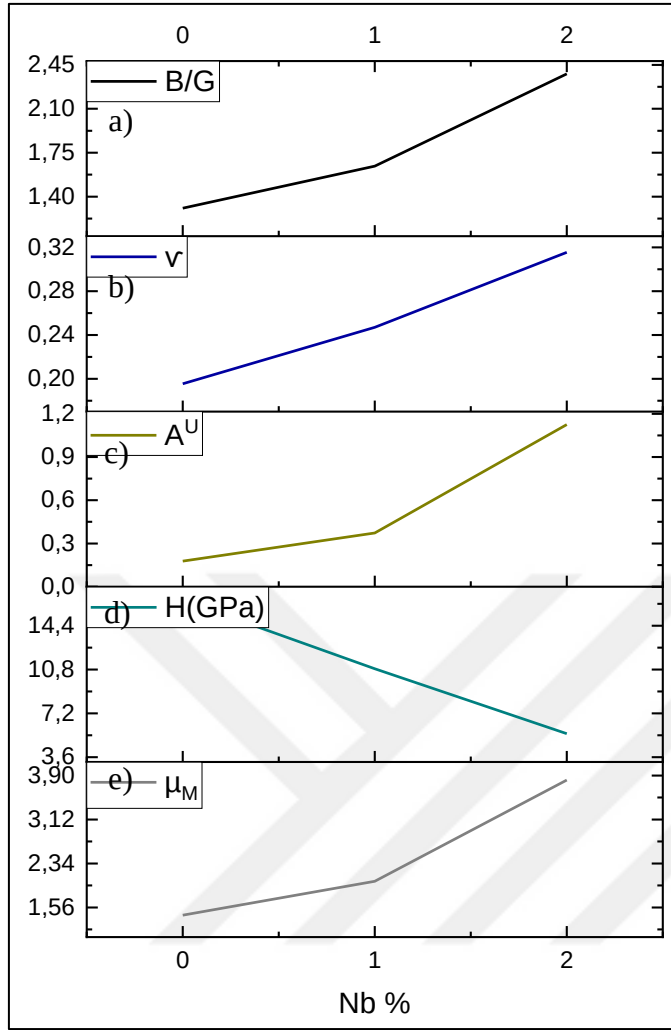
Şekil 4.29' ve Çizelge 4.20'den görüleceği üzere kayma ve elastisite modülleri Nb konsantrasyonu arttıkça azalmıştır. Bulk modülünde ise artan Nb konsantrasyonu karşısında önemli bir değişiklik olmamıştır. Pugh oranı Nb konsantrasyonuna bağlı olarak artmış ve alaşım %2 Nb bileşimi içerdiğinde, kritik değer olan 1.75 değerinin üzerine çıkmıştır. Aynı şekilde poisson oranı Nb konsantrasyonu %1 ve üzerine çıktığında kritik değer olan 0.25 değerinin üzerine çıkmıştır. Bu bulgular, Nb elementinin alaşımı daha sünek hale getirdiğini göstermektedir.

Çizelge 4.20. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım		
	Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb		
	x=0	x=1	x=2
C ₁₁	299.2	209.4	192.4
C ₁₂	87.4	91.5	100.6
C ₁₃	47.0	61.1	73.5
C ₃₃	249.5	228.1	203.0
C ₄₄	83.5	58.9	31.5
C ₆₆	119.9	114.0	102.2
B	118.9	119.3	120.3
G	90.9	72.6	50.6
E	217.3	181.1	133.1
B/G	1.31	1.64	2.37
v	0.20	0.25	1.32
A ^U	0.18	0.37	1.13
H _{Tian}	16.5	10.9	5.5
μ _M	1.42	2.03	3.82

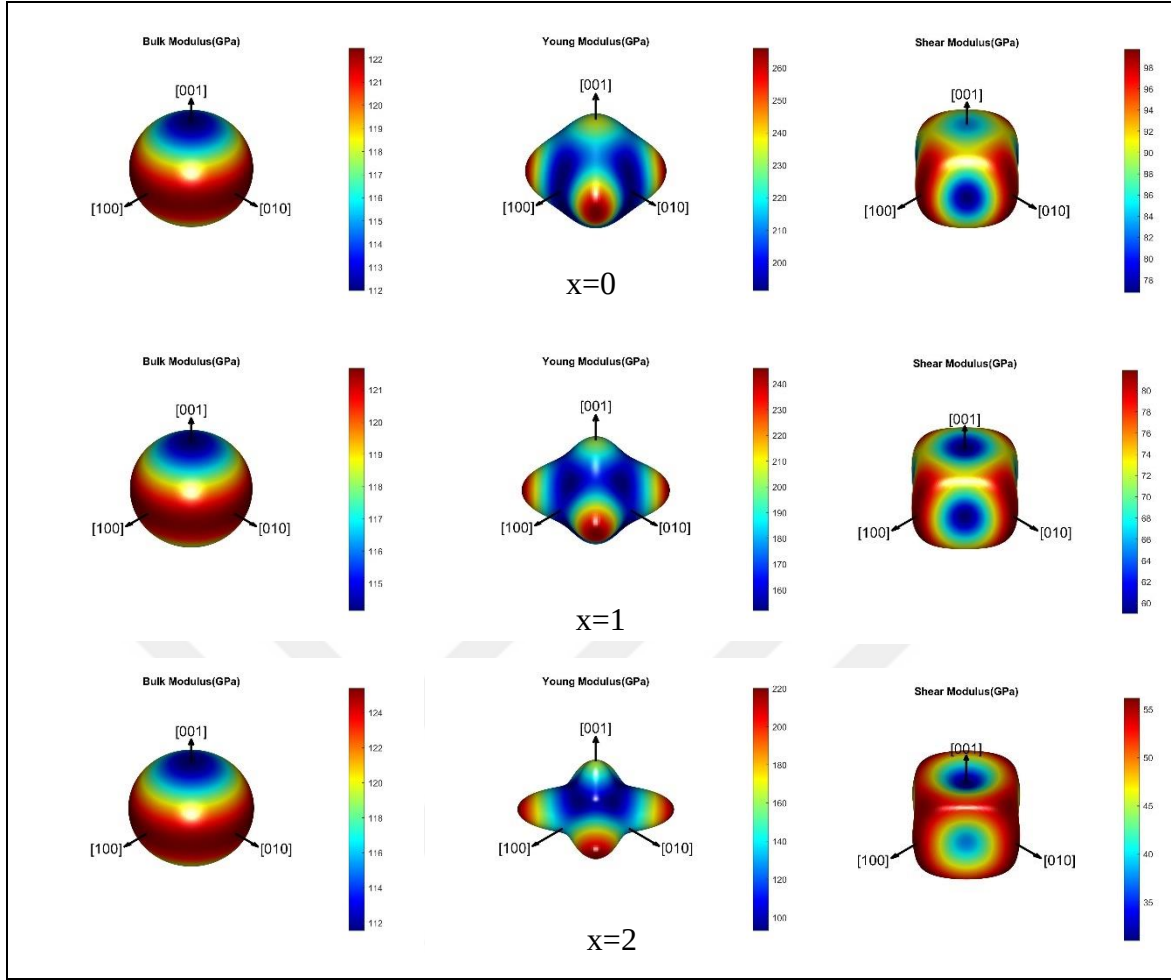
Şekil 4.30'da görüleceği üzere Sertlik değeri Nb konsantrasyonu ile azalmıştır. Bu bulgu da alaşımın Nb eklenmesiyle daha sünek hale geldiğini göstermektedir.

İşlenebilirlik indeksi incelendiğinde ise değerlerin Nb konsantrasyonuna bağlı olarak arttığı gözlenmiştir. Nb konsantrasyonu %1 olduğunda işlenebilirlik indeksi kritik değer olan iki değerinin üzerine çıkmıştır.



Şekil 4.30. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri

Elastik anizotropi özelliğine bakıldığında ise, anizotropi değerlerinin Nb konsantrasyonu ile arttığı görülmüştür. Elastik modüllerinin anizotropik davranışlarını görmek amacıyla 3B modellemeleri Resim 4.15'te sunulmuştur.

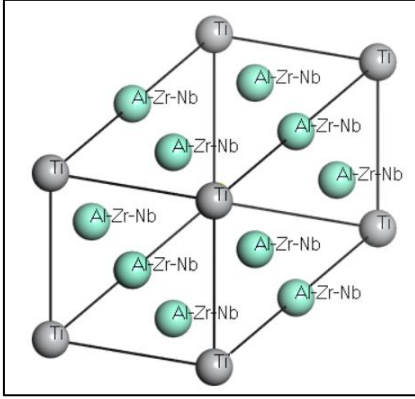


Resim 4.15. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri

Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının bulk modülünün yöne bağlı 3B modelleri incelendiğinde baskın yönlerin (010) ve (100) yönleri olduğu ve artan Nb konsantrasyonu ile birlikte değişmediği görülmektedir. Benzer durum kesme ve elastisite modülleri için de geçerli olup, Nb konsantrasyonu ile baskın yönlerde değişiklik olmamıştır.

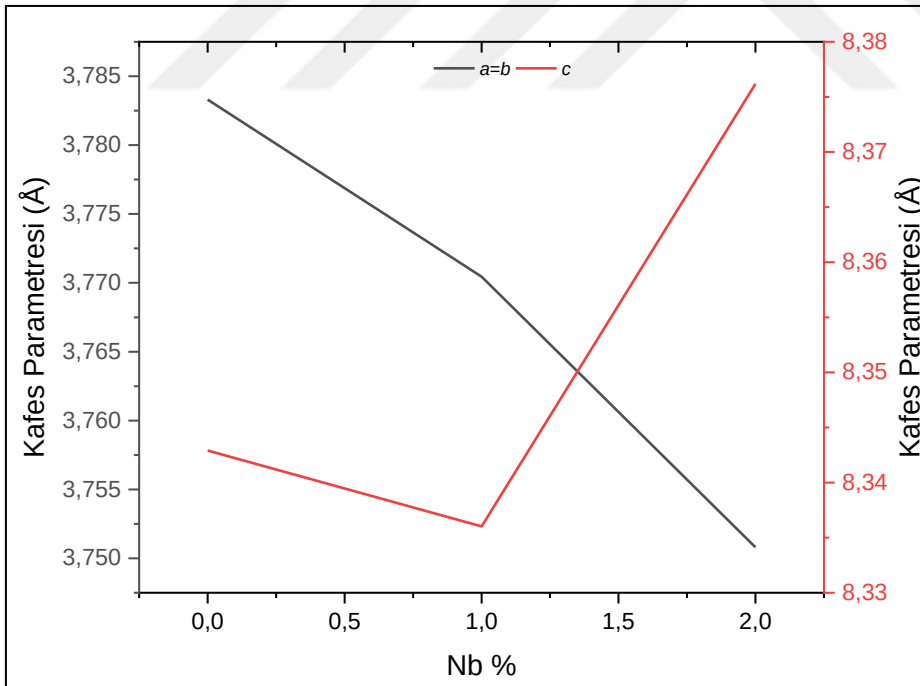
4.4.5. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımları

Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımı % 0-2 Nb konsantrasyonunda çalışılmıştır. %2 Nb sonrası artan konsantrasyonlarda alaşım mekanik olarak kararsız hale geldiği için sonuçlar % 0-2 Nb konsantrasyonu için verilmektedir. Teorik çalışmalara Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımının Nb konsantrasyonuna bağlı olarak kafes parametreleri değişimi incelenerek başlanmıştır. Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alaşımının kristal yapısı uzay grubu $I4/mmm$ (No.#139) olan tetragonal yapıdır. İlgili yapı Resim 4.16'da verilmiştir.



Resim 4.16. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb kristal modeli

Şekil 4.31’de ve Çizelge 4.21’den anlaşılabacağı üzere Nb ilavesi arttıkça “a” ve “b” kafes parametreleri azalmış, “c” kafes parametresi ise %1 Nb konsantrasyonuna kadar azalmış bu kompozisyonundan sonra artmıştır. Sistemin kararlılığını anlamak amacıyla, geometrik optimizasyon sonucu oluşan serbest enerji değerlerine bakıldığında alaşımların karalı olduğu görülmüştür.

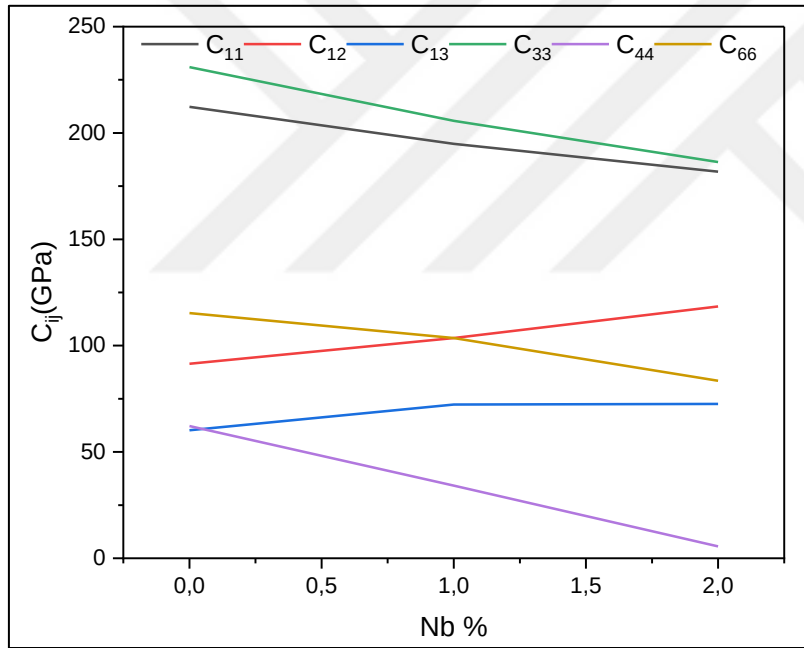


Şekil 4.31. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının Nb %’ne bağlı kafes parametreleri değişimi

Çizelge 4.21. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının kafes parametreleri ve sistem enerjileri

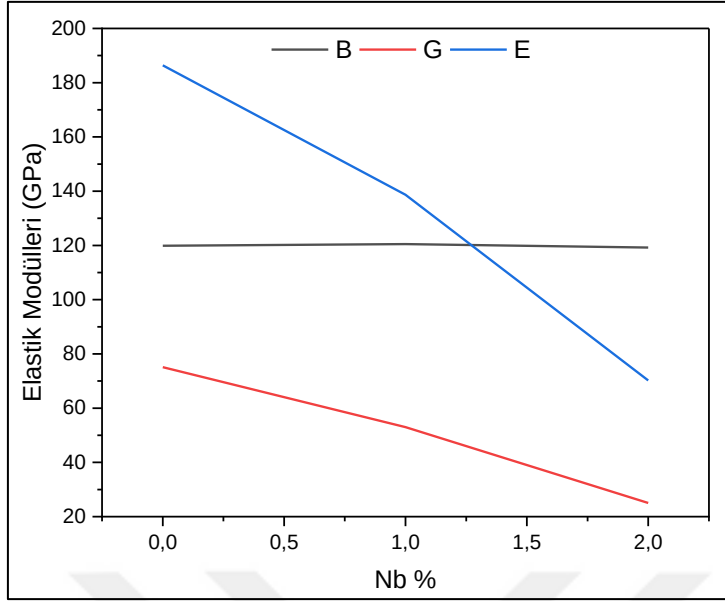
Özellik	Alaşım		
	Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb		
	x=0	x=1	x=2
$a=b$ (Å)	3,7833	3,7704	3,7508
c (Å)	8.3429	8.3360	8.3762
Sistem enerjisi (eV)	-1833	-1848	-1863

Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının mekanik özelliklerini bulmak amacıyla, öncelikle elastik sabitleri hesaplanmıştır. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik sabit değişimleri Şekil 4.32'de sunulmuştur.



Şekil 4.32. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri değişimi

Tetragonal yapıli kristal sistemler kapsamında mekanik kararlılık kriterleri doğrultusunda Ti-(57-x)Al-4Zr-xNb alaşımlarının mekanik olarak kararlı oldukları görülmüştür. Şekil 4.32'den anlaşılaçağı üzere, Nb konsantrasyonu arttıkça C₁₂ ve C₁₃ elastik sabitleri artarken C₁₁, C₃₃, C₄₄ ve C₆₆ elastik sabitleri azalmıştır.



Şekil 4.33. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik modülleri değişimi

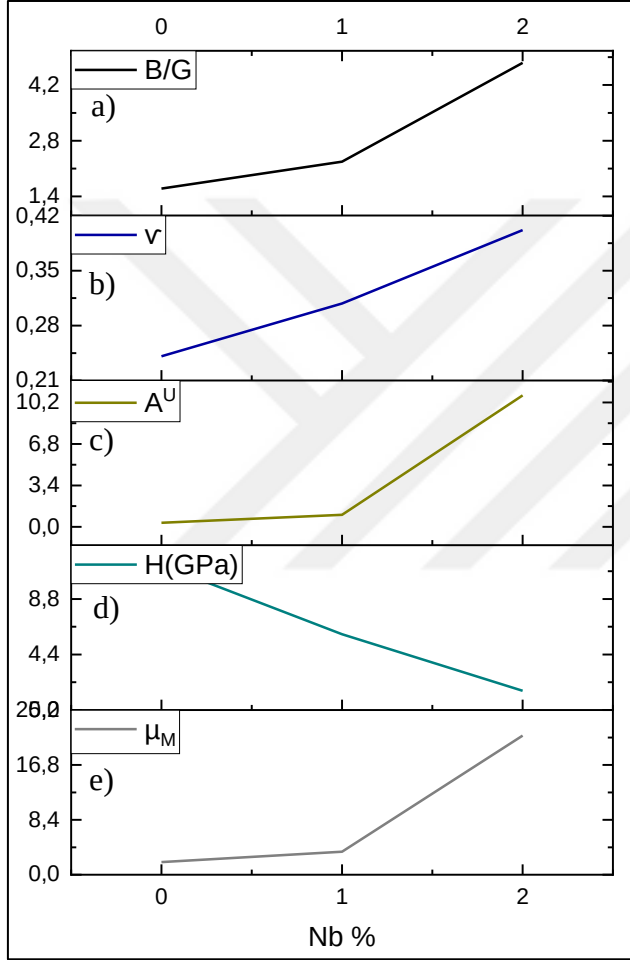
Şekil 4.33 ve Çizelge 4.22'den görüleceği üzere Nb konsantrasyonu arttıkça bulk modülü değişmezken, kayma ve elastisite modülleri azalmıştır. Ancak, alaşım %2 Nb konsantrasyonu içerdiğinde kayma modülü değeri çok azalmıştır. Pugh oranı Nb konsantrasyonuna bağlı olarak artmış ve alaşım Nb içerdiğinde, kritik değer olan 1.75 değerinin üzerine çıkmıştır. Aynı şekilde poisson oranı Nb konsantrasyonu ile kritik değer olan 0.25 değerinin üzerine çıkmıştır. Bu bulgular, Nb elementinin alaşımı daha sünek halde getirdiğini göstermektedir.

Çizelge 4.22. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastik sabitleri ve mekanik özellikleri

Özellik	Alaşım		
	Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb		
	x=0	x=1	x=2
C ₁₁	212.3	194.9	181.8
C ₁₂	91.5	103.6	118.4
C ₁₃	60.2	72.3	72.6
C ₃₃	231	205.7	186.3
C ₄₄	62.2	34.2	5.6
C ₆₆	115.3	103.6	83.5
B	119.9	120.5	119.2
G	75.1	53.0	25.1
E	186.4	138.7	70.2
B/G	1.60	2.27	4.76
ν	0.24	0.31	0.40
A ^U	0.34	0.99	10.8
H _{Tian}	11.5	6.0	1.5
μ_M	1.93	3.52	21.29

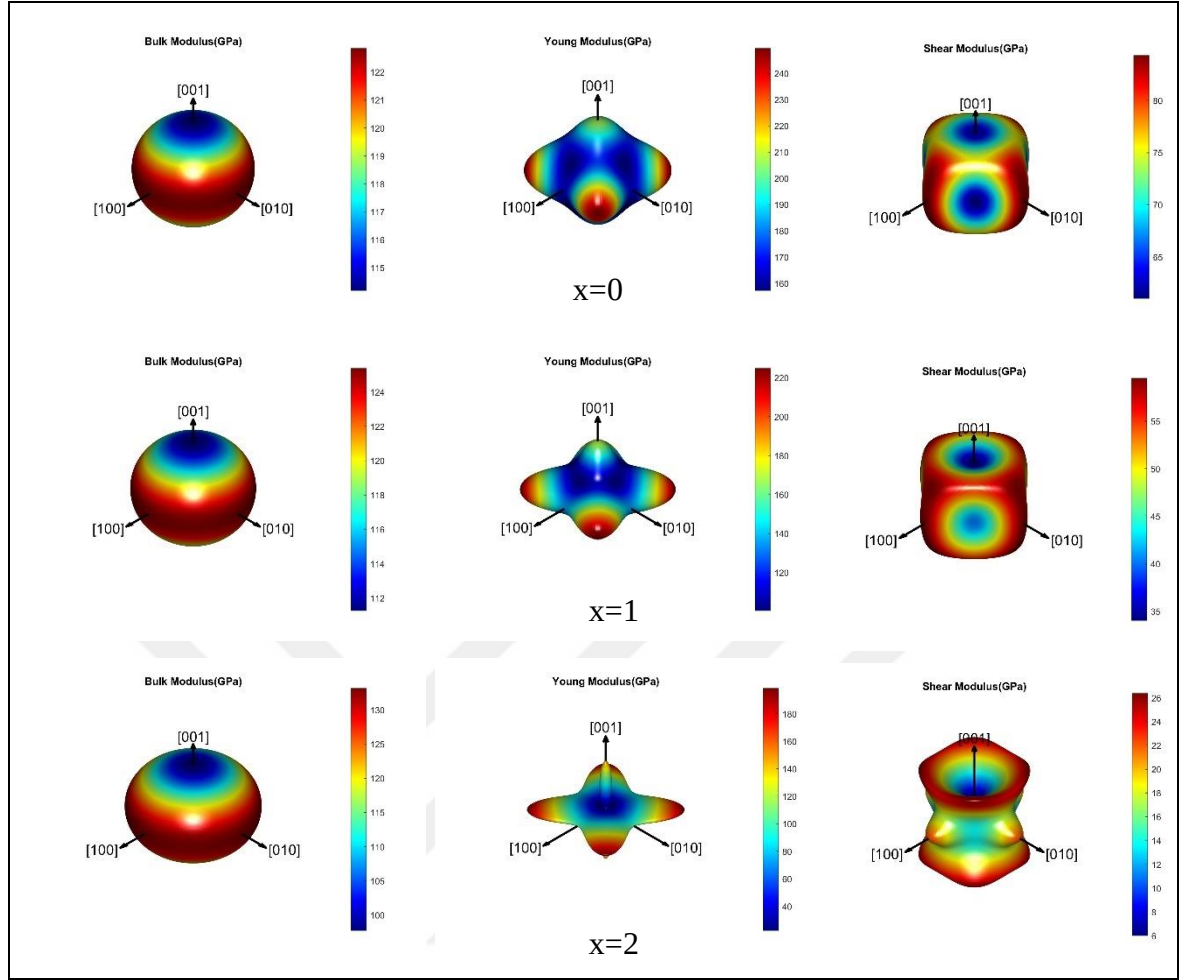
Şekil 4.34'ten anlaşılacağı üzere sertlik değeri Nb konsantrasyonu ile azalmıştır. Bu sonuç da alaşımın Nb eklenmesi ile daha sünek hale geldiğini doğrulamaktadır.

İşlenebilirlik indeksi incelendiğinde ise değerlerin Nb konsantrasyonuna bağlı olarak arttığı gözlenmiştir. Alaşıma Nb eklendiğinde işlenebilirlik indeksi kritik değer olan iki değerinin üzerine çıkmıştır.



Şekil 4.34. Nb %'ne bağlı olarak Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının a) B/G oranı, b) Poisson oranı, c) Anizotropi, d) Sertlik, e) İşlenebilirlik indeksi değişimleri

Elastik anizotropi özelliğine bakıldığında ise, anizotropi değerlerinin Nb konsantrasyonu ile arttığı görülmüştür. Elastik modüllerinin anizotropik davranışlarını görmek amacıyla 3B modelleri yapılmıştır ve Resim 4.17'de verilmiştir.



Resim 4.17. Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının elastisite modüllerinin yöne bağlı 3B modelleri

Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alaşımlarının bulk modülünün yöne bağlı 3B modelleri incelendiğinde baskın yönlerin (010) ve (100) yönleri olduğu ve artan Nb konsantrasyonu ile birlikte değişmediği görülmektedir. Benzer durum kesme ve elastisite modülleri için de geçerli olup, Nb konsantrasyonu ile baskın yönlerde değişiklik olmamıştır. Ancak, özellikle %2 Nb konsantrasyonunda mekanik kararlılığın azaldığı gözlenmiştir.

4.5. Deneysel Çalışma Sonuçları

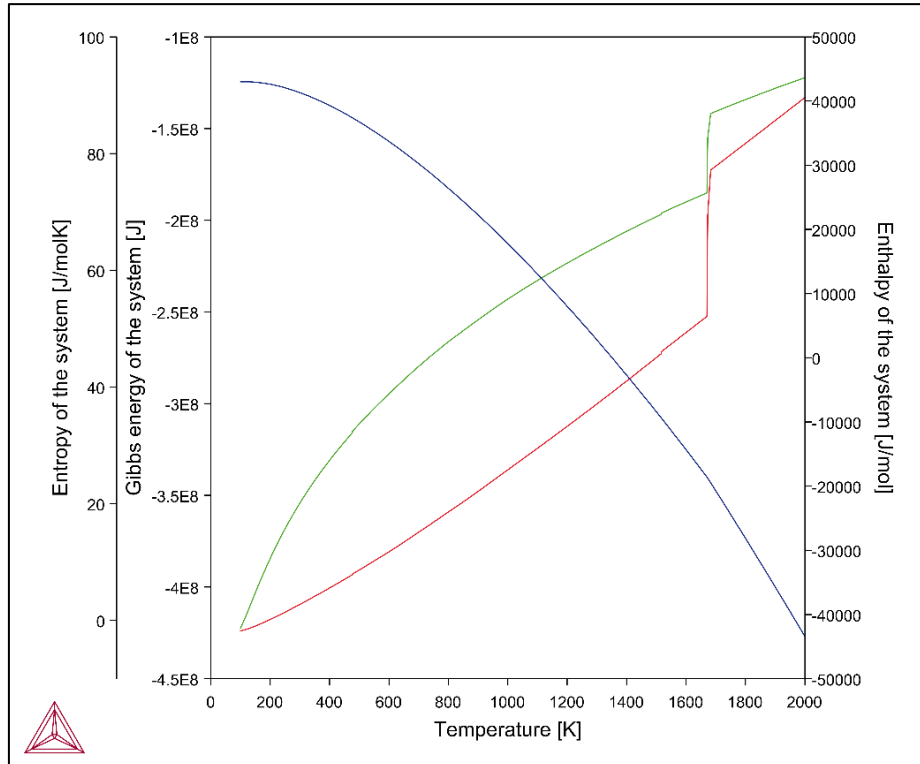
Deneysel çalışmalar, ThermoCalc programı ile üretimi yapılacak her bir alaşımların termodinamik özelliklerinin ve katılma sonrası oluşabilecek fazların incelenmesiyle başlayıp, üretim ve karakterizasyon adımlarıyla devam etmiştir. Tasarım aşaması sonrası teorik olarak yapısal ve mekanik olarak kararlı, süneklik ve mukavemet özellikleri uygun aşağıdaki alaşımlar üretilmiş ve karakterize edilmiştir.

- Ti-56Al-4Zr-2Nb
- Ti-56Al-4Hf-2Nb
- Ti-56Al-4Hf-2Zr
- Ti-56Al-5Zr-1Nb
- Ti-45Al-6Zr
- Ti-44Al-6Zr-1Nb
- Ti-43Al-6Zr-2Nb
- Ti-44Al-6Hf-1Nb
- Ti-43Al-6Hf-2Nb

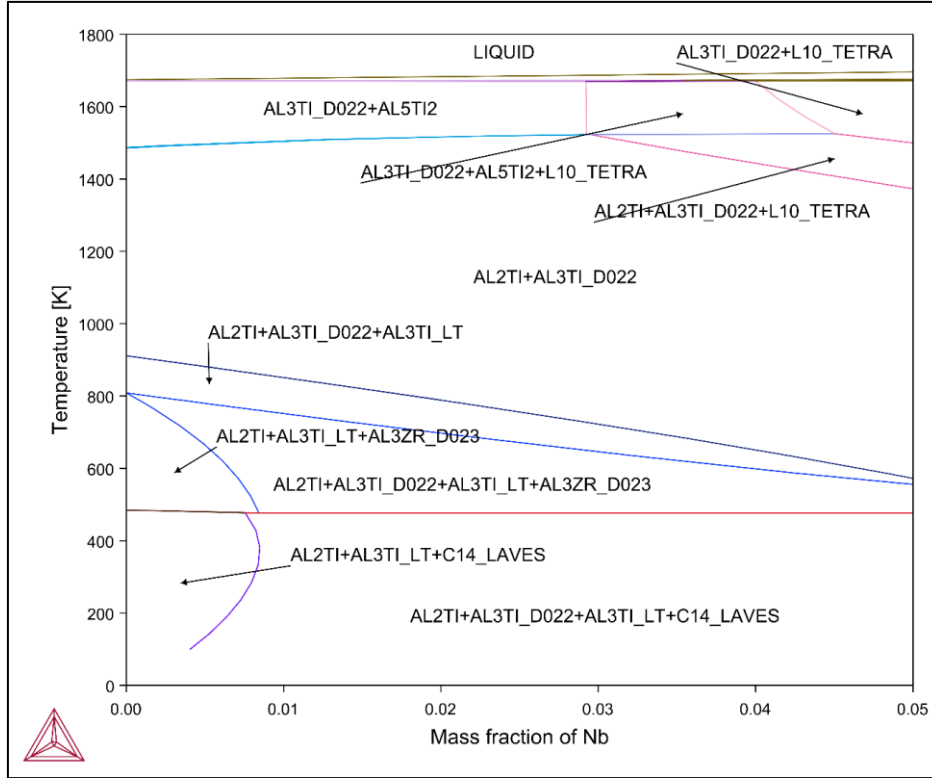
4.5.1. Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımı

Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımının üretiminden önce, termodinamik özelliklerinin anlaşılması ve döküm sonrası oluşabilecek fazların görülmesi amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıştır.

Şekil 4.35'ten görüleceđi üzere Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımının artan sıcaklıkla Gibbs enerjisinin azaldıđı, entropi değeriinin ise arttıđı gözlenmiştir. Bu bulgular Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımının termodinamik olarak kararlı olduđunu göstermiştir.



Şekil 4.35. Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımının sıcaklık-ısı grafiđi



Şekil 4.36. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımasının faz diyagramı

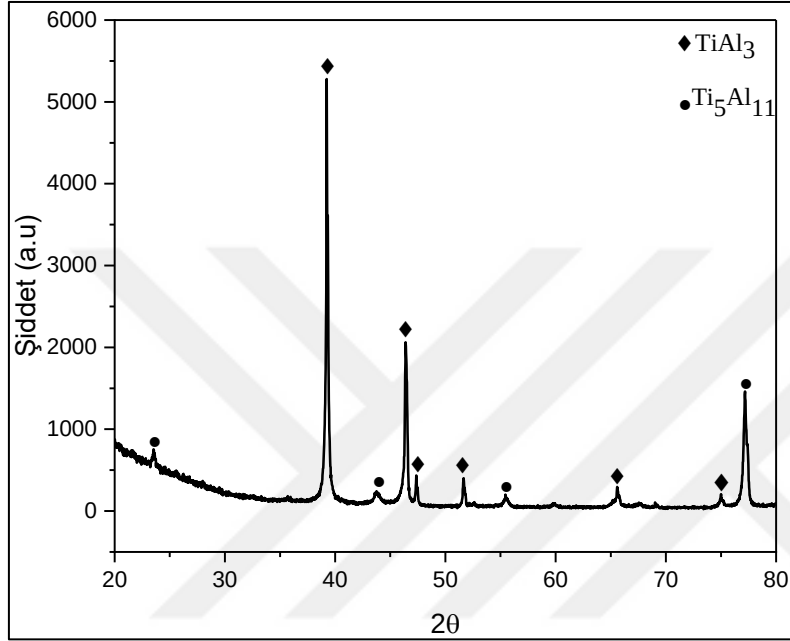
Şekil 4.36'dan görüleceği üzere katılaşma sonucu $TiAl_2$, $TiAl_3$ ve C14 Laves fazı oluşması beklenmektedir. Ayrıca, uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olduğu ve alaşımanın katılaşması sonucu denge dışı fazlar oluşturabileceği anlaşılmıştır.



Resim 4.18. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımı numunesi

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımanın deneysel sonuçlarını anlamak amacıyla vakum indüksiyon ergitme metodu ile ham malzemeler ergitilip, bakır kalıba döküm yapılmıştır. Yaklaşık 25 mm boyunda ve 12.5 mm çapında numuneler elde edilmiştir. Resim 4.18'den anlaşılabacağı üzere alaşım bakır kalıptan çıkarıldığında cüruf bölgesinden kırılmış bir şekilde olduğu görülmüştür, dolayısıyla radyografik muayene yapılmamıştır. Ancak, yapılan görsel

muayene de alaşımin geri kalan bölümünde fazla boşluk ya da çatlığa rastlanmamıştır. Dökülen alaşımin yoğunluğu boşluk olmayan bölgeden Arşimet yoluyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,691 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur. Deneysel olarak çalışılan alaşımin fazlarını anlamak amacıyla, alaşıma X-ışını kırınım testi (XRD) yapılmıştır. Şekil 4.37’de verilen XRD grafiğine bakıldığında alaşımda TiAl_3 ve $\text{Ti}_5\text{Al}_{11}$ fazlarının oluştuğu gözlenmiştir.



Şekil 4.37. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşıminin XRD grafiği

Fazların kafes parametreleri olan a ve c , indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, aşağıda detayları verilen Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır. Denklemden $\lambda=1,5406 \text{ Å}$ Cu- $K\alpha$ radyasyonu için, θ Bragg açısı ve h , k , l , kafes parametrelerini belirlemek için birleştirilen kırınım düzlemlerinin indisleridir.

$$\lambda = 2d\sin\theta \quad (\lambda=1,5406) \quad (4.10)$$

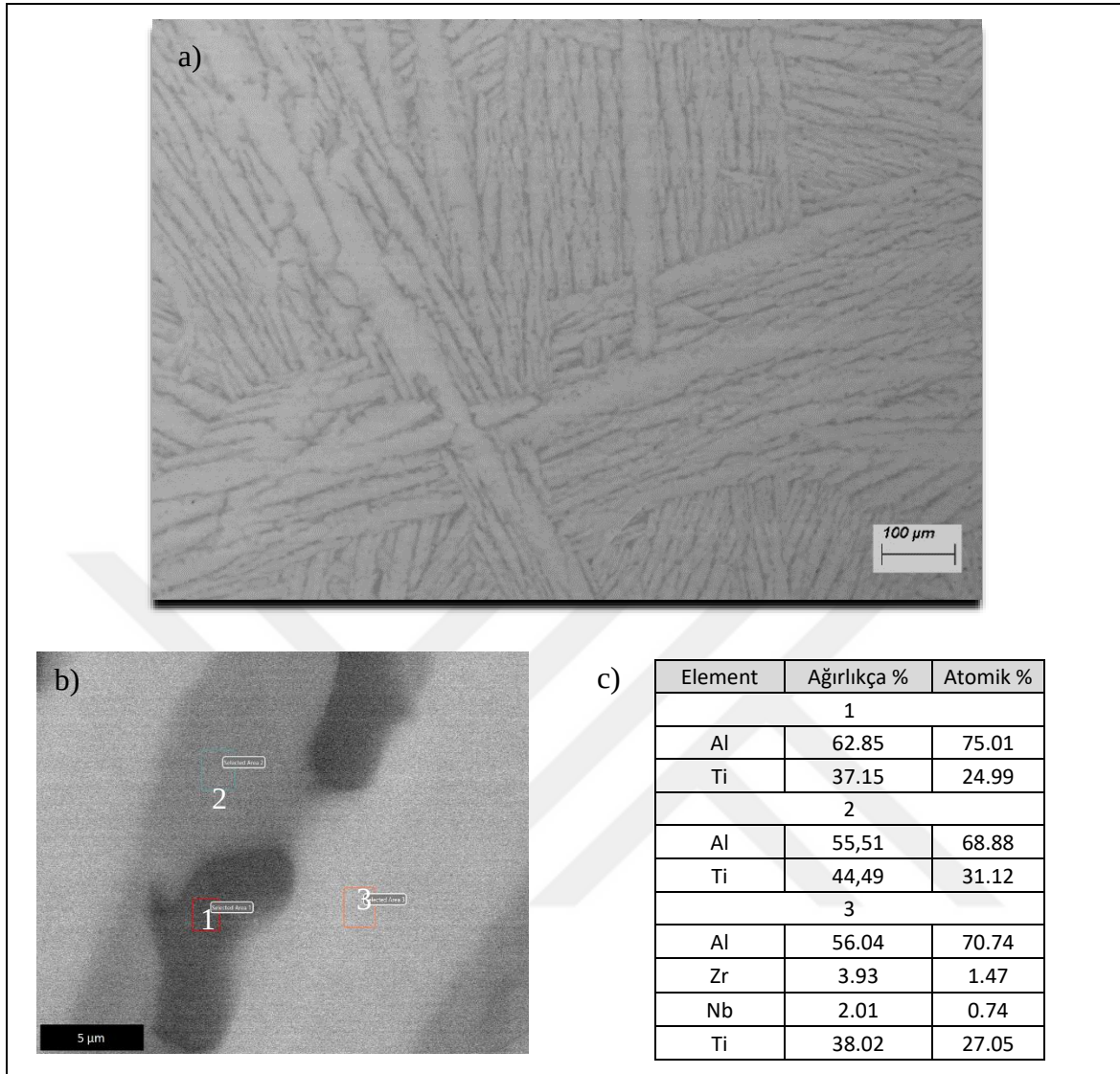
$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2} \quad (4.11)$$

Çizelge 4.23, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal TiAl_3 yapısının kafes parametreleri $a=3.840 \text{ Å}$ ile $c=8.580 \text{ Å}$ ve $a=3.923 \text{ Å}$ ile $c=16.535 \text{ Å}$ ise $\text{Ti}_5\text{Al}_{11}$ fazına ait kafes parametreleridir.

Çizelge 4.23. Ti-56Al-4Nb-2Zr alaşımasının teorik ve deneysel kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-56Al-4Nb-2Zr	<i>a</i> (teo.)	3.769
	<i>c</i> (teo.)	8.340
TiAl ₃	<i>a</i> (deney.)	3.840
	<i>c</i> (deney.)	8.580
Ti ₅ Al ₁₁	<i>a</i> (deney.)	3.923
	<i>c</i> (deney.)	16.535

Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımasının SEM görüntüleri Resim 4.19’da verilmiştir. Alaşımanın mikro yapısı kaba iğnemsî döküm yapıdadır. Resim 4.19’da görülen koyu renkli faz atomik olarak %75.01 Al ve %24.99 Ti, gri faz (2) ise % 68.88 Al ve % 31.12 Ti içermektedir. XRD ve EDS analizleri ile değerlendirildiğinde fazların TiAl₃ ve Ti₅Al₁₁ fazları olduğu doğrulanmıştır. TiAl₃ bu konsantrasyonda ve ThermoCalc sonuçlarına (L10 tetragonal yapı) göre beklenen bir faz olmasına rağmen, yüksek sıcaklık fazı olan Ti₅Al₁₁ fazı oluşumu beklenmemiştir. Ti₅Al₁₁’in ötektoidal olarak TiAl₂ ve TiAl₃’e ayrıştığı bilinmektedir [150]. Ancak Braun’un [151] öne sürdüğü gibi ötektoidal reaksiyonun güçlü bir aşırı soğuma eğilimi göstermesi nedeniyle Ti₅Al₁₁’in çoğu durumda yapı içinde dönüştürülmemiş olarak kaldığını ve Al içeriği arttıkça Ti₅Al₁₁ fazının miktarının arttığını gözlemlemişlerdir. Bu bulgu ThermoCalc verilerinde göre neden C14 Laves fazının dökülen alaşımda oluşmadığını göstermektedir. Matrisi gösteren açık renkli bölge, vakum indüksiyonlu ergitme işleminin homojenliğini kanıtlayan, hedeflenen bileşimdeki tüm bileşen elementlerden oluşmaktadır.



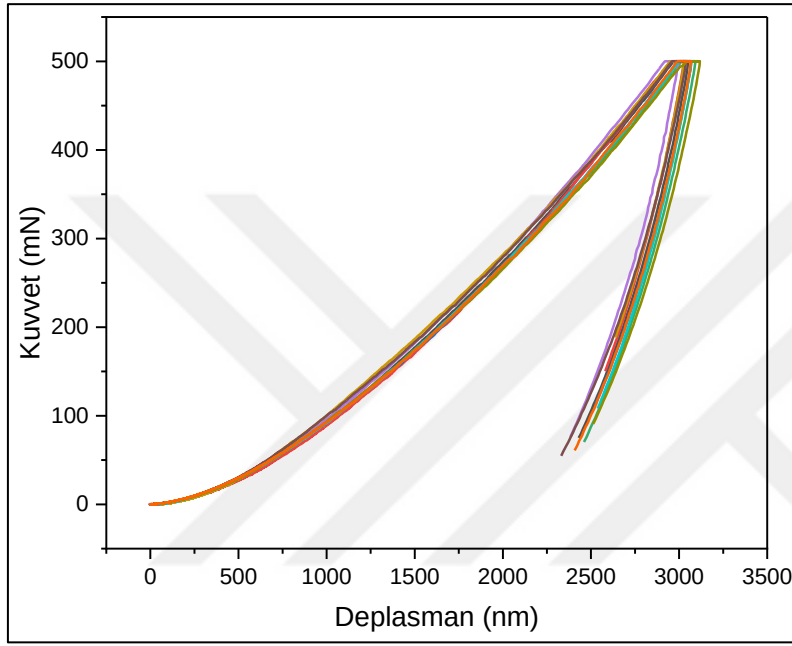
Resim 4.19. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımasının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Teorik olan bulunan mekanik özellikleri doğrulamak için hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımanın mikrosertlik değeri ortalama 434 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.24. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımasının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
133.1 (teo.)	5.53 (teo.)	434 (deney.)
149.5 (deney.)	5.34 (deney.)	

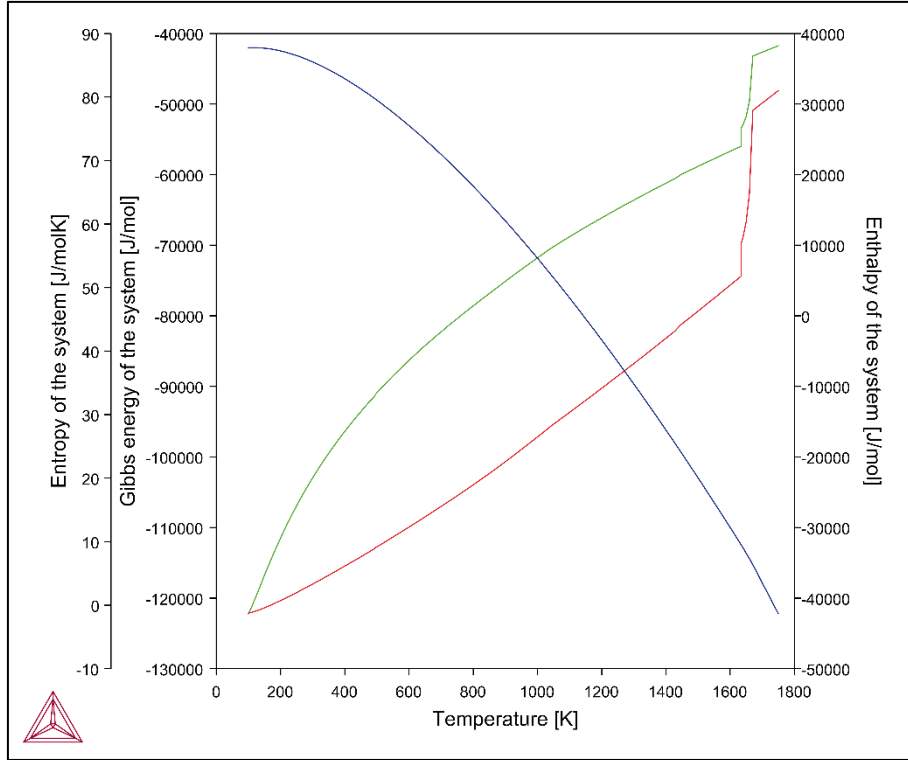
Teorik sonuçlar ve nanoindentasyon test sonuçlarının ortalaması karşılaştırmak amacıyla Çizelge 4.24'te gösterilmiştir. Nanoindentasyon testinde ise Şekil 4.38'den görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiştir. Teorik ve deneysel elastisite modül ve sertlik değerleri iyi bir uyum içindedir. Sonuçlar alaşımsız $TiAl_3$ fazı ile karşılaştırıldığında Nb ve Zr eklemenin elastik modülü 208,5 GPa'dan [116] 150.5 GPa'ya düşürdüğü anlaşılmıştır. Ayrıca, sertliğin 19,5 GPa'dan [113] 5.34 GPa'ya düşürülmesi, süneklikte iyileşmenin işaretidir.



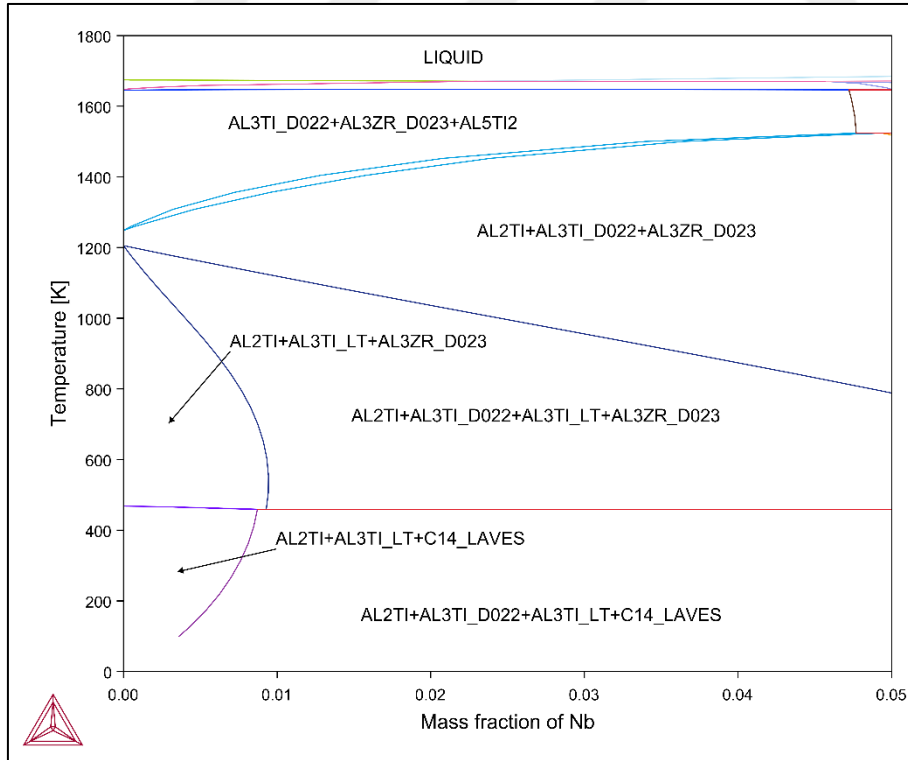
Şekil 4.38. Ti-56Al-4Zr-2Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

4.5.2. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımı

Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının üretilmesinden önce termodinamik özelliklerini ve faz diyagramını anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıştır.



Şekil 4.39. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının sıcaklık-ısı grafiği



Şekil 4.40. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının faz diyagramı

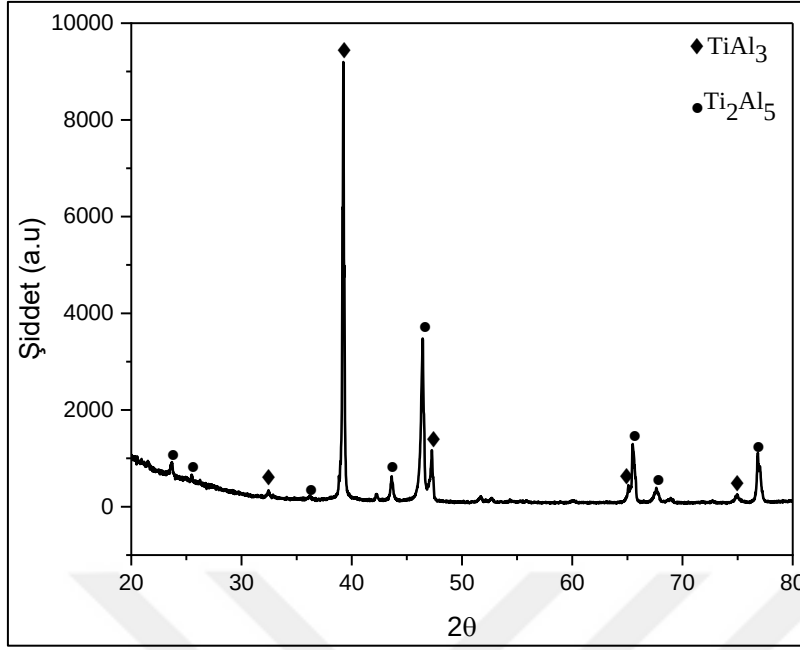
Şekil 4.39'dan anlaşılabacağı üzere Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımlarının artan sıcaklıkla Gibbs enerjisi azalmış, entropi değeri ise artmıştır. Bu sonuçlar Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımlarının termodinamik olarak kararlı olduğunu göstermiştir.

Şekil 4.40'tan görüleceği üzere belirlenen kompozisyonda katılaşma sonrası, $TiAl_2$, $TiAl_3$, ve C14 laves fazlarının oluşabileceği görülmektedir. Bununla beraber, denge eğrisinin soğutma eğrisine yakın olması, bu kompozisyonda uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasına yakın olduğunu göstermektedir.



Resim 4.20. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımı numunesi

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımların üretimi aşamasına geçilmiştir. Vakum indüksiyon ergitme metodu ile ham malzemeler ergitilip, bakır kalıba döküm yapılmıştır. Resim 4.20'den anlaşılabacağı üzere alaşım bakır kalıptan kırılmış halde çıkarılmıştır, dolayısıyla alaşıma sadece görsel muayene uygulanmıştır. Yapılan görsel muayene de alaşımların geri kalan bölümünde bazı boşluklar olduğu görülmüş ve kırılmanın bu boşluklardan kaynaklı olduğu yorumu yapılmıştır. Dökülen alaşımların yoğunluğu boşluk olmayan bölgeden Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,762 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur. Deneysel olarak çalışılan alaşımların fazlarını anlamak amacıyla, alaşıma X-Ray kırınım testi (XRD) yapılmıştır. Şekil 4.41'deki XRD grafiğine bakıldığında alaşımda Ti_2Al_5 ve $TiAl_3$ fazlarının oluştuğu gözlenmiştir.



Şekil 4.41. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşıminin XRD grafiği

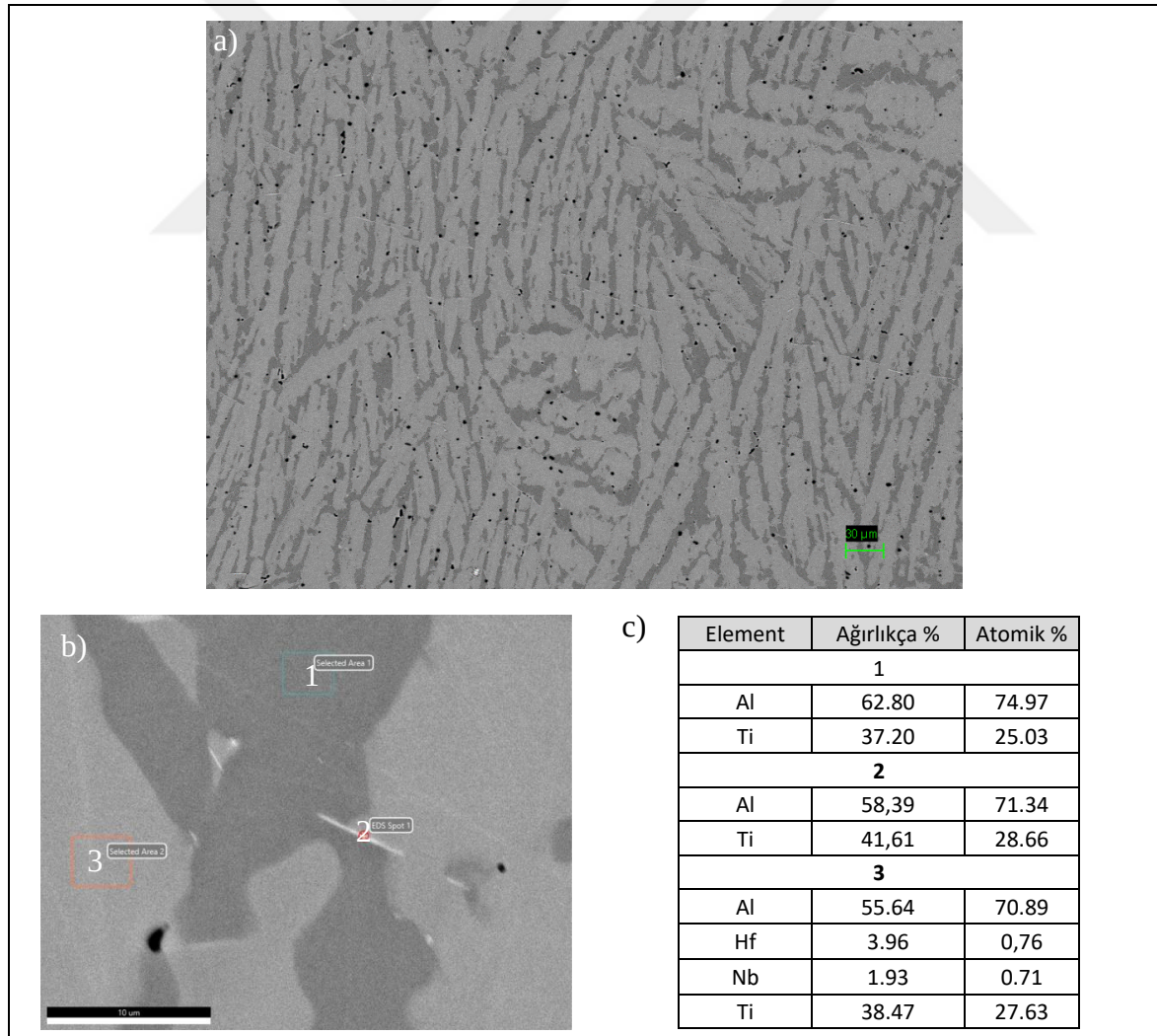
Fazların kafes parametreleri olan a ve c , indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, daha önceden detayları belirtildiği üzere Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır. Çizelge 4.25, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal TiAl_3 yapısının kafes parametreleri $a=3.853 \text{ \AA}$ ile $c=8.584 \text{ \AA}$ bununla beraber $a=3.905 \text{ \AA}$ ile ve $c=29.196 \text{ \AA}$ ise Ti_2Al_5 fazına ait kafes parametreleridir.

Çizelge 4.25. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşıminin teorik ve deneysel kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-56Al-4Hf-2Nb	a (teo.)	3.171
	c (teo.)	6.947
TiAl_3	a (deney.)	3.853
	c deney.	8.584
Ti_2Al_5	a (deney.)	3.905
	c (deney.)	29.196

Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşıminin SEM görüntüleri Resim 4.21’de verilmiştir. Alaşımin mikro yapısı kaba iğnemsî döküm yapıdadır. Resim 4.21’de görülen koyu renkli faz atomik olarak %74.97 Al ve %25.03 Ti, beyaz iğnemsî faz ise %71.34 Al ve %28.66 Ti içermektedir. XRD ve EDS analizleri ile değerlendirildiğinde fazların TiAl_3 ve Ti_2Al_5 fazları olduğu doğrulanmıştır. TiAl_3 ve Ti_2Al_5 fazları ThermoCalc analizlerine göre beklenen fazlardır

ancak Ti_2Al_5 fazı Ti-Al fazı denge koşullarında çizilen Ti-Al faz diyagramında yer almamaktadır. Ara metaliklerde stokiometrik oranı 1/3 olan fazların birim hücre hacmi, stokiometrik oranları 2/5 veya 2/3 olan fazlarındakinden her zaman daha büyüktür [152]. Böylece, herhangi bir alüminat sisteminde kafes hacminin en düşük olduğu faz oluşumu görülmektedir. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımında yarı kararlı Ti_2Al_5 fazının oluşması ve ThermoCalc analizine göre oluşması beklenen C14 laves ve $TiAl_2$ fazlarının da oluşmaması bu durumla açıklanmaktadır. ThermoCalc'da oluşması beklenen $ZrAl_3$ fazı ise, Zr elementinin Hf elementinin içinde eser miktarda bulunup birleşik oluşturabilecek konsantrasyonda olmadığı için oluşmamıştır. Resim 4.21 a)'da görülen siyah noktalar ise döküm içi yapısında boşluklar olduğunun göstergesidir. Matrisi gösteren açık gri renkli bölge ise alaşımın dökümünden önce hedeflenen kompozisyonunda döküm yapıldığını göstermektedir.



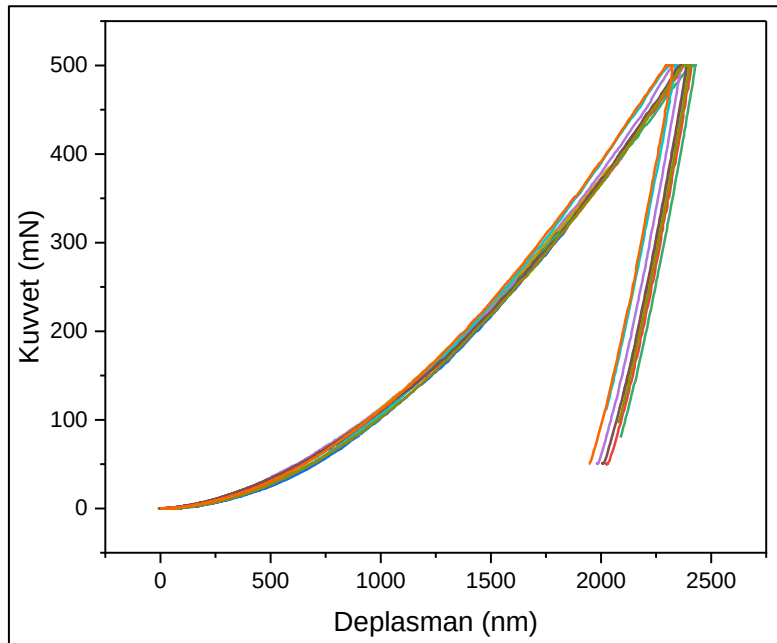
Resim 4.21. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının a) İy yapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Teorik olan hesaplanan mekanik özellikleri doğrulamak amacıyla hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 461 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.26. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
357.3 (teo.)	14.5 (teo.)	
166.2 (deney.)	5.49 (deney.)	461 (deney.)

Teorik sonuçlar ve nanoindentasyon test sonuçlarının ortalaması karşılaştırmak amacıyla Çizelge 4.26'da gösterilmiştir. Şekil 4.42'den görüleceği üzere nanoindentasyon testinde benzer sonuçlar elde edilmiştir. Teorik ve deneysel elastisite modül ve sertlik değerleri arasında büyük fark olduğu gözlenmiştir. Bu durum, VCA metoduyla yapılan çalışmada sanalda yaratılan atomun Hf atom çapından dolayı düşünüldüğü gibi Al ağırlıkça değil Hf ağırlıkça davranmasına ve Hf mekanik özelliklerine yakın hesaplanmasına yol açtığı düşünülmüştür.



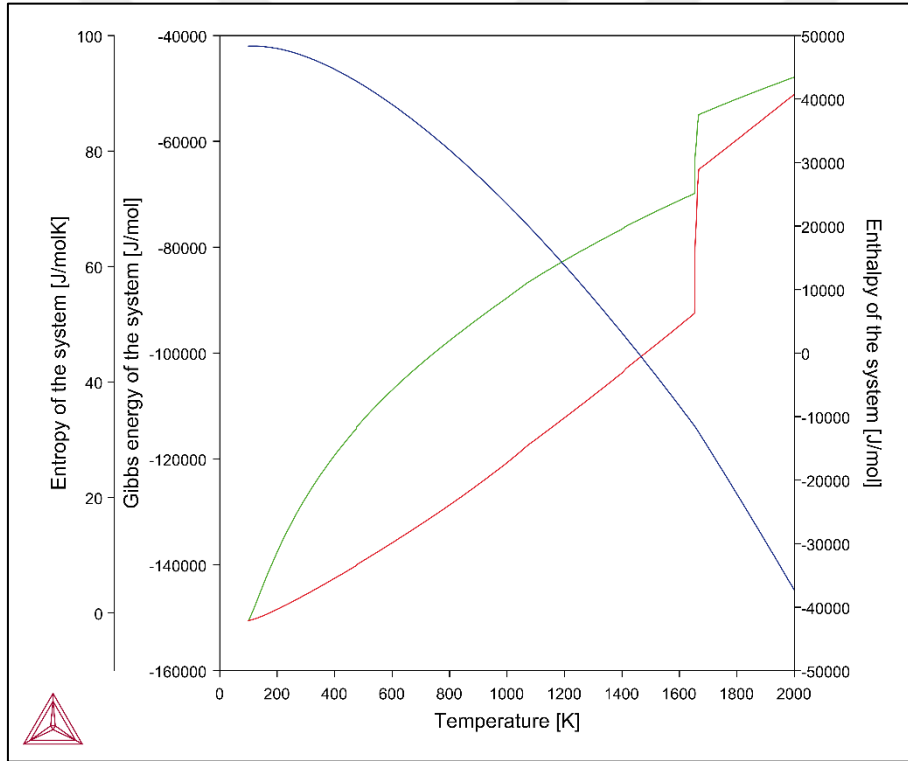
Şekil 4.42. Ti-56Al-4Hf-2Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

Bununla beraber, deneysel sonuçlar alaşımsız $TiAl_3$ fazı ile karşılaştırıldığında Nb ve Hf eklemenin elastik modülü 208,5 GPa'dan [116] 166.2 GPa'ya düşürdüğünü göstermiştir.

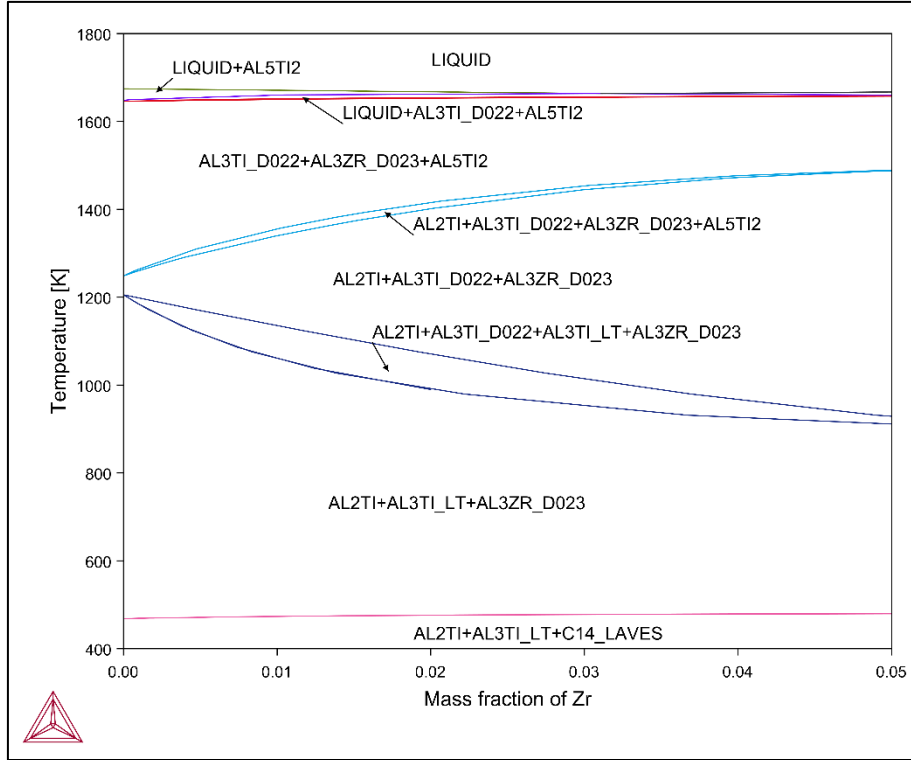
Ayrıca, sertliğin 19.5 GPa'dan [113] 5.49 GPa'ya düşürülmesi, süneklikte bir iyileşme olarak anlaşılmıştır.

4.5.3. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşıımı

Diğer alaşımlarda olduğu gibi, Ti-56Al-4Hf-2Zr alaışımının üretiminden önce Thermocalc analizleri yapılmıştır. Şekil 4.43'ten görüleceği üzere Ti-56Al-4Hf-2Zr alaışımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldığı, entropi değerlerinin ise arttığı gözlenmiştir. Bu sonuçlara göre Ti-56Al-4Zr-2Nb alaışımının termodinamik olarak kararlı olduğu anlaşılmıştır. Katılaşma sonrası fazların anlaşılması faz diyagramı çizilmiştir.



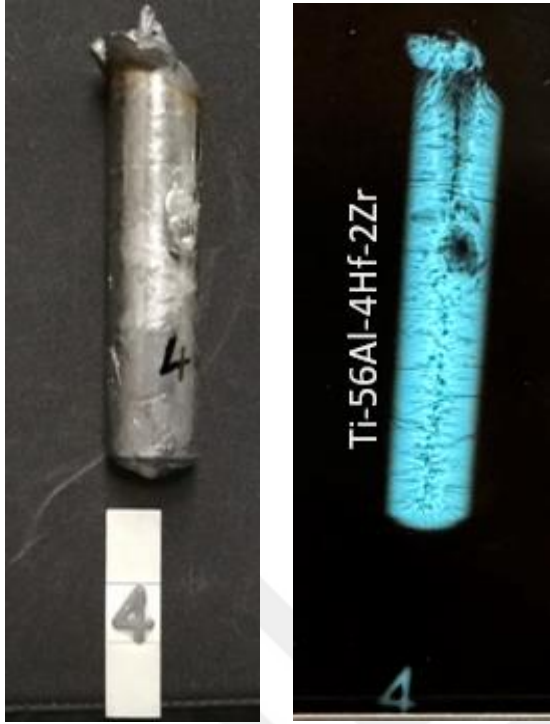
Şekil 4.43. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaışımının sıcaklık-ısı grafiği



Şekil 4.44. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımlarının faz diyagramı

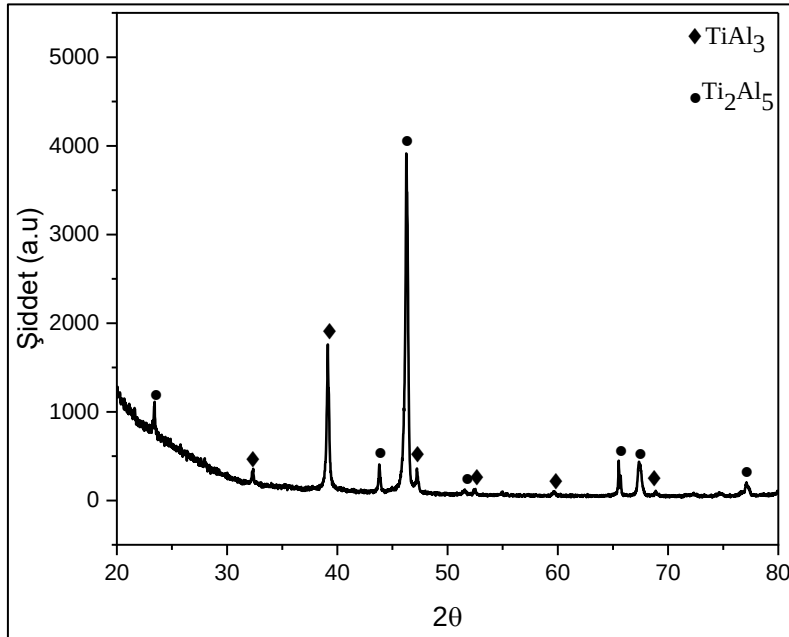
Şekil 4.44'ten görüleceği üzere sistemde katılaşma sonrası $TiAl_3$, $ZrAl_3$ ve $TiAl_2$ fazlarının oluşması beklenmektedir. Döküm esnasında gerçekleşen soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olduğu ve alaşımların katılaşması sonucu denge dışı fazlar oluşturabileceği de dikkate alınmıştır.

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımların döküm işlemine geçilmiştir. Resim 4.22'den anlaşılacağı üzere numuneye uygulanan radyografik muayenede numune yüzeyine yakın kalıp çatlakları ve döküm boşlukları gözlenmiştir.



Resim 4.22. Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının radyografik g r nt leri

D k len alařımın yoęunluęu boşluk olmayan b lgeden Arřimet metoduyla deneysel olarak  l  lm ř olup $3,524 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuřtur.



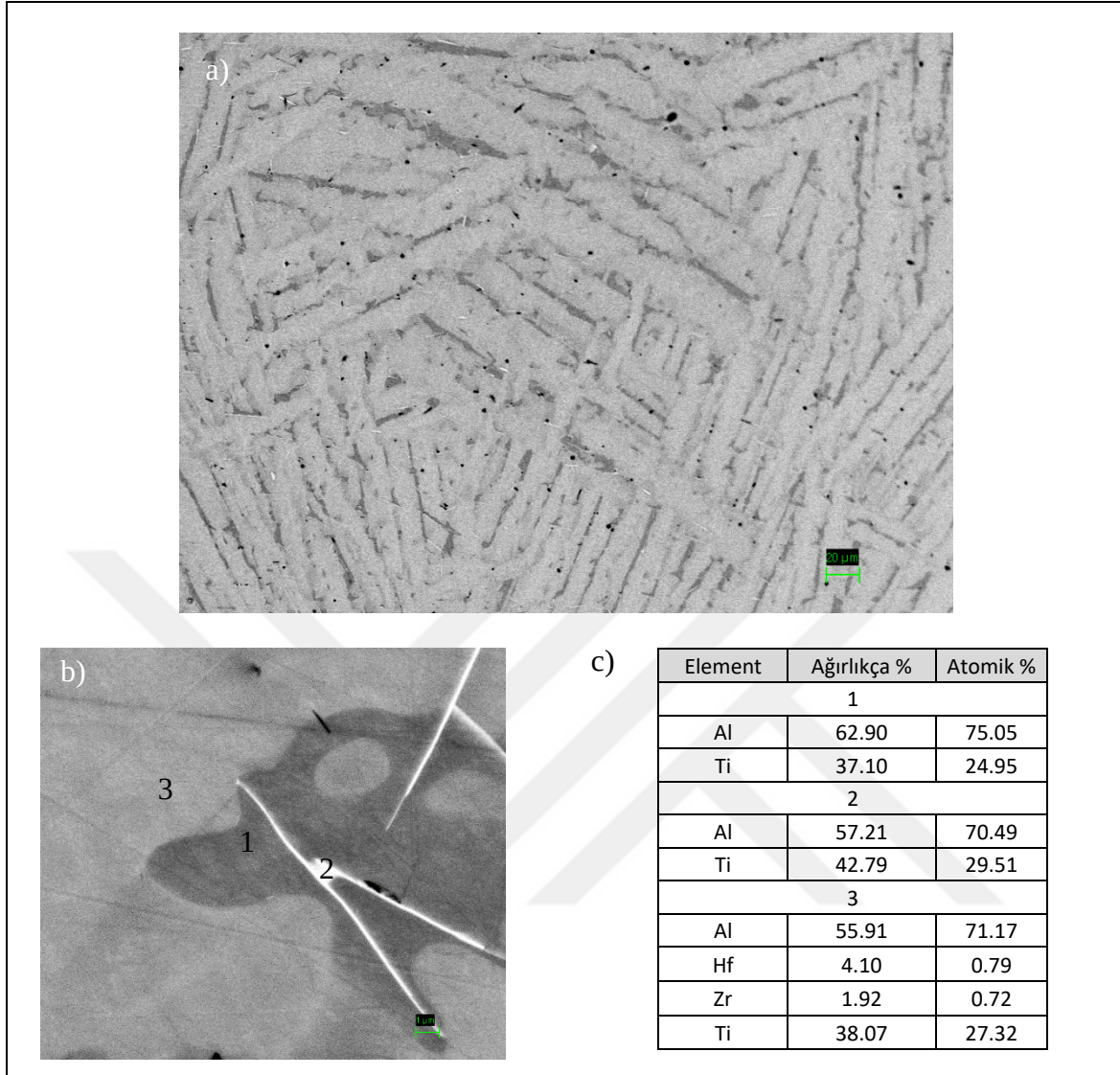
řekil 4.45. Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının XRD grafięi

Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının fazlarını anlamak amacıyla uygulanan XRD analizinde alařımda $TiAl_3$ ve Ti_5Al_{11} fazlarının oluřtuđu (řekil 4.45) gözlenmiřtir. Fazların kafes parametreleri olan a ve c , indekslenmiř XRD piklerinden hesaplanmıřtır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıřtır. Çizelge 4.27, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal $TiAl_3$ yapısının kafes parametreleri $a=3.840$ Å ve $c=8.580$ Å iken, Ti_2Al_5 fazı için kafes parametreleri $a=3.905$ ve $c=29.196$ Å'dur.

Çizelge 4.27. Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının teorik ve deneysel kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Deęer (Å)
Ti-56Al-4Hf-2Zr	a (teo.)	3.172
	c (teo.)	6.948
$TiAl_3$	c (deney.)	3.840
	c (deney.)	8.580
Ti_2Al_5	a (deney.)	3.905
	c (deney.)	29.196

Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının SEM görüntüleri Resim 4.23'te verilmiřtir. Alařımın mikro yapısı önceki dökümlere benzer olarak kaba ięnemsiz yapıdadır. Resim 4.23'te görülen koyu renkli faz atomik olarak %75.05 Al ve %24.95 Ti, beyaz renkli faz ise %69.49 Al ve %30.51 Ti içermektedir. XRD ve EDS analizleri birlikte deęerlendirildięinde fazların $TiAl_3$ ve Ti_5Al_{11} fazları olduđu doęrulanmıřtır. $TiAl_3$ fazı ThermoCalc analizlerinde de beklenen faz olmasına raęmen, analizde yer alan $TiAl_2$ fazı yerine yarı kararlı Ti_2Al_5 fazının oluřtuđu gözlenmiřtir. Daha önce de bahsedildięi üzere, Ara metaliklerde stokiyometrik oranı 1/3 olan fazların birim hücre hacmi, stokiyometrik oranları 2/5 veya 2/3 olan fazlarınkinden her zaman daha büyüktür [152]. ThermoCalc'da oluřması beklenen $ZrAl_3$ fazının ise denge dıřı soęumadan dolayı oluřmadıęı düşünölmektedir. Matrisi gösteren açık renkli bölge ise alařımın hedeflenen bileřimde dököldüęünü göstermektedir.



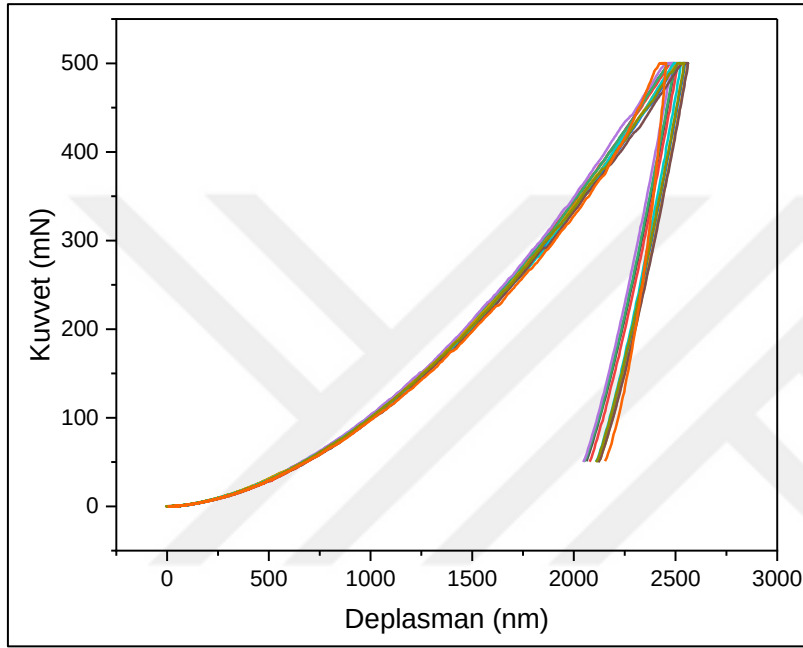
Resim 4.23. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımlarının a) İyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Metalografik olarak hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Diğer alaşımlarda olduğu gibi nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımların mikrosertlik değeri ortalama 407 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.28. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımlarının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
393.4 (teo.)	18.16 (teo.)	407
155.1 (deney.)	5.31 (deney.)	

Teorik sonuçlar ve nanoindentasyon test sonuçlarının ortalaması karşılaştırmak amacıyla Çizelge 4.28'de gösterilmiştir. Şekil 4.46'dan görüleceği üzere de nanosertlik testinde benzer sonuçlar elde edilmiştir. Sonuçlar incelendiğinde, teorik ve deneysel elastik modül ve sertlik değerlerinin uyuşmadığı gözlenmiştir. Bu durum, VCA metoduyla yapılan çalışmada sanalda yaratılan atomun Hf ağırlıkça davranmasına ve bunun sonucunda da Hf mekanik özelliklerine yakın değerlerin ortaya çıktığı düşünülmüştür.

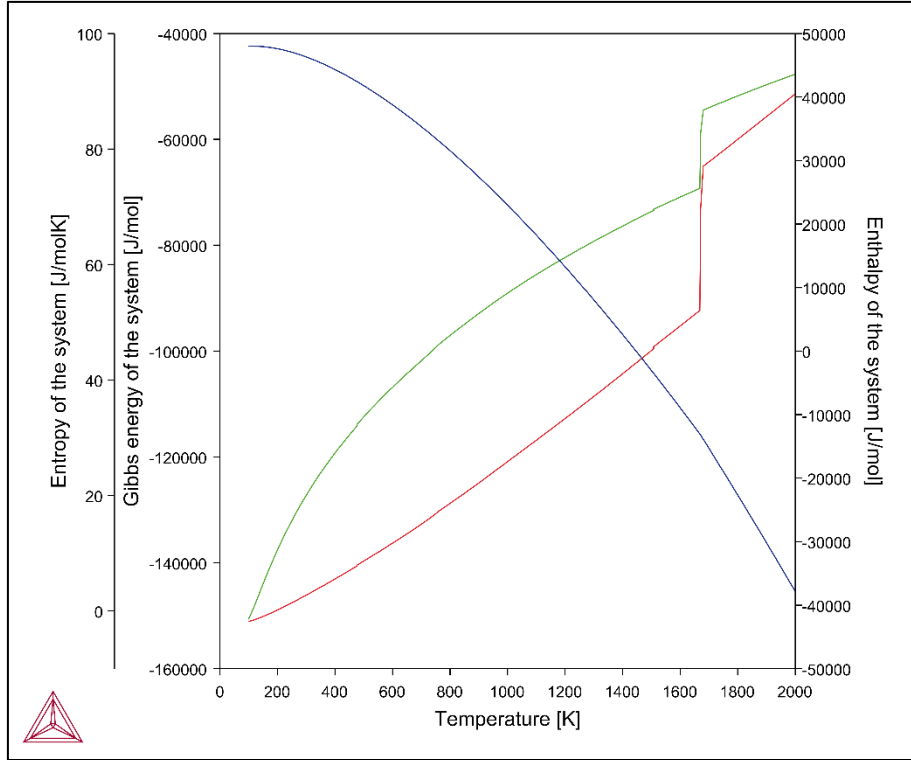


Şekil 4.46. Ti-56Al-4Hf-2Zr alaşımının nanosertlik testi grafiği

Deneysel veriler alaşımsız $TiAl_3$ fazı ile karşılaştırıldığında Hf ve Zr elementinin elastik modülü 208,5 GPa'dan [116] 155.1 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Ayrıca, sertliğin 19.5 GPa'dan [113] 5.31 GPa'ya düşürülmesi, malzemedeki kırılmanlığın alaşımsız haline göre azaldığının işaretidir.

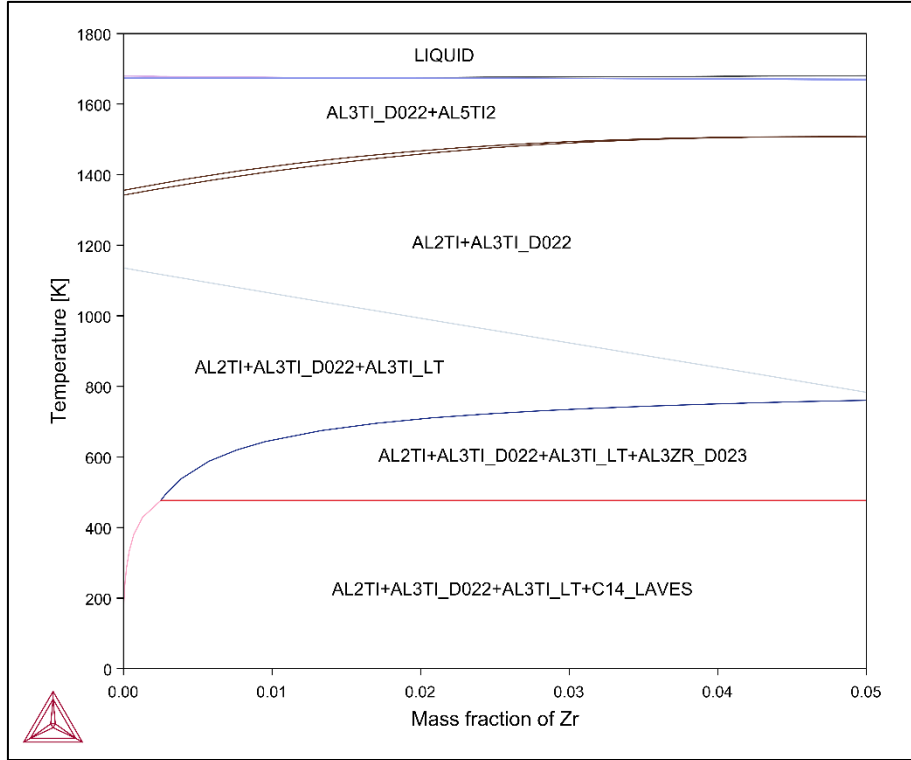
4.5.4. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımı

Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının ThermoCalc analizleri yapılmış olup, alaşımın faz diyagramı ve termodinamik kararlılığı ncelenmiştir.



Şekil 4.47. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşıminin sıcaklık-ısı grafiği

Şekil 4.47’den görüleceği üzere Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşıminin artan sıcaklıkla Gibbs enerjisinin azaldığı, entropi değerlerinin ise arttığı gözlenmiştir. Bu veriler Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşıminin termodinamik olarak kararlı olduğunu göstermiştir.



Şekil 4.48. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımlarının faz diyagramı

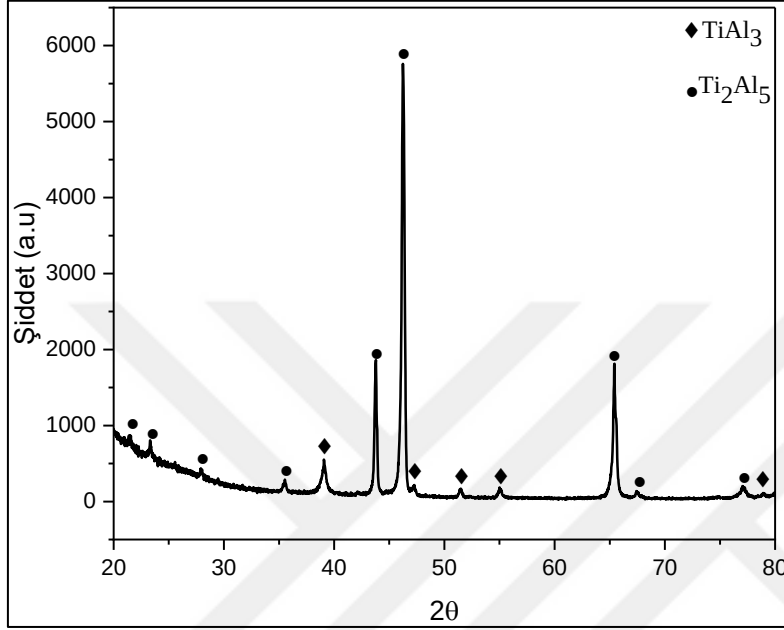
Şekil 4.48’de verilen faz diyagramına göre katılaşma sonrası alaşımda $TiAl_2$, $TiAl_3$ ve C14 Laves fazları oluşması beklenmektedir. Ayrıca, sistemin soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olduğu ve alaşımların katılaşması sonucu denge dışı fazlar oluşturabileceği de düşünülmüştür.



Resim 4.24. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımı numunesi

ThermoCalc analizlerinden sonra, vakum indüksiyon ergitme metodu ile alaşımların üretimi yapılmıştır. Resim 4.24’ten anlaşılacağı üzere alaşım bakır kalıptan kırılmış halde çıkarılmıştır, dolayısıyla alaşıma sadece görsel muayene uygulanmıştır. Yapılan görsel muayene de alaşımların geri kalan bölümünde döküm boşlukları olduğu ve kırılmanın bu boşluklardan kaynaklı olduğu düşünülmüştür. Dökülen alaşımların yoğunluğu boşluk olmayan

bölgeden Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş ve $3,760 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur. Döküm sonrası oluşan fazları incelemek, alaşıma X-Ray kırınım testi (XRD) yapılmıştır. Şekil 4.49'daki XRD grafiğine bakıldığında alaşımda Ti_2Al_5 ve TiAl_3 fazlarının oluştuğu gözlenmiştir.

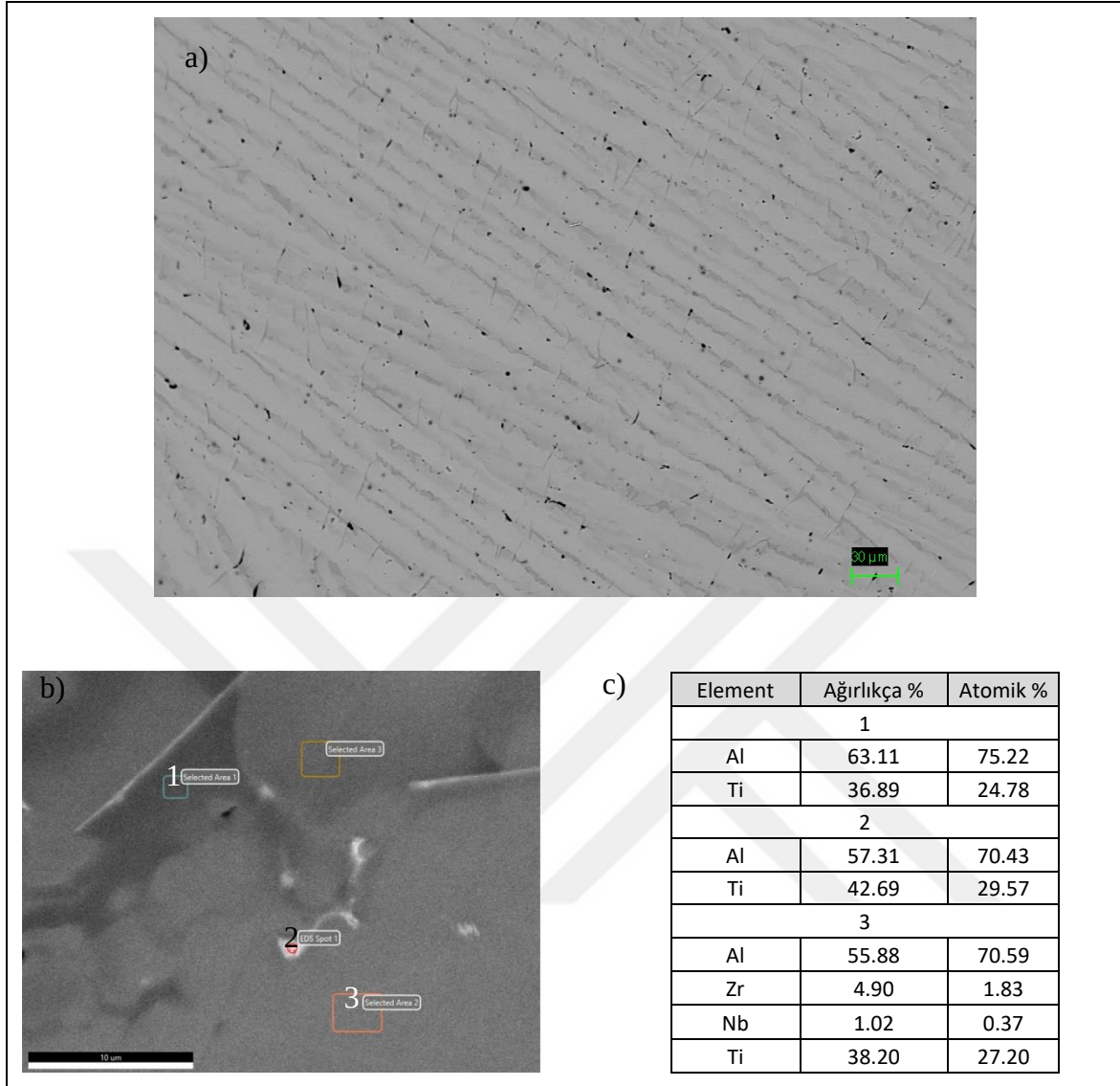


Şekil 4.49. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının XRD grafiği

Fazların a ve c kafes parametreleri indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır, Çizelge 4.29, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal TiAl_3 yapısının kafes parametreleri $a=3.853 \text{ Å}$, $c=8.584 \text{ Å}$ hesaplanırken Ti_2Al_5 fazına ait kafes parametreleri ise $a=3.905 \text{ Å}$ ve $c=29.196 \text{ Å}$ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.29. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-56Al-5Zr-1Nb	a (teo)	3.370
	c (teo)	8.336
TiAl_3	a (deney.)	3.853
	c (deney.)	8.584
Ti_2Al_5	a (deney.)	3.905
	c (deney.)	29.196



Resim 4.25. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımlarının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımlarının SEM görüntüleri Resim 4.25'te verilmiştir. Alaşımların mikro yapısı kaba iğnemsî döküm yapıdadır. Resim 4.25'te görülen koyu renkli faz atomik olarak %75.22 Al ve %24.78 Ti, beyaz renkli faz ise % 70.43 Al ve %29.57 Ti içermektedir. XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde fazların $TiAl_3$ ve Ti_2Al_5 fazları olduğu doğrulanmıştır. ThermoCalc analizlerine göre beklenen $TiAl_2$ ve C14 Laves fazları oluşmamıştır, ancak benzer kompozisyonda dökülen alaşımlara bakıldığında oluşan fazlar kompozisyonla uyumlu olarak değerlendirilmiştir. Ti_2Al_5 fazı Ti-Al fazı denge koşullarında çizilen Ti-Al faz diyagramında yer almamaktadır. Ancak daha önce de bahsedildiği üzere, ara metaliklerde stokiometrik oranı 1/3 olan fazların birim hücre hacmi, stokiometrik oranları 2/5 veya 2/3 olan fazlarınkinden daha büyüktür [152]. Böylece, herhangi bir

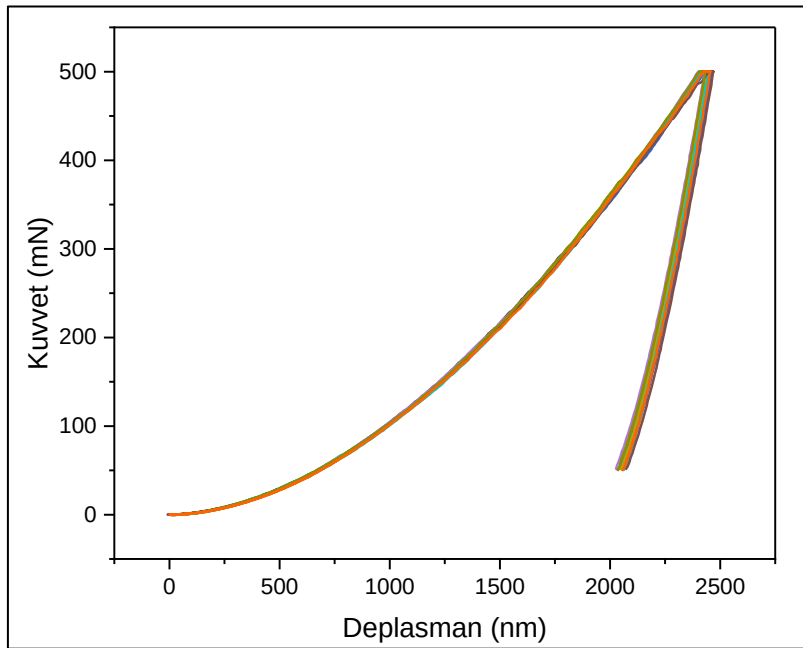
alüminat sisteminde kafes hacminin en düşük olduğu faz oluşumu görülmektedir. $TiAl_3$ fazı ise bu kompozisyonda beklenen bir fazdır. Resim 4.25'te görülen siyah noktalar ise döküm yapısında boşluklar olduğunu göstermektedir. Matrisi gösteren açık gri renkli bölge ise alaşımın istenen kompozisyonda döküldüğünü göstermektedir.

Alaşımın teorik olarak hesaplanan mekanik özelliklerini doğrulamak amacıyla mikrosertlik ve nanoindentasyon testleri uygulanmıştır. Önceki testlerde olduğu gibi, nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 436 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.30. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
138.7 (teo.)	6.0 (teo.)	436 (deney.)
161.4 (deney.)	5.27 (deney.)	

Teorik sonuçlar ve nanoindentasyon test sonuçlarının ortalaması karşılaştırmak amacıyla Çizelge 4.30'da gösterildiği üzere, teorik ve deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, elastik modül ve sertlik değerlerinin iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmiştir. Nanoindentasyon testinde ise Şekil 4.50'den görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiştir.

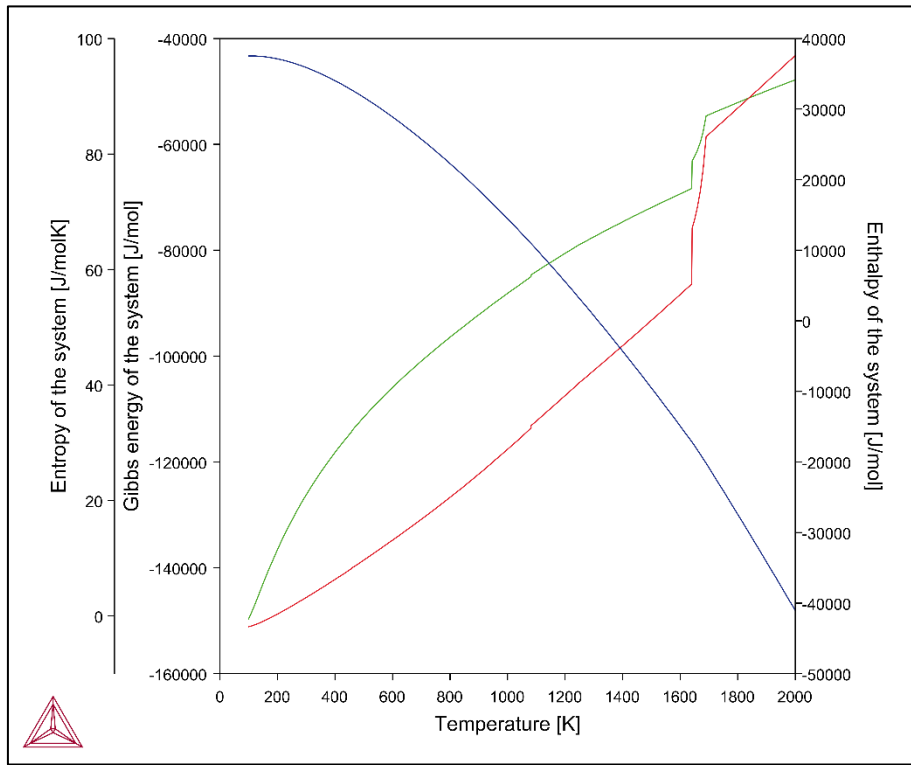


Şekil 4.50. Ti-56Al-5Zr-1Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

Sonuçlar alaşımsız TiAl_3 fazı ile karşılaştırıldığında Nb ve Zr eklemenin elastik modülü 208,5 GPa'dan [116] 161,4 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 19,5 GPa'dan [113] 5,27 GPa'ya düşmesi de alaşımın kırılma enerjisinin önemli bir miktarda azaldığını göstermektedir.

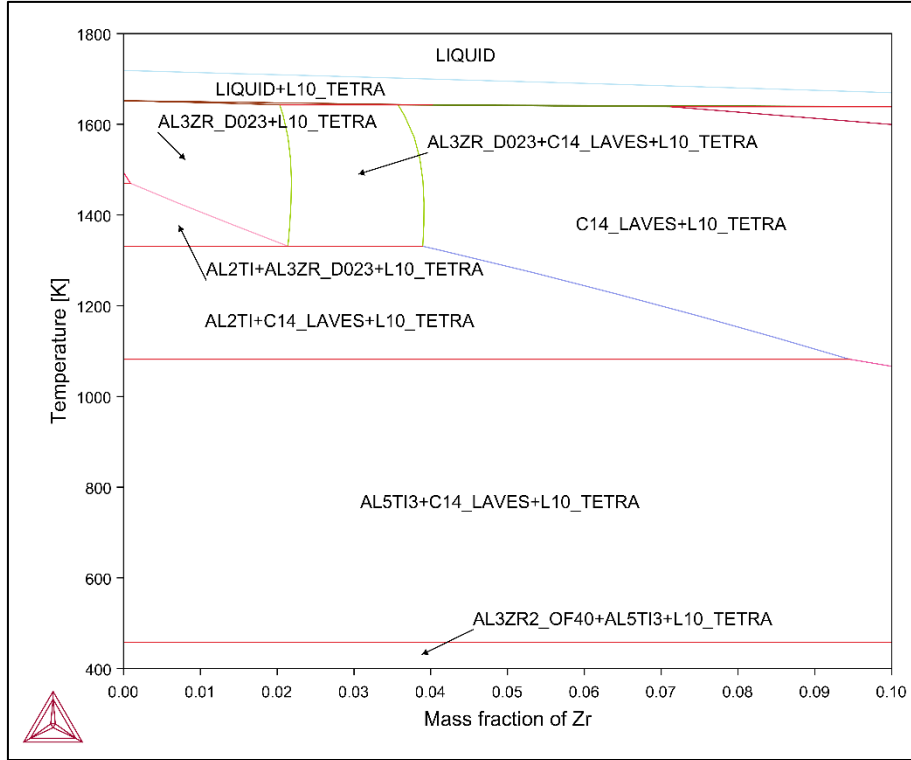
4.5.5. Ti-45Al-6Zr alaşımı

Ti-45Al-6Zr alaşımının üretiminden önce alaşımın termodinamik kararlılığını anlamak ve döküm sonrası oluşabilecek fazları anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıştır.



Şekil 4.51. Ti-45Al-6Zr alaşımının sıcaklık-ısı grafiği

Şekil 4.51'den görüleceği üzere Ti-45Al-6Zr alaşımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldığı, entropi değerlerinin ise arttığı gözlenmiştir. Bu sonuçlara göre Ti-45Al-6Zr alaşımının termodinamik olarak kararlı olduğu görülmüştür. Bununla beraber, alaşımın soğuma sonrası oluşabilecek fazlarını anlamak amacıyla faz diyagramı çizilmiştir.



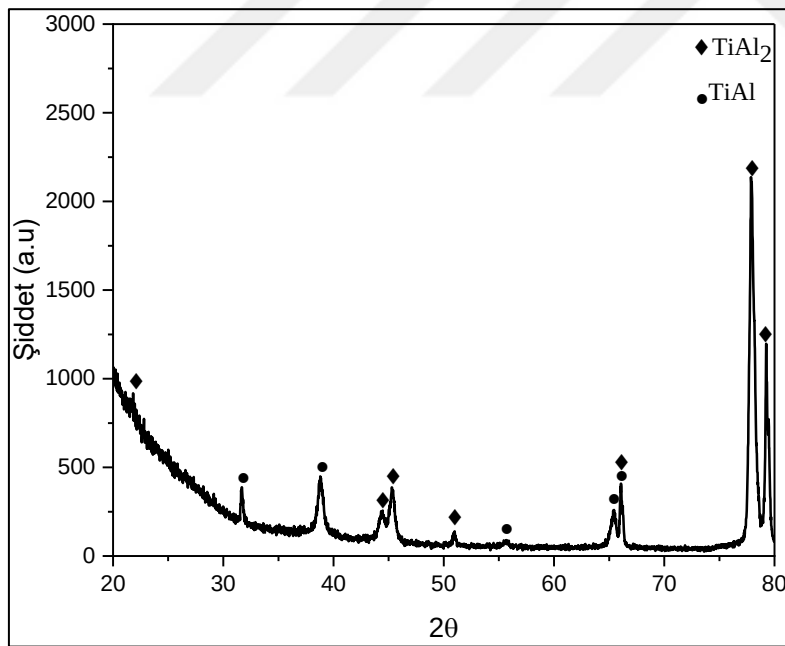
Şekil 4.52. Ti-45Al-6Zr alaşımlarının faz diyagramı

Şekil 4.52’den görüleceği üzere alaşım ağırlıkça % 6 Zr içerdiğinde Zr_2Al_3 , Ti_3Al_5 ve L10 tetragonal Ti-Al fazlarının oluşabileceği beklenmiştir. Ancak, vakum indüksiyon metodunda uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olabileceği ve alaşımda katılaşma sonucu denge dışı fazlar oluşabileceği düşünülmüştür.

ThermoCalc analizlerinden sonra, döküm işlemi yapılmıştır. Resim 4.26’dan anlaşılacağı üzere numuneye uygulanan radyografik muayenede çatlaklar ve döküm boşlukları gözlenmiştir. Ayrıca, filmin alt tarafında beyaz renkli görünen nokta erimemiş malzeme olduğunu göstermektedir. Radyografi filminde erimemiş malzemeyi bulmak mümkün olmadığından dolayı erimemiş malzemenin ne olabileceği içyapı analizlerinde değerlendirilmiştir. Dökülen alaşımın yoğunluğu boşluk olmayan bölgeden Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,561 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur.



Resim 4.26. Ti-45Al-6Zr alařımının radyografik görüntüleri



Şekil 4.53. Ti-45Al-6Zr alařımının XRD grafiğı

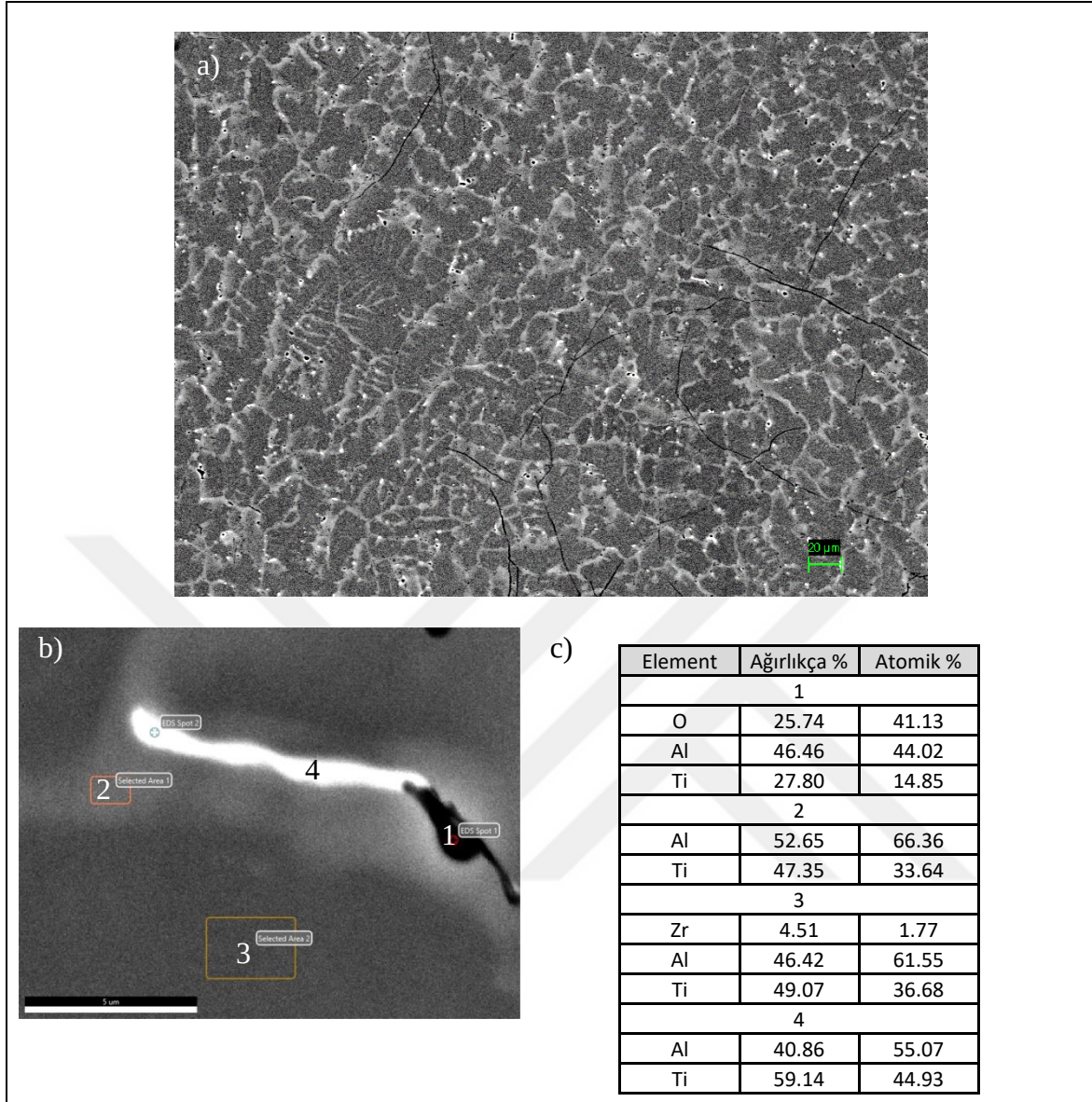
Ti-45Al-6Zr alařımının fazlarını anlamak amacıyla uygulanan XRD analizinde (Şekil 4.53) alařımda TiAl ve TiAl₂ fazları gözlenmiştir. Fazların kafes parametreleri olan a , b ve c , indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır. Çizelge 4.31, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal

yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. TiAl fazının kafes parametreleri $a=3.976 \text{ \AA}$ ve $c=4.049 \text{ \AA}$ olarak hesaplanırken TiAl₂ fazının kafes parametreleri $a=12.094 \text{ \AA}$, $b=3.959 \text{ \AA}$ ve $c=4.032 \text{ \AA}$ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.31. Ti-45Al-6Zr alaşımasının kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-45Al-6Zr	a (teo.)	12.424
	b (teo.)	3.814
	c (teo.)	3.838
TiAl	a (deney.)	3.976
	c (deney.)	4.049
TiAl ₂	a (deney.)	12.094
	b (deney.)	3.959
	c (deney.)	4.032

Ti-45Al-6Zr alaşımasının SEM görüntüleri Resim 4.27 'de verilmiştir. Alaşımanın içyapısı dentritik yapıdadır. Resim 4.27'de görülen siyah renkli uzamış faz atomik olarak %41.13 O, %44.02 Al ve %14.85 Ti , açık gri renkli faz %66.36 Al ve %33.64 Ti, koyu gri renkli faz %61.55 Al, %36.68 Ti ve %1.77 Zr fazı, beyaz renkli faz ise %58.07 Al, %44.93 Ti içermektedir. ThermoCalc, XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde koyu gri fazın az miktarda Zr içeren Ti₃Al₅, açık gri renkli fazın TiAl₂ ve beyaz renkte görülen fazın ise TiAl olduğu doğrulanmıştır. Siyah renkli uzamış fazın ise oksit olduğu görülmüştür. Bu konsantrasyonda faz diyagramına göre TiAl ve TiAl₂ fazlarının oluşması beklenirken, Ti₃Al₅ fazının denge koşullarında oluşması beklenmemektedir. Ancak, yarı kararlı Ti₃Al₅ fazının kristalografik olarak γ -TiAl ile yakın olması ve oluşması için sadece kısa mesafeli difüzyon gerekli olduğundan dolayı bu alüminyumca zengin bu kompozisyonlarda bulunabileceği çalışmalarda raporlanmıştır [150]. ThermoCalc'da oluşması beklenen ZrAl₃ fazının ise soğutma hızının denge dışında olması sebebiyle oluşmadığı düşünülmüştür. Matrisi gösteren gri renkli bölgeler ise alaşımanın dökümünden önce hedeflenen kompozisyonun %1.5 Zr eksiği kadar olduğu görülmüştür. Bu verilere bakılarak radyografi filminde görünen beyaz renkli erimemiş elementin Zr olduğu yorumu yapılmıştır. Ayrıca, radyografik muayenede görülen çatlaklara ve boşluklara mikroyapıda da rastlanılmıştır.



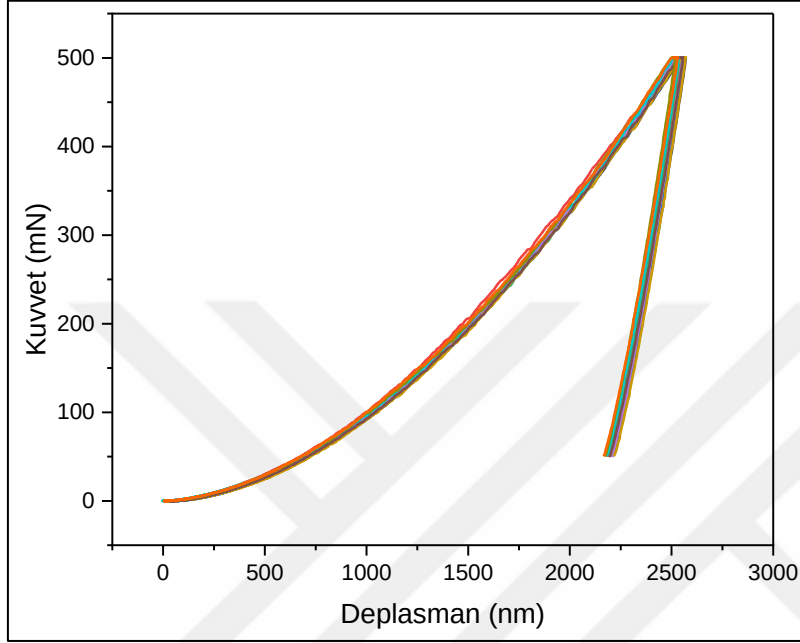
Resim 4.27. Ti-45Al-6Zr alaşımlarının a) İyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Metalografik olarak hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 373 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.32. Ti-45Al-6Zr alaşımlarının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
165.5 (teo.)	9.4 (teo.)	373 (deney.)
155.7 (deney.)	4.92 (deney.)	

Çizelge 4.32'de gösterildiği üzere, teorik ve deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, elastik modül değerlerinin iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmiştir. Nanoindentasyon testinde Şekil 4.54'ten görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiştir. Sertlik değerlerine bakıldığında ise teorik sertlik değerinin deneysel verilerine göre yüksek çıktığı görülmüştür.

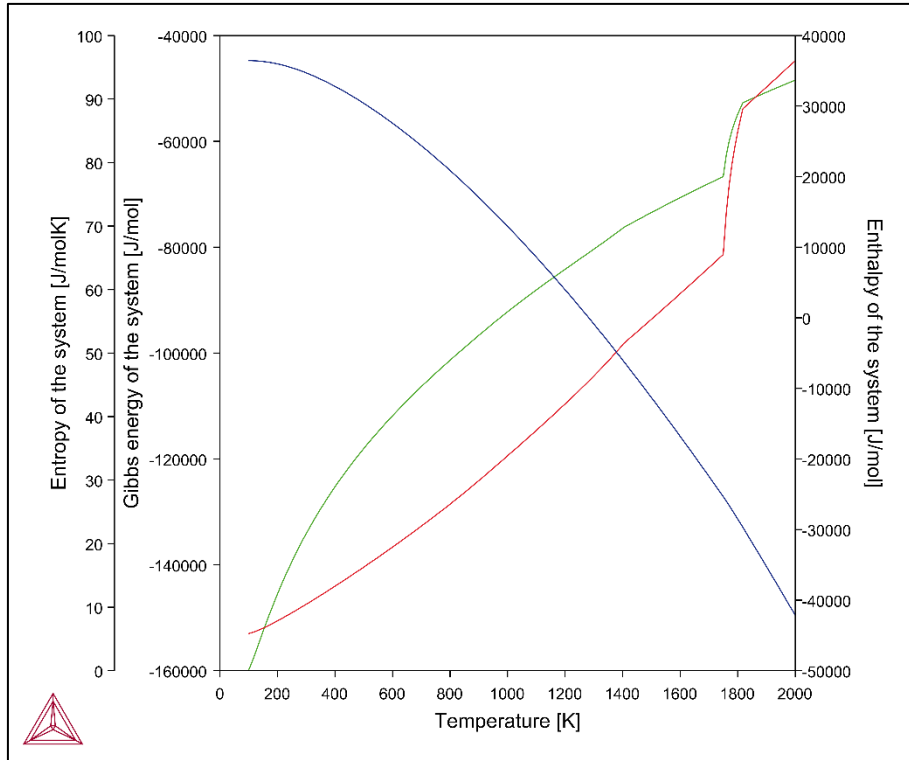


Şekil 4.54. Ti-45Al-6Zr alaşımının nanosertlik testi grafiği

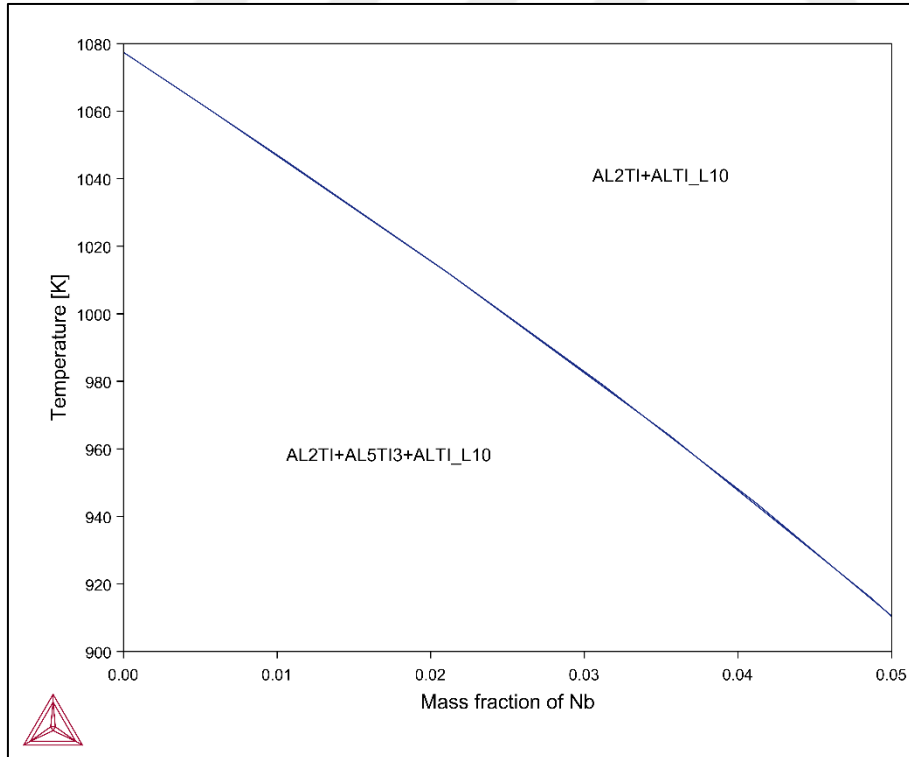
Sonuçlar alaşımsız TiAl_2 fazı ile karşılaştırıldığında Zr eklemenin elastik modülü 191.7 GPa'dan [113] 155.7 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 14.6 GPa'dan [116] 4.92 GPa'ya düşmesi de alaşımın sünekliğinde iyileşme olduğunu göstermektedir.

4.5.6. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımı

Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının dökümünden önce alaşımın termodinamik kararlılığını anlamak ve döküm sonrası oluşabilecek fazları anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıştır.



Şekil 4.55. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımlarının sıcaklık-ısı grafiği



Şekil 4.56. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımlarının faz diyagramı

Şekil 4.55'ten görüleceği üzere Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldığı, entropi değerlerinin ise arttığı gözlenmiştir. Bu sonuçlara göre Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının termodinamik olarak kararlı olduğu görülmüştür. Bununla beraber, alaşımın soğuma sonrası oluşabilecek fazlarını anlamak amacıyla faz diyagramı çizilmiştir

Şekil 4.56'dan görüleceği üzere alaşım ağırlıkça %1 Nb içerdiğinde $TiAl_2$, Ti_3Al_5 ve L10 tetragonal TiAl fazlarının oluşabileceği beklenmiştir. Bununla beraber, uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olabileceği ve alaşımda katılaşma sonucu denge dışı fazlar da oluşabileceği düşünülmüştür.

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımın üretilme safhasına geçilmiştir. Resim 4.28'den anlaşılabacağı üzere numuneye uygulanan radyografik döküm boşlukları gözlenmiştir.

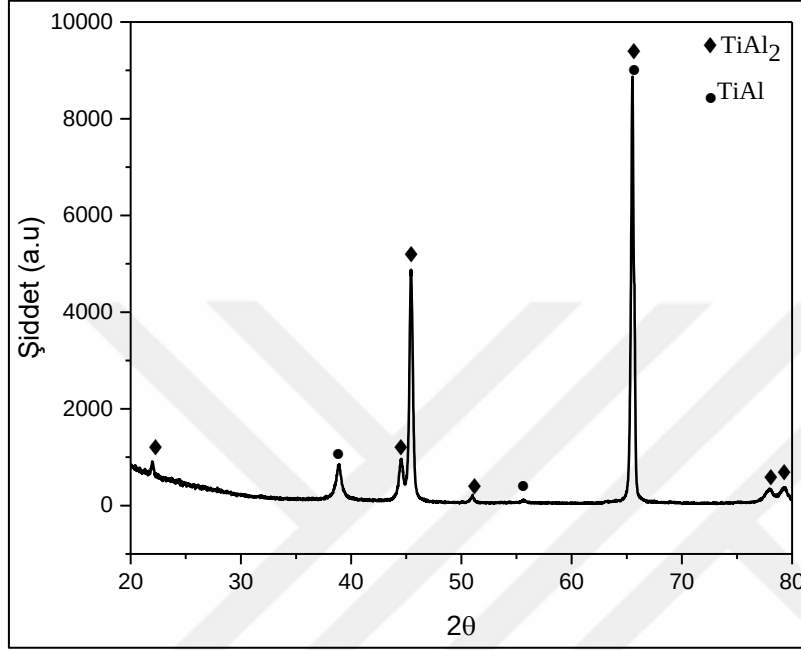


Resim 4.28. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının radyografik görüntüleri

Dökülen alaşımın yoğunluğu boşluk olmayan bölgeden Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,674 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur.

Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının Şekil 4.57'de verilen XRD grafiğinde alaşımda TiAl ve $TiAl_2$ fazları gözlenmiştir. Fazların kafes parametreleri indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır. Çizelge 4.33,

hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. TiAl fazının kafes parametreleri $a=3.976 \text{ \AA}$ ve $c=4.049 \text{ \AA}$ olarak hesaplanırken TiAl₂ fazının kafes parametreleri $a=12.094 \text{ \AA}$, $b=3.959 \text{ \AA}$ ve $c=4.032 \text{ \AA}$ olarak hesaplanmıştır.



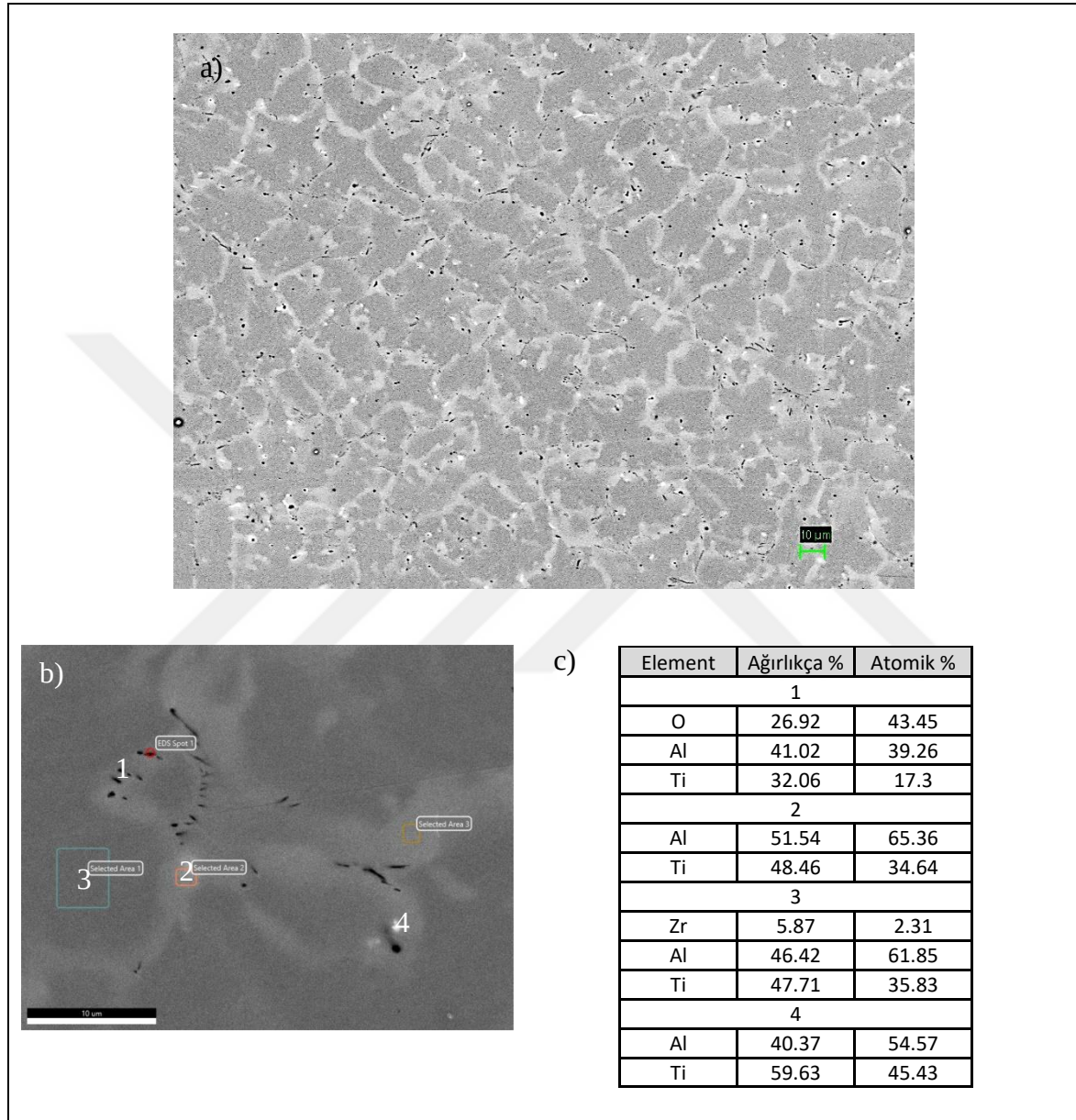
Şekil 4.57. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının XRD grafiği

Çizelge 4.33. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-44Al-6Zr-1Nb	a (teo.)	12.424
	b (teo.)	3.814
	c (teo.)	3.838
TiAl	a (deney.)	3.976
	c (deney.)	4.049
TiAl ₂	a (deney.)	12.094
	b (deney.)	3.959
	c (deney.)	4.032

Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımasının SEM görüntüleri Resim 4.29’da verilmiştir. Alaşımanın mikro yapısı dentritik yapıdadır. Resim 4.29’da görülen koyu renkli uzamış faz atomik olarak %43.45 O, %39.26 Al ve %17.3 Ti, açık gri renkli faz %65.36 Al ve %34.64 Ti, koyu gri renkli faz %61.85 Al, %35.83 Ti ve %2.31 Zr, beyaz renkli faz ise %54.57 Al, %45.43 Ti içermektedir. ThermoCalc, XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde koyu renkli

fazın az miktarda Zr içeren Ti_3Al_5 , açık gri renkli fazın $TiAl_2$ ve parlak renkte görülen fazın ise $TiAl$ olduğu doğrulanmıştır. Siyah renkli uzamış fazın ise oksit olduğu anlaşılmıştır. Ayrıca, içyapıda bulunan küresel yapılar ise alaşımda boşluklar olduğunu göstermektedir.



Resim 4.29. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaışımının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

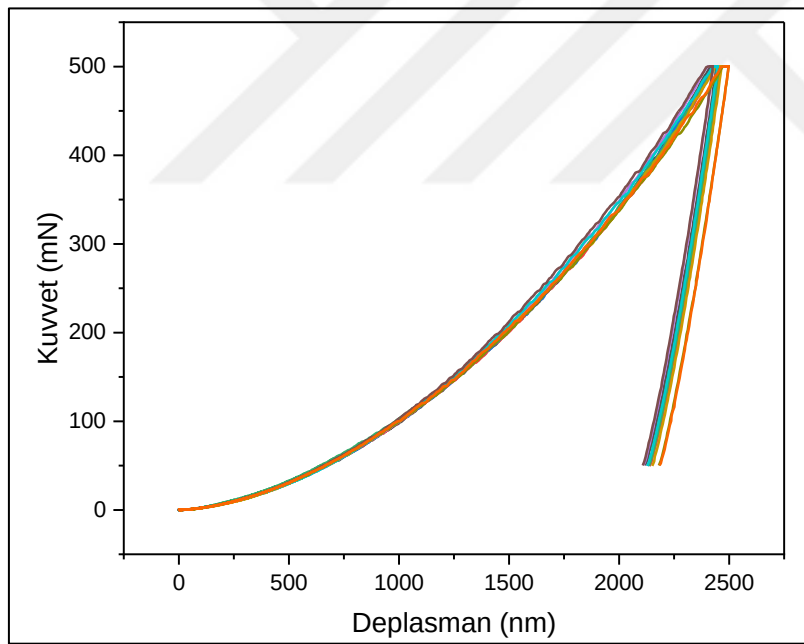
Bu konsantrasyonda faz diyagramına göre $TiAl$ ve $TiAl_2$ fazlarının oluşması beklenirken, Ti_3Al_5 fazının denge koşullarında oluşması beklenmemektedir. Ancak, yarı kararlı Ti_3Al_5 fazının kristalografik olarak γ - $TiAl$ ile yakın olması ve oluşması için sadece kısa mesafeli difüzyon gerekli olduğundan dolayı bu alüminyumca zengin bu kompozisyonlarda bulunabileceği önceki çalışmalarda belirtilmiştir [150].

Metalografik olarak hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 373 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.34. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
164.8 (teo.)	9.4 (teo.)	370 (deney.)
164.9 (deney.)	5.51 (deney.)	

Çizelge 4.34'te gösterildiği üzere, teorik ve deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, elastik modül değerlerinin iyi bir uyum içinde olduğu gözlenmiştir. Nanoindentasyon testinde Şekil 4.58'den görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiştir. Sertlik değerlerine bakıldığında ise teorik sertlik değerinin deneysel verilerine göre yüksek çıktığı görülmüştür.

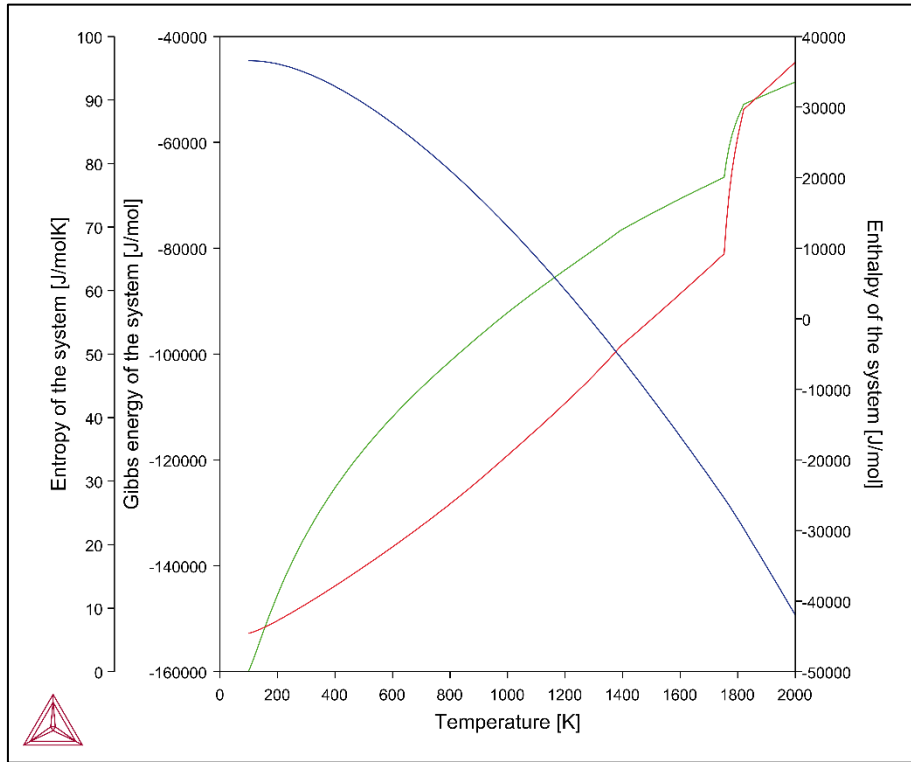


Şekil 4.58. Ti-44Al-6Zr-1Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

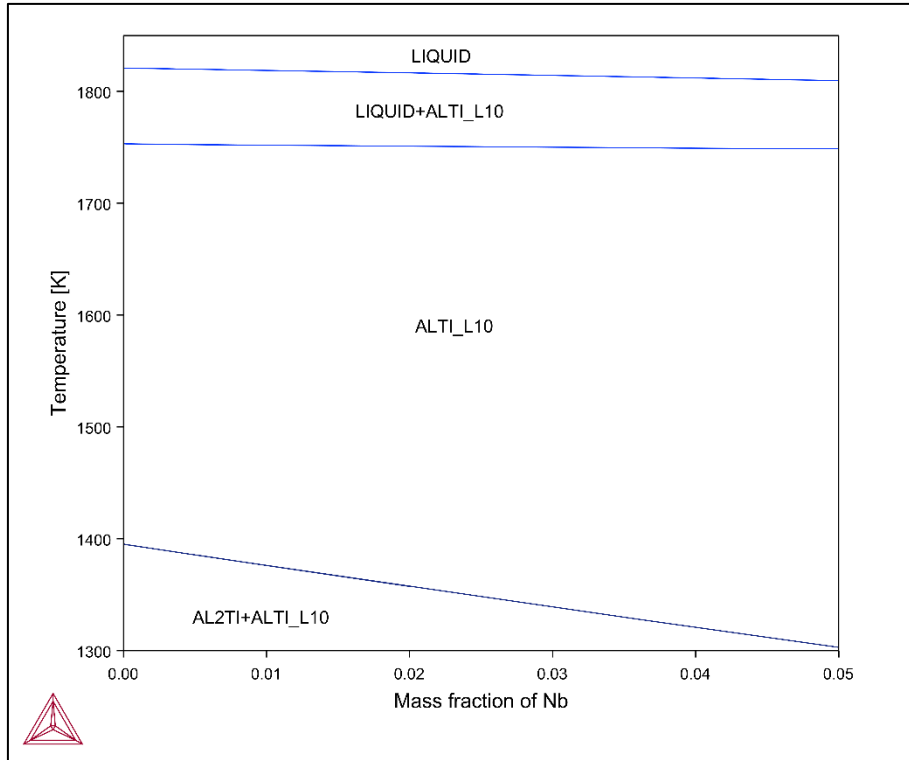
Sonuçlar alaşımsız $TiAl_2$ fazı ile karşılaştırıldığında Zr ve Nb eklemenin elastik modülü 191.7 GPa'dan [113] 164.9 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 14.6 GPa'dan [116] 5.51 GPa'ya düşmesi de alaşımın sünekliğinde iyileşme olduğunu göstermektedir.

4.5.7. Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımı

Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının üretiminden önce alařımın termodinamik kararlılıđını g rmek ve d k m sonrası oluřabilecek fazları anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıřtır. řekil 4.59'dan g r leceđi  zere Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldıđı, entropi deđerlerinin ise arttıđı g zlenmiřtir. Bu veriler ıřıđında Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının termodinamik olarak kararlı olduđu yorumu yapılmıřtır. Bununla beraber, alařımın sođuma sonrası oluřabilecek fazlarını anlamak amacıyla faz diyagramı  izilmiřtir



řekil 4.59. Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının sıcaklık-ısı grafiđi



Şekil 4.60. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının faz diyagramı

Şekil 4.60'tan görüleceği üzere alaşım ağırlıkça %2 Nb içeriğinde $TiAl_2$ ve L10 tetragonal TiAl fazlarının oluşabileceği beklenmiştir. Bununla beraber, uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olabileceği ve alaşımda katılaşma sonucu denge dışı fazlar da oluşabileceği düşünülmüştür.

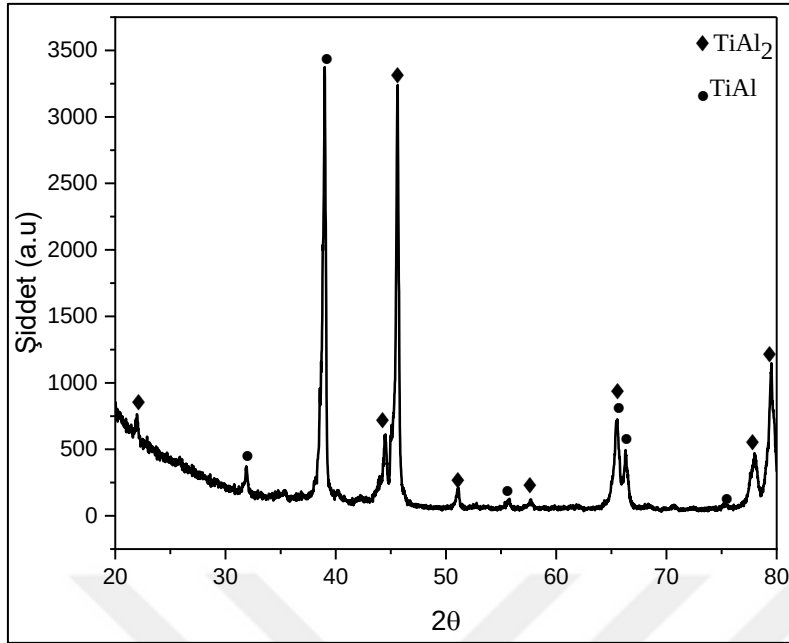
ThermoCalc analizlerinden sonra, ham malzemeler ergitilip bakır kalıba döküm yapılmıştır. Resim 4.30'dan görüleceği üzere uygulanan radyografik muayenede numunede döküm boşlukları gözlenmiştir.



Resim 4.30. Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının radyografik g r nt leri

D k len alařımın yoęunluęu bořluk olmayan b lgeden Arřimet metoduyla deneysel olarak  l  lm ř olup 3.297 g/cm^3 olarak bulunmuřtur.

Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının XRD grafięinde (řekil 4.61) katılařma sonucu TiAl ve TiAl₂ fazlarının olduęu g zlenmiřtir. Fazların kafes parametreleri indekslenmiř XRD piklerinden hesaplanmıřtır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) g re yapılmıřtır.  izelge 4.35 hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini g stermektedir. Tetragonal TiAl yapısının kafes parametreleri $a=3.989 \text{  }$ $c=4.081 \text{  }$ olarak hesaplanırken ortorombik TiAl₂ fazının kafes parametreleri ise $a = 12.094 \text{  }$, $b = 3.959 \text{  }$ ve $c = 4.032 \text{  }$ olarak hesaplanmıřtır.



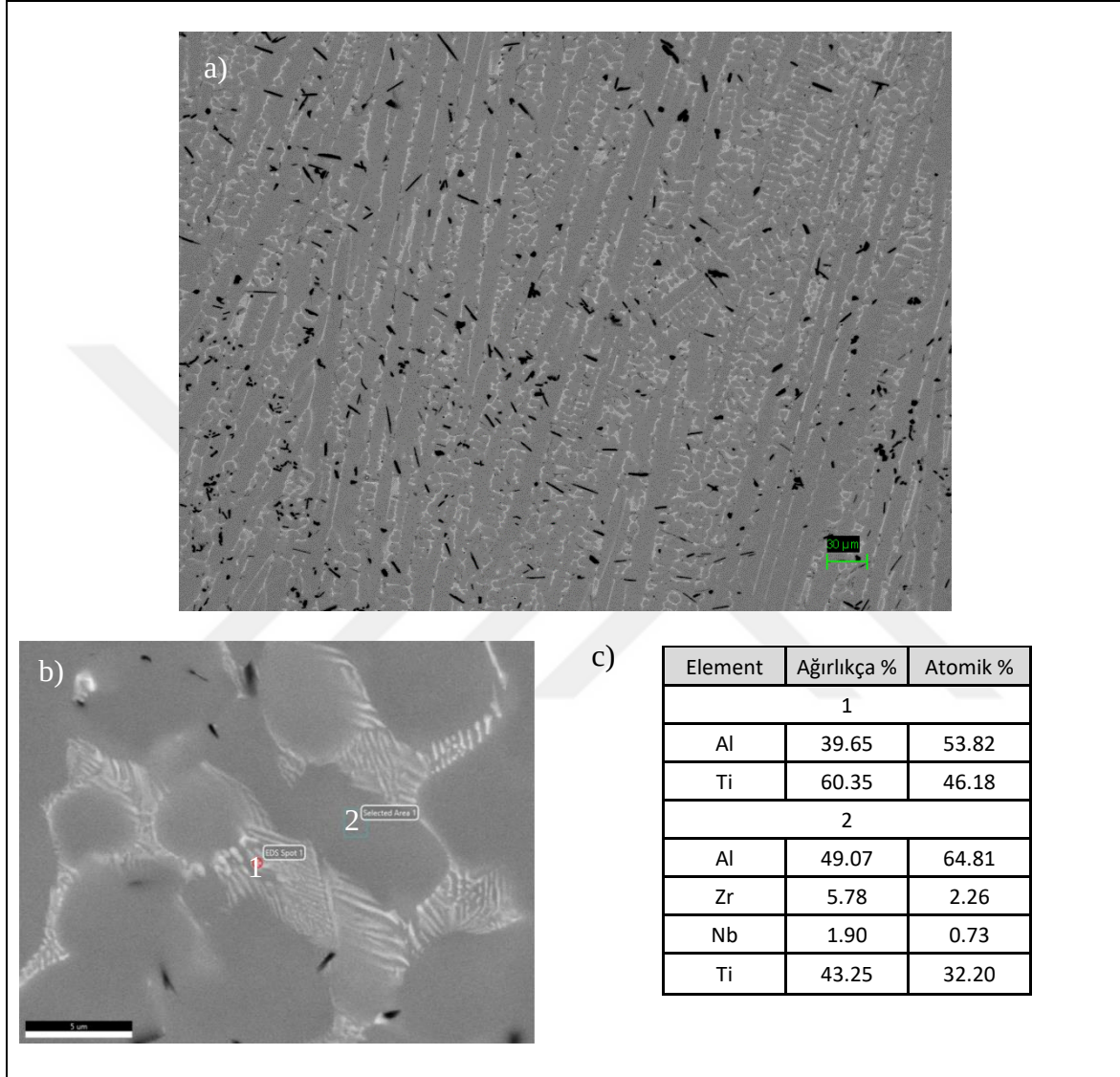
Şekil 4.61. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının XRD grafiği

Çizelge 4.35. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
Ti-43Al-6Zr-2Nb	a (teo.)	13.267
	b (teo.)	3.723
	c (teo.)	3.693
TiAl	a (deney.)	3.976
	c (deney.)	4.049
	a (deney.)	12.094
TiAl ₂	b (deney.)	3.959
	c (deney.)	4.032

Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının SEM görüntüleri Resim 4.31’de verilmiştir. Alaşımların içyapısı dentritik yapıdadır. İçyapıya detaylı bakıldığında ise ötektik yapının olduğu görülmektedir. Beyaz renkli faz atomik olarak %54.83 Al ve %45.17 Ti, matris ise %64.81 Al, %32.20 Ti, %2.26 Zr, %0.73 Nb, beyaz renkli faz ise %53.82 Al, %46.18 Ti içermektedir. ThermoCalc, XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde matrisin Zr ve Nb içeren TiAl₂, beyaz renkli fazın ise TiAl olduğu doğrulanmıştır. Siyah renkli fazın ise oksit olduğu anlaşılmıştır. Ayrıca, içyapıda bulunan küresel yapılar ise alaşımda boşluklar olduğunu göstermektedir. İç yapıda görünen fazlar ve morfolojisi Zhang ve diğerleri tarafından [153] yapılan çalışmalarla uyumludur. Yaptıkları çalışmada bu çalışmadaki bileşime yakın ikili Ti-Al bileşimlerinde TiAl₂ ve TiAl fazlarından oluşan katmanlı yapılar elde etmişlerdir. Bu konsantrasyonda faz

diyagramına göre TiAl ve TiAl₂ fazlarının oluşması soğumanın dengeye yakın koşullarda olduğunu göstermiştir. Ayrıca yarı kararlı olan Ti₃Al₅ fazı bu alaşımda oluşmamış olup, ilgili katmanlı yapının Ti₃Al₅ oluşumunu engellediği düşünülmüştür.



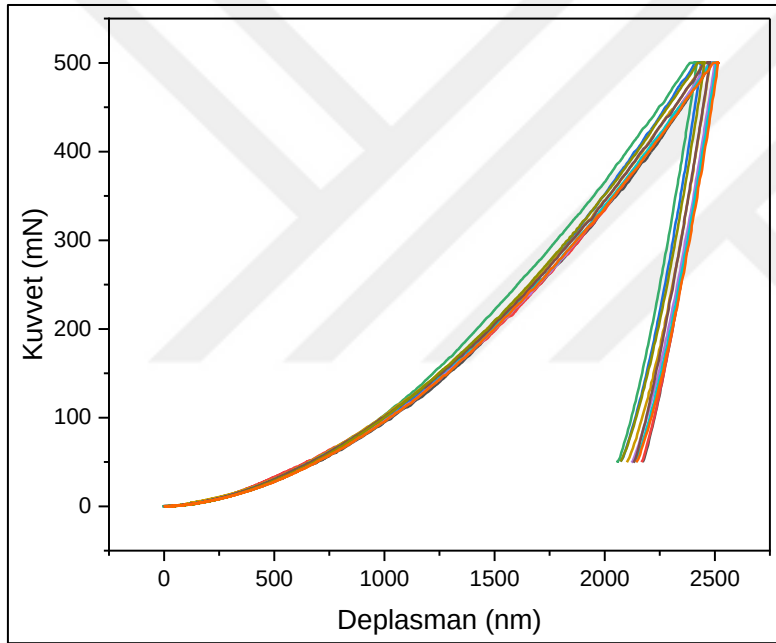
Resim 4.31. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaışımının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Metalografik olarak hazırlanan numune mikrosertlik ve nanoindentasyon testlerine tabi tutulmuştur. Nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaışımın mikrosertlik değeri ortalama 392 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.36. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının teorik ve deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
159.7 (teo.)	9.3 (teo.)	392 (deney.)
161.4 (deney.)	5.27 (deney.)	

Çizelge 4.36’da gösterildiği üzere, teorik ve deneysel sonuçlar karşılaştırıldığında, elastik modül değerlerinin iyi bir uyum içinde olduğu ancak sertlik değerlerine bakıldığında teorik sertlik değerinin deneysel verilere göre yüksek çıktığı görülmüştür. Nanoindentasyon testinde Şekil 4.62’den görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiştir.

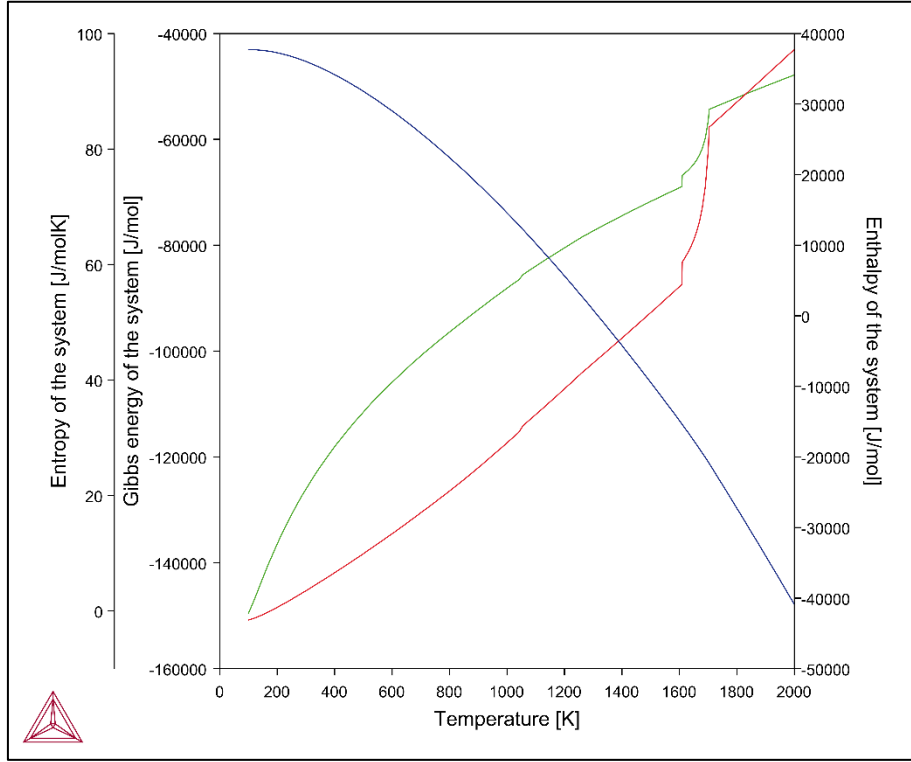


Şekil 4.62. Ti-43Al-6Zr-2Nb alaşımlarının nanosertlik testi grafiği

Sonuçlar alaşımsız $TiAl_2$ fazı ile karşılaştırıldığında Zr ve Nb eklemenin elastik modülü 191.7 GPa’dan [113] 161.4 GPa’ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 14.6 GPa’dan [116] 5.27 GPa’ya düşmesi de alaşımların sünekliğinde iyileşme olduğunu göstermektedir.

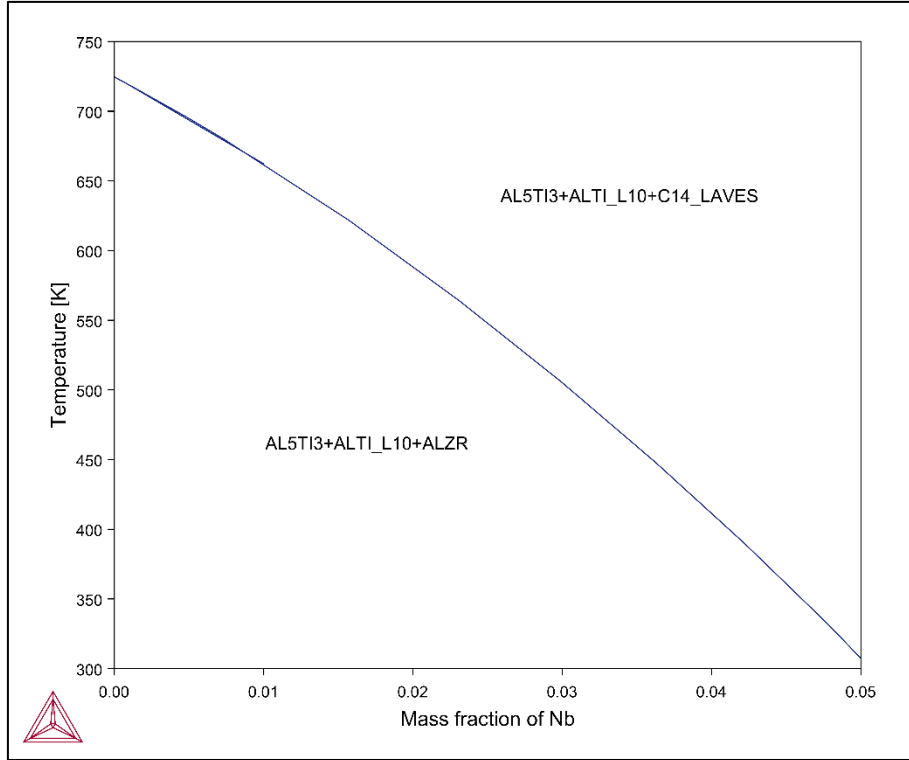
4.5.8. Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımı

Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının üretiminden önce alařımın termodinamik kararlılıđını g rmek ve katılařma sonrası oluřabilecek fazları anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıřtır.



řekil 4.63. Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının sıcaklık-ısı grafiđi

řekil 4.63'ten g r leceđi  zere Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldıđı, entropi deđerlerinin ise arttıđı g zlenmiřtir. Bu veriler ıřıđında Ti-44Al-6Hf-1Nb alařımının termodinamik olarak kararlı olduđu g r lm řt r. Bununla beraber, alařımın sođuma sonrası oluřabilecek fazlarını anlamak amacıyla faz diyagramı  izilmiřtir.



Şekil 4.64. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlarının faz diyagramı

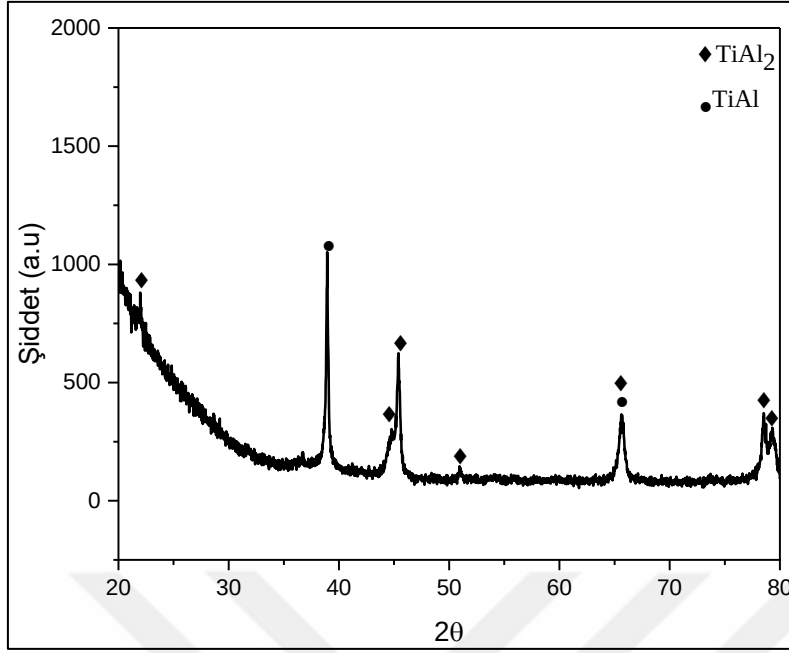
Şekil 4.64'ten görüleceği üzere alaşım ağırlıkça %1 Nb içerdiğinde AlZr, Ti₃Al₅ ve L10 tetragonal Ti-Al fazlarının oluşabileceği beklenmiştir. Ancak, alaşımda Zr elementi bulunmadığından dolayı ThermoCalc analizinde Hf görünmemesi, bu kompozisyonda daha önce bir çalışma yapılmadığını ve kompozisyonun özgün olduğunu göstermektedir. Dolayısıyla, AlZr fazı oluşabilme ihtimali değerlendirmeye alınmamıştır. Bununla beraber, vakum indüksiyon metodunda uygulanan soğutma hızının (≈ 70 °C/s) denge noktasından uzakta olabileceği ve alaşımda katılaşma sonucu denge dışı fazlar oluşabileceği de düşünülmüştür.



Resim 4.32. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımının radyografik görüntüleri

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımın üretimi gerçekleştirilmiştir. Resim 4.32'den anlaşılacağı üzere numuneye uygulanan radyografik muayenede çatlaklar ve döküm boşlukları gözlenmiştir. Ayrıca, filmin alt tarafında beyaz renkli görünen nokta erimemiş malzeme olduğunu göstermektedir. Radyografi filminde erimemiş malzemenin ne olduğunu bulmak mümkün olmadığından dolayı erimemiş malzemenin ne olabileceği içyapı analizlerinde değerlendirilmiştir. Dökülen alaşımın yoğunluğu boşluk olmayan bölgeden Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,312 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur.

Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımının fazlarını anlamak amacıyla uygulanan XRD analizinde (Şekil 4.65) alaşımda TiAl ve TiAl₂ fazları gözlenmiştir. Fazların kafes parametreleri olan a ve c , indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda=2d\sin\theta$) göre yapılmıştır. Çizelge 4.37 hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal TiAl yapısının kafes parametreleri $a=3.989 \text{ Å}$ ve $c=4.081 \text{ Å}$ 'dur.



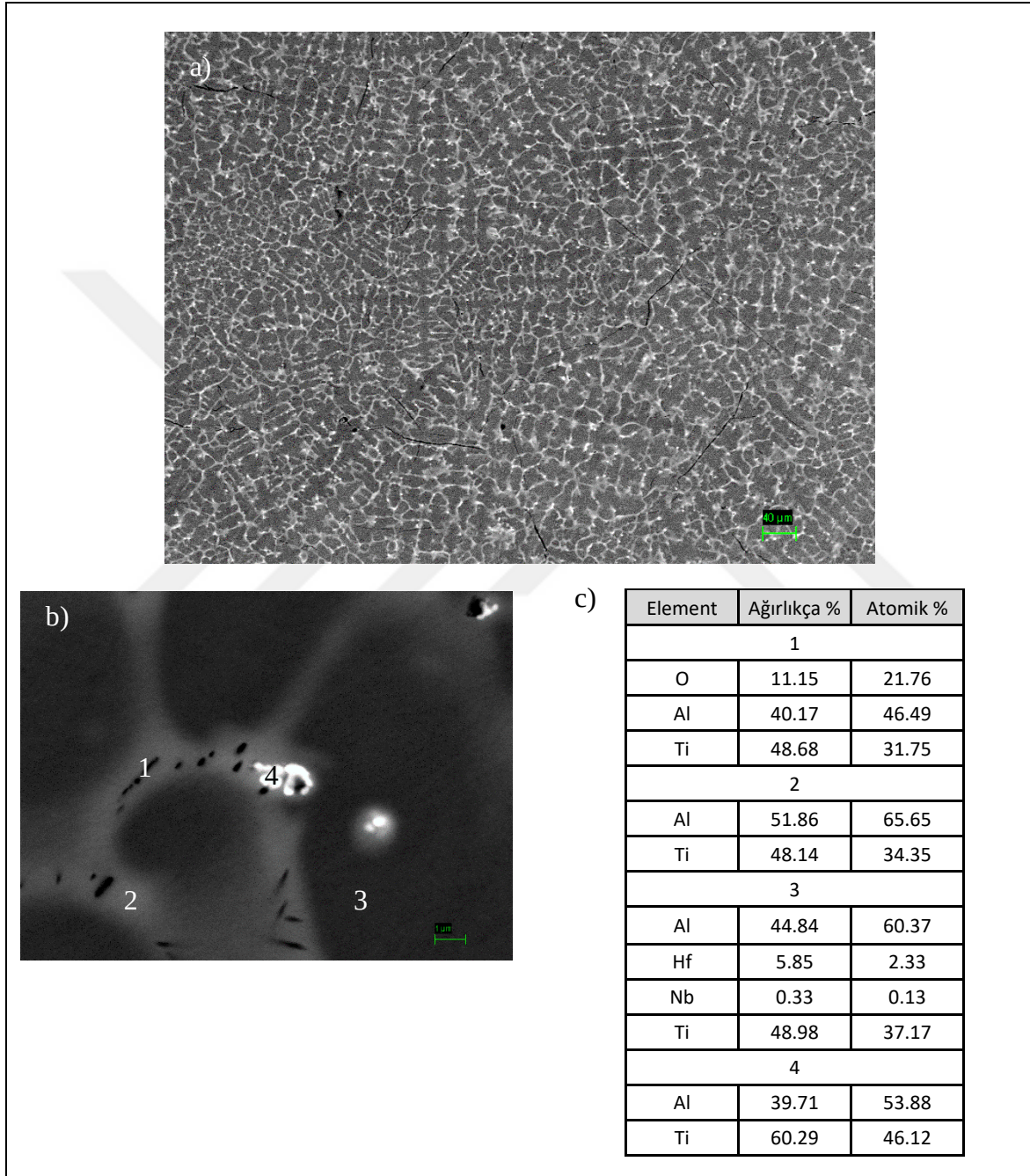
Şekil 4.65. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlarının XRD grafiği

Çizelge 4.37. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlarının kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
TiAl	<i>a</i> (deney.)	4.049
	<i>c</i> (deney.)	3.405
	<i>a</i> (deney.)	12.094
TiAl ₂	<i>b</i> (deney.)	3.959
	<i>c</i> (deney.)	4.032

Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlarının SEM görüntüleri Resim 4.33'te verilmiştir. Alaşımların içyapısı diğer alaşımlara benzer şekilde dentritik yapıdadır. Resim 4.33'te görülen siyah renkli faz atomik olarak %21.76 O, %46.49 Al ve %31.75 Ti, açık gri renkli faz %65.65 Al ve %34.35 Ti, koyu gri renkli faz %60.37 Al, %37.17 Ti, % 2.35 Hf ve %0.13 Nb beyaz renkli faz ise %53.88 Al, %46.12 Ti içermektedir. ThermoCalc, XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde koyu gri fazın az miktarda Nb ve Zr içeren Ti₃Al₅, açık gri renkli fazın TiAl₂ ve beyaz renkte görülen fazın ise TiAl olduğu doğrulanmıştır. Siyah renkli fazın ise oksit olduğu EDS verileri ile kanıtlanmıştır. İç yapıda görünen fazlar daha önceki TiAl₂ bazlı alaşımların içyapılarıyla uyumludur. Bu bileşimde faz diyagramına göre TiAl ve TiAl₂ fazlarının oluşması beklenirken, Ti₃Al₅ fazının denge koşullarında oluşması beklenmemektedir. Ancak, yarı kararlı Ti₃Al₅ fazının kristalografik olarak γ-TiAl ile yakın olması ve oluşması için sadece kısa mesafeli difüzyon gerekli olduğundan dolayı bu kompozisyonlarda bulunabileceği önceki çalışmalarda görülmüştür [153]. EDS

analizlerinde bulunan %0.33 Nb konsantrasyonu da dökümde hedeflenen %1 bileşimden eksik olarak görülmüştür. Bu verilere bakılarak radyografi filminde görünen beyaz renkli erimemiş elementin Nb elementi olduğu yorumu yapılmıştır. Ayrıca, radyografik muayenede görülen çatlaklara ve boşluklara içyapıda da rastlanılmıştır.



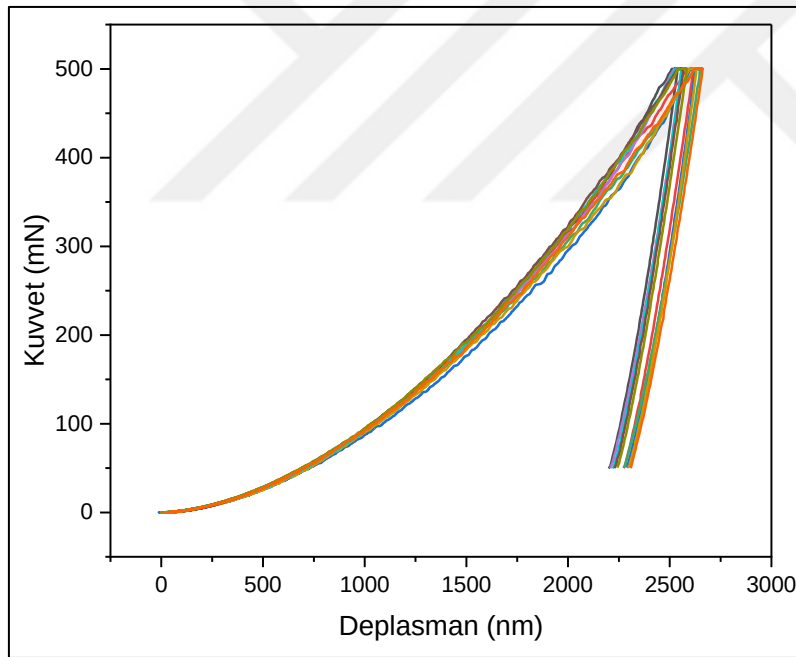
Resim 4.33. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımlarının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Metalografik olarak hazırlanan numuneye mikrosertlik ve nanoindentasyon testleri uygulanmıştır. Önceki testlerde olduğu gibi, nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 365 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.38. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımının deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
156.2	4.85	365

Nanoindentasyon testinde Şekil 4.66'dan görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiş olup veriler Çizelge 4.38'de verilmiştir. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımındaki deneysel veriler $TiAl_2$ bazlı önceki alaşımların deneysel sonuçları ile uyumludur.

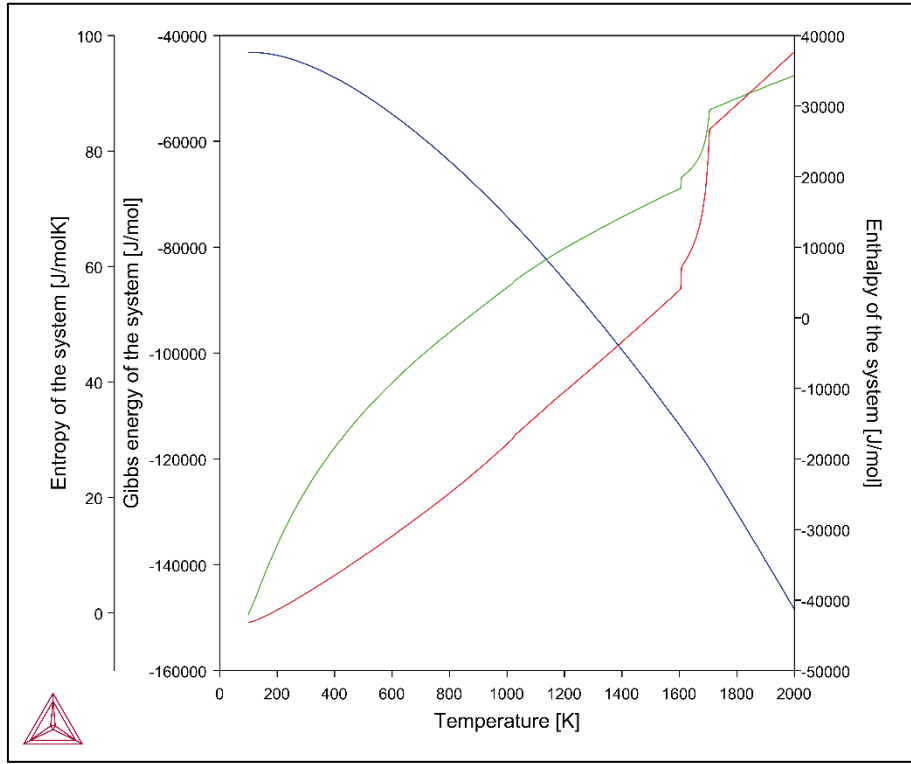


Şekil 4.66. Ti-44Al-6Hf-1Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

Sonuçlar alaşımsız $TiAl_2$ fazı ile karşılaştırıldığında Zr ve Nb eklemenin elastik modülü 191.7 GPa'dan [113] 156.2 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 14.6 GPa'dan [116] 4.85 GPa'ya düşmesi de alaşımın sünekliğinde iyileşme olduğunu göstermektedir.

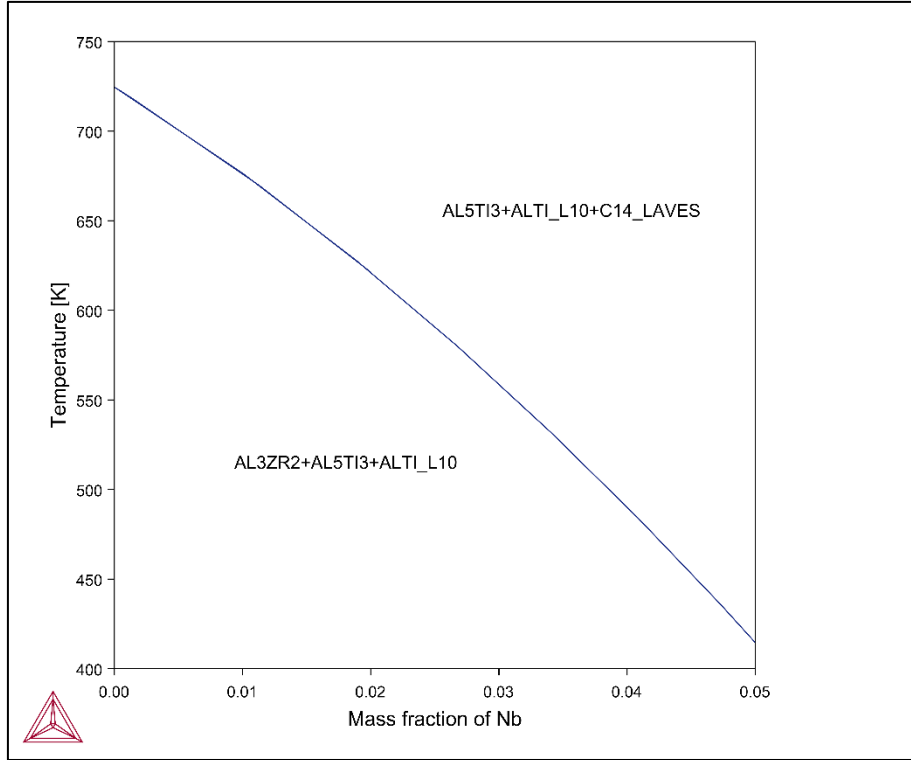
4.5.9. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımı

Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının üretiminden önce alařımın termodinamik kararlılıđını g rmek ve katılařma sonrası oluřabilecek fazları anlamak amacıyla ThermoCalc analizleri yapılmıřtır.



řekil 4.67. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının sıcaklık-ısı grafiđi

řekil 4.67’den g r leceđi  zere Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının artan sıcaklıkla birlikte Gibbs enerjisinin azaldıđı, entropi deđerlerinin ise arttıđı g zlenmiřtir. Bu bilgiler ıřıđında Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının termodinamik olarak kararlı olduđu g r lm řt r. Bununla beraber, alařımın katılařma sonrası oluřabilecek fazlarını anlamak amacıyla faz diyagramı  izilmiřtir.



Şekil 4.68. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlarının faz diyagramı

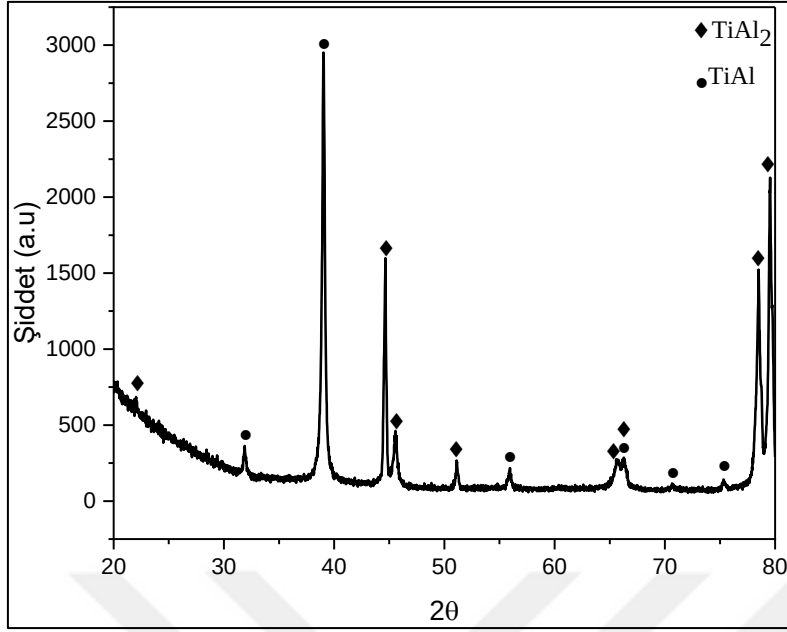
Şekil 4.68'den görüleceği üzere alaşım ağırlıkça %2 Nb içerdiğinde Al_3Zr_2 , Ti_3Al_5 ve L10 tetragonal Ti-Al fazlarının oluşabileceği beklenmiştir. Ancak, alaşımda Zr elementi bulunmadığından dolayı ThermoCalc analizinde Hf görünmemesi, bir önceki alaşımda olduğu gibi bu kompozisyonda daha önce bir çalışma yapılmadığını ve kompozisyonun özgün olduğunu göstermektedir. Dolayısıyla, Al_3Zr_2 fazının oluşma ihtimali görünmemektedir. Bununla beraber, alaşımların üretim metodu olan vakum indüksiyon metodunda uygulanan soğutma hızının ($\approx 70^\circ\text{C/s}$) denge dışı fazları da oluşturabileceği de dikkate alınmıştır.



Resim 4.34. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlarının radyografik görüntüleri

ThermoCalc analizlerinden sonra, alaşımların üretimine geçilmiştir. Önceki üretimlerde olduğu gibi yaklaşık 25 mm boyunda ve 12.5 mm çapında numune elde edilmiştir. Resim 4.34'ten görüleceği üzere numuneye uygulanan radyografik muayenede her dökümde görülen döküm çekintisi ve kalıp kaynaklı yüzeysel kılcal çatlaklar görülmüştür. Diğer alaşımlarla karşılaştırıldığında, Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlarının radyografik muayenesi daha hatasız olarak gözlenmiştir. Dökümde boşluk, erimemiş malzeme ya da segregasyon olmuş alanlar gözlenmemiştir. Dökülen alaşımların yoğunluğu Arşimet metoduyla deneysel olarak ölçülmüş olup $3,522 \text{ g/cm}^3$ olarak bulunmuştur.

Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımlarının fazlarını anlamak amacıyla uygulanan XRD analizinde alaşımda (Şekil 4.69) TiAl ve TiAl₂ fazları gözlenmiştir. Fazların kafes parametreleri olan a, b ve c , indekslenmiş XRD piklerinden hesaplanmıştır. Hesaplamalar, Bragg kuralına ($\lambda = 2d \sin \theta$) göre yapılmıştır. Çizelge 4.39, hem deneysel hem de teorik olarak hesaplanan kristal yapıların kafes parametrelerini göstermektedir. Tetragonal TiAl yapısının kafes parametreleri $a=3.989 \text{ Å}$ ve $c=4.081 \text{ Å}$ iken TiAl₂ için kafes parametreleri $a=12.094 \text{ Å}$, $b=3.959 \text{ Å}$ ve $c=4.032 \text{ Å}$ 'dur.



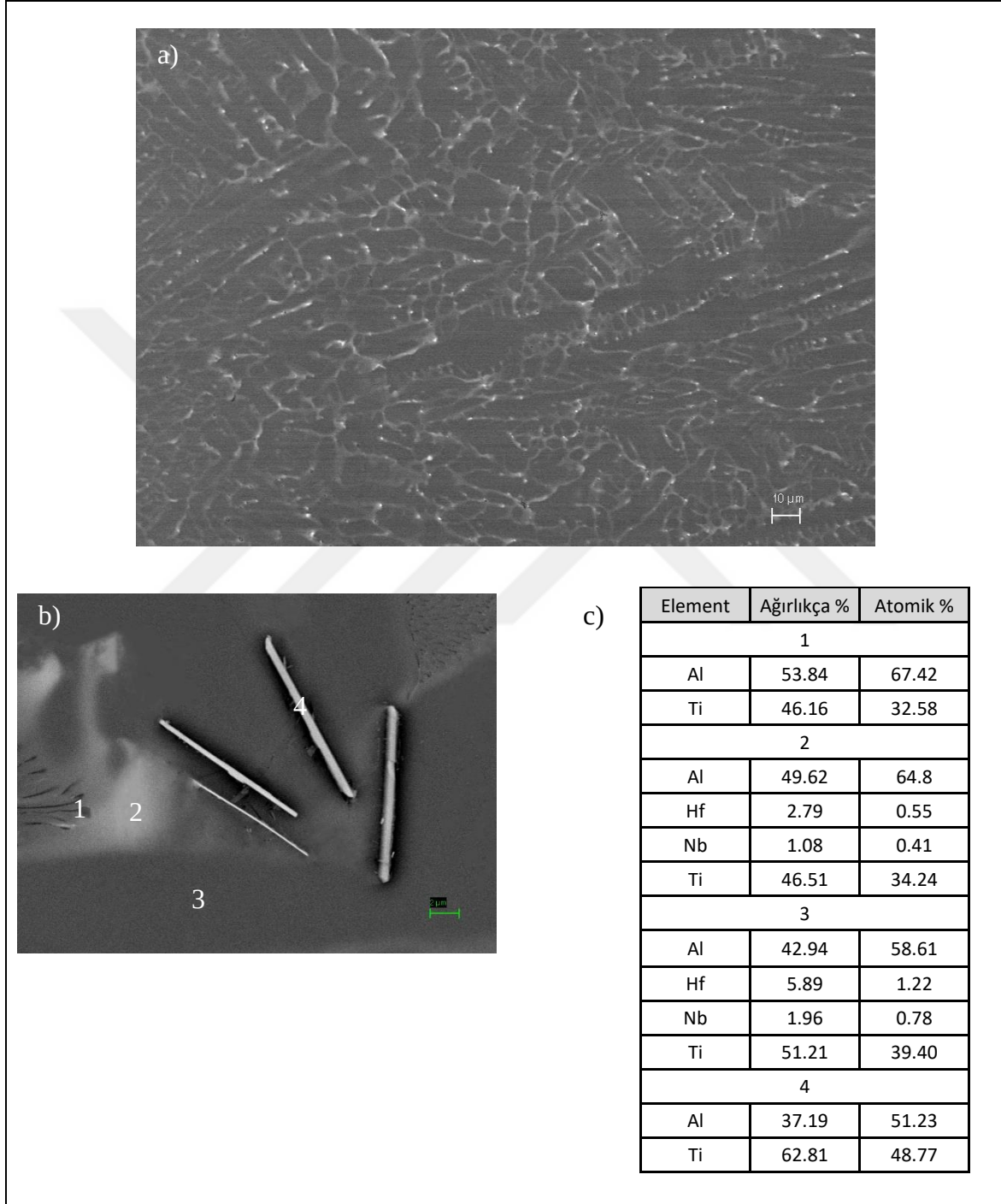
Şekil 4.69. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının XRD grafiği

Çizelge 4.39. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının kafes parametreleri

Yapı	Kafes parametreleri	Değer (Å)
TiAl	<i>a</i> (deney.)	4.049
	<i>c</i> (deney.)	3.405
	<i>a</i> (deney.)	12.094
TiAl ₂	<i>b</i> (deney.)	3.959
	<i>c</i> (deney.)	4.032

Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının SEM görüntüleri Resim 4.35'te verilmiştir. Alaşımın içyapısı diğer alaşımlara benzer şekilde dendritik yapıdadır. Resim 4.35'te görülen 1 numaralı faz atomik olarak %67.42 Al ve %32.58 Ti, açık gri renkli faz %64.8 Al ve %34.24 Ti, çıta şeklinde faz %51.23 Al, %48.77 Ti, matris ise döküm öncesi hedeflenen kompozisyona yakın %60.37 Al, %37.17 Ti, % 2.35 Hf ve %0.13 Nb içermektedir. ThermoCalc, XRD ve EDS analizleri birlikte değerlendirildiğinde koyu gri fazın yarı kararlı h-TiAl₂, açık gri renkli fazın r-TiAl₂ ve beyaz renkte görülen fazın ise TiAl olduğu doğrulanmıştır. İç yapıda görünen fazlar ve morfolojisi literatürde [153] yapılan çalışma ile uyumludur. Raporlanan çalışmada benzer Ti-Al bileşimlerinde TiAl₂'nin hem kararlı hem de yarı kararlı fazları ve TiAl fazları görülmüştür. Bu konsantrasyonda faz diyagramına göre TiAl ve r-TiAl₂ fazlarının oluşması beklenirken, h-TiAl₂ fazının oluşması beklenmemektedir. Ancak, Palm ve diğerleri [150] oda sıcaklığında h-TiAl₂ fazını gözlemlemiştir. Ayrıca, ThermoCalc

analizlerinde görülen yarı kararlı Ti_3Al_5 fazı bu alaşımda oluşmamıştır. Bazı bölgelerde $TiAl$ fazının çıta şeklinde görülmesi, dönüşümün $TiAl$ -r- $TiAl_2$ katmanlı yapıyı oluşturmadığı ve dönüşümün tamamen gerçekleşmediği şeklinde yorumlanmıştır.



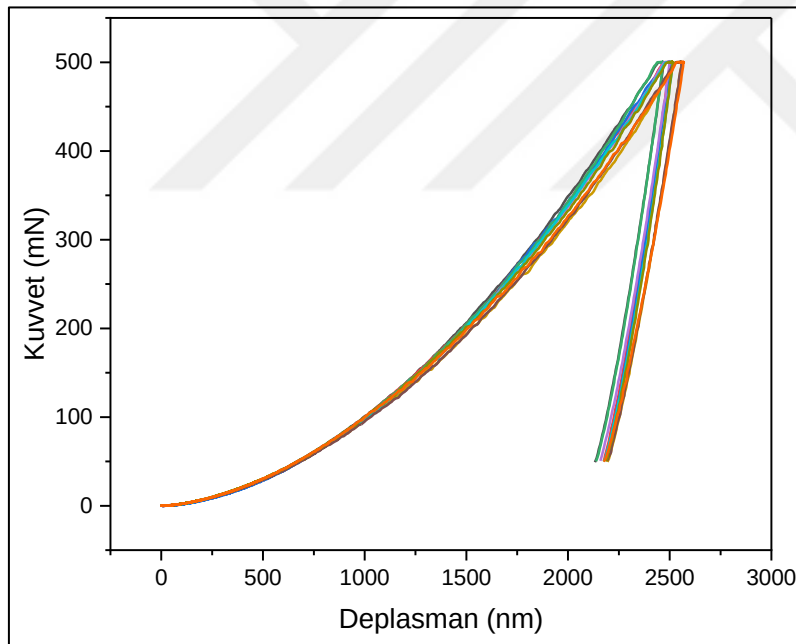
Resim 4.35. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının a) İçyapısı, b) Fazların detaylı gösterimi, c) EDS analizi

Karakterizasyon testlerinin diğer aşamasında ise numuneye mikrosertlik ve nanoindentasyon testleri uygulanmıştır. Önceki numunelerde uygulandığı üzere, nanoindentasyon testinde on, mikrosertlik testinde ise 5 adet ölçüm alınmıştır. Alaşımın mikrosertlik değeri ortalama 371 HV 0,1 olarak bulunmuştur.

Çizelge 4.40. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının deneysel mekanik özellikleri

Özellik		
E (GPa)	H (GPa)	HV 0,1
163.7	5.38	371

Nanoindentasyon testinde Şekil 4.70'ten görüleceği üzere benzer sonuçlar elde edilmiş olup veriler Çizelge 4.40'ta verilmiştir. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımındaki deneysel veriler TiAl₂ bazlı önceki alaşımların deneysel sonuçları ile uyumludur.



Şekil 4.70. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının nanosertlik testi grafiği

Sonuçlar alaşımsız TiAl₂ fazı ile karşılaştırıldığında Zr ve Nb eklemenin elastik modülü 191.7 GPa'dan [113] 163.7 GPa'ya düşürdüğü görülmüştür. Bununla beraber, sertliğin 14.6 GPa'dan [116] 5.38 GPa'ya düşmesi de alaşımın sünekliğinde iyileşme olduğunu göstermektedir.

4.5.10. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının yüksek sıcaklık testleri

Önemli bir malzeme tasarım kriteri olan üretilebilirlik için Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımından 2 ingot üretimi daha yapılmıřtır. Resim 4.36'da göröleceęi üzere alařımlara uygulanan radyografik muayene sonucu malzemelerin hatasız řekilde üretilebildięi görölmüřtür. Yapılan mikroyapı analizinde fazlar ve kompozisyonlar deęiřmedięi için bu paragrafta mikroyapı detaylarına yer verilmemiřtir. Üretilen alařımların performansını anlamak amacıyla, bir ingot yüksek sıcaklık oksidasyon testi bir ingot da yüksek sıcaklık basma testi için kullanılmıřtır. Ticari TiAl alařımı bulunmadıęından dolayı, performans testlerinde karřılařtırmak amacıyla havacılık ve uzay sanayinde kullanılan Ti6Al4V alařımları kullanılmıřtır.



Resim 4.36. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımlarının radyografik muayene görüntüleri

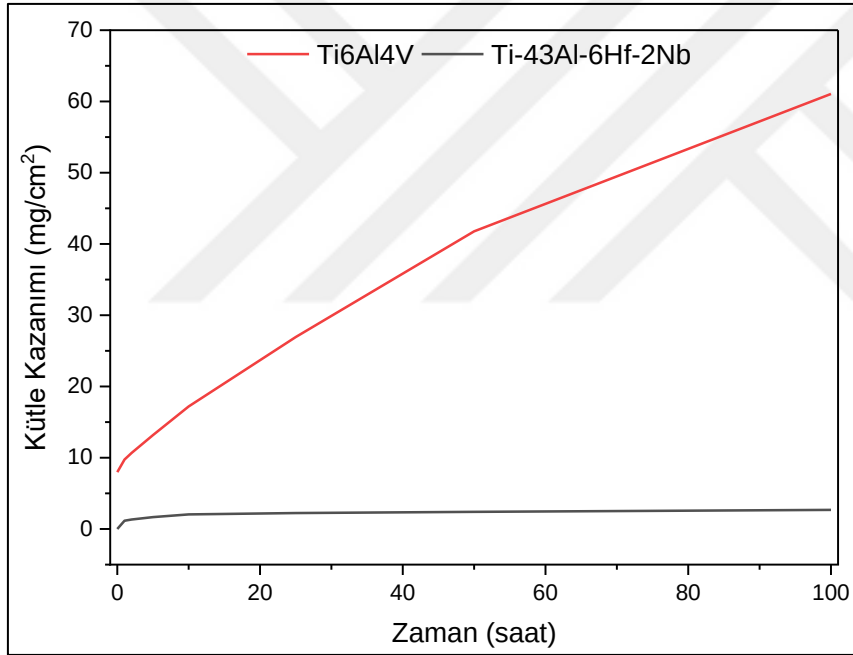
Yüksek sıcaklık oksidasyon testleri

İzotermal oksidasyon testleri 800 °C'de statik laboratuvar ortamında bulunan kül fırınında yapılmıřtır. İzotermal oksidasyon testleri için numuneler, 8 × 8 × 2 mm boyutlarında kesilmiř, kesilen numuneler 1200 kumlu zımpara ile parlatılmıřtır. Numunelerdeki olası kalıntı ve kirlilikleri gidermek amacıyla numuneler 15 dakika aseton içeren ultrasonik banyoda temizlenmiř ve kurulanmıřtır. Fırın 800 °C'ye ulařtıktan sonra, numuneler fırına konmuřtur. Fırına girmeden ve girdikten sonraki 1,2,5,10,25,50 ve 100 saatlik çevrimlerden sonra, numuneler fırından çıkarılıp 10⁻⁵ gr. hassasiyete sahip terazi ile kütle deęiřimleri izlenmiřtir.

Ti-43Al-6Hf-2Nb ve Ti6Al4V alaşımlarının hangi oksidasyon kinetiğine uyduğunu anlamak amacıyla aşağıdaki denklem [154] kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır,

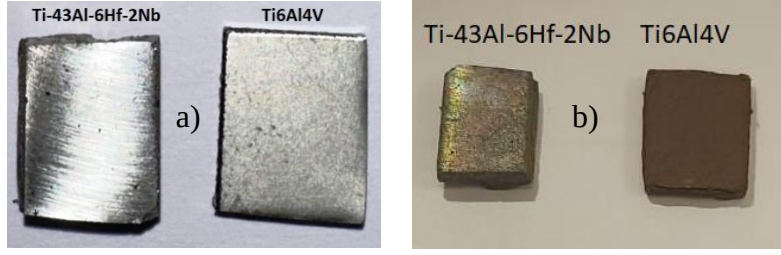
$$\Delta M^n = k_n t \quad (4.12)$$

Denklemde ΔM kütle kazanımını (mg/cm^2), n oksidasyon katsayısını ($n=1$ doğrusal, $n=2$ parabolik), t ise zamanı (saat) tanımlamaktadır. Şekil 4.71’de verilen oksidasyon grafikleri incelendiğinde parabolik davranış gözlenmiştir. Oksidasyon katsayısı $n=2$ alındığında, Ti6Al4V için $k_n = 4.3 \times 10^{-1} \text{ mg}^2/\text{cm}^4$, Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımı içinse $k_n = 1.8 \times 10^{-2} \text{ mg}^2/\text{cm}^4$ olarak hesaplanmıştır. Bu değerlere bakılarak Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının Ti6Al4V alaşımına göre önemli derecede yüksek sıcaklık oksidasyon direnci gösterdiği gözlenmiştir.

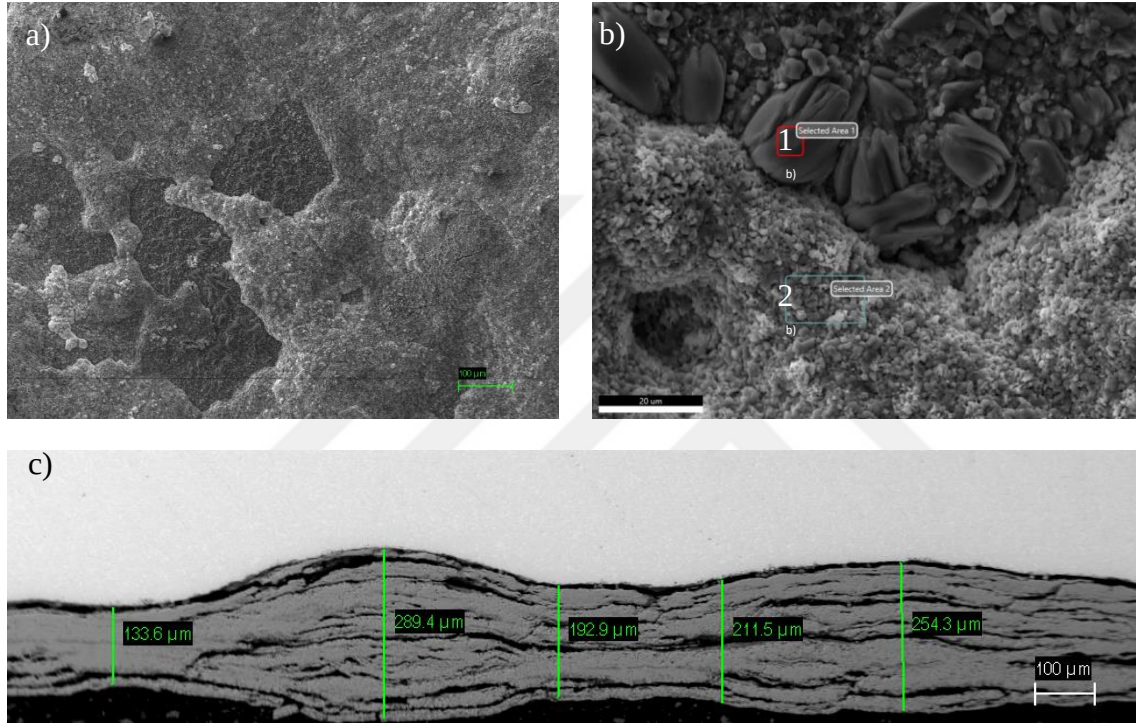


Şekil 4.71. Ti-43Al-6Hf-2Nb ve Ti6Al4V alaşımlarının 800 °C’deki oksidasyon kinetiği grafikleri

Alaşımların deney sonrası yüzeysel ve kesitsel oksit yapılarını anlamak amacıyla SEM analizleri yapılmıştır. Resim 4.37 alaşımların deney öncesi ve deney sonrası makro düzeyde görüntülerini göstermektedir.

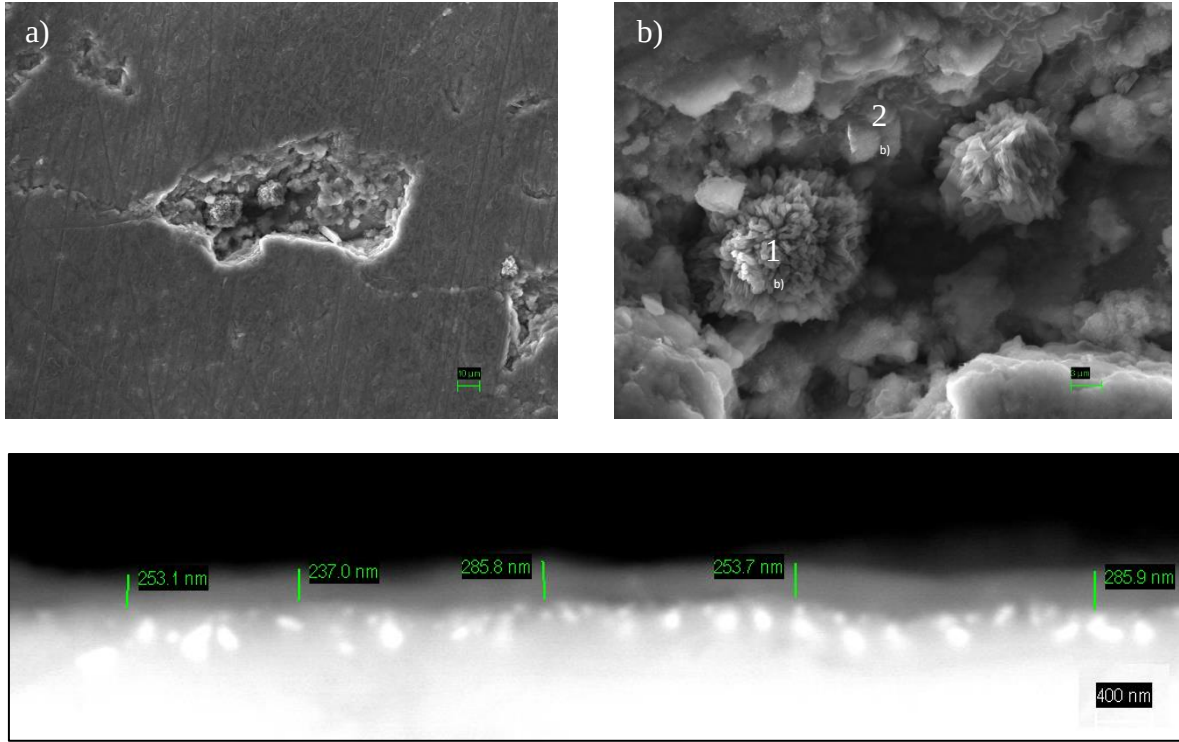


Resim 4.37. a) Oksidasyon testi öncesi b) Oksidasyon testi sonrası alaşımların görüntüleri



Resim 4.38. Ti6Al4V alaşımının a) Test sonrası yüzey görüntüsü b) Detaylı görünüm c) Kesit alanı

Resim 4.38'den görüleceği üzere Ti6Al4V alaşımı yüzeyinde yüksek oranda oksitlenme oluşmuştur. EDS analizi yapıldığında Resim 4.35 b) de görülen 1 numaralı parçacığın TiO_2 (EDS: %33.88 Ti, %66.12 O) 2 nolu alanın ise TiO_2 ve Al_2O_3 (EDS: %18.43 Ti, %16.44 Al, %63.91 O) karışımı olduğu yorumu yapılmıştır. Ayrıca, yapılan kesitsel muayenede yaklaşık 300 µm oksit kalınlığı görülmüştür.



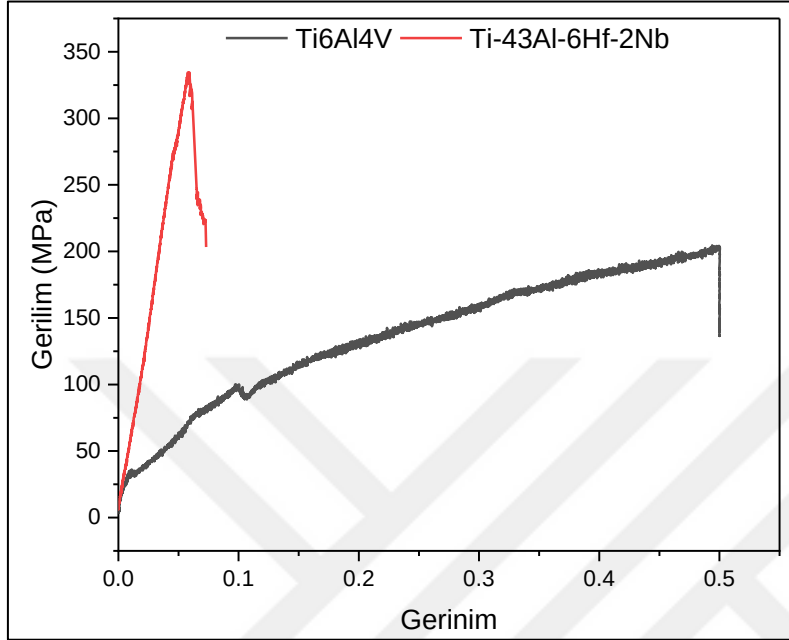
Resim 4.39. Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının a) Test sonrası yüzey görüntüsü b) Detaylı görünüm c) Kesit alanı

Resim 4.39'dan görüleceđi üzere Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının yüzeyinde Ti6Al4V alařımına göre oldukça az oranda oksitlenme oluşur. EDS analizi yapıldığında Resim 4.39 b)'de görülen 1 numaralı parçacığın TiO_2 (EDS: %32.21 Ti, %67.79 O) 2 nolu alanın ise TiO_2 ve Al_2O_3 (EDS: %18.10 Ti, %22.55 Al, %59.35 O) karışımı olduđu yorumu yapılmıştır. Ayrıca, yapılan kesitsel muayenede yaklaşık 300 nm oksit kalınlığı görülmüştür. TiO_2 ve Al_2O_3 oksitlerinin birlikte oluşumu yüksek sıcaklık oksidasyonun ilk aşamalarında gerçekleşmektedir. Bunun sebebi ise iki oksitin de büyüme dinamiklerinin benzer olmasıdır [155].

Yüksek sıcaklık basma testleri

Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımının üretilebilirliğini kanıtlamak amacıyla üretilen ingottan 12x12 mm boyutlarında numune, tel erozyon cihazıyla kesilmiştir. Sıcak basma testleri Gleeble 3800 cihazı ile yapılmış olup, sıcaklık Pt-Rh termocuřtu ile izlenmiştir. Numuneler 10 K/s ısıtma hızında ısıtılmıştır ve sıcaklığın numune boyunca homojen dağılması amacıyla testten önce 1 dakika 800 °C'de bekletilmiştir. Test parametreleri için %50 deformasyon oranı, 0.01 s⁻¹ gerinim oranı seçilmiştir.

Şekil 4.72'den görüleceği üzere Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımı 800 °C'de yaklaşık 350 MPa basma mukavemeti ve yaklaşık %7 basma gerinimi göstermiştir. Ti6Al4V alaşımı ise yaklaşık 200 MPa basma mukavemetine ulaşmıştır.



Şekil 4.72. Ti-43Al-6Hf-2Nb ve Ti6Al4V alaşımlarının 800 °C'deki basma test grafiği

Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımı %7 uzamadan sonra kırılmıştır. Ti6Al4V alaşımı ise belirlenen deformasyon oranına kadar test edilmiştir. Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının 350 MPa' da kırılma nedenleri olarak işleme sırasında ortaya çıkan gerilim ve döküm sonrası herhangi bir termomekanik işlem yapılmadığı olarak düşünülmüştür. Numune kırılgan davranış gösterip test esnasında parçalara ayrıldığı SEM'de kırılma yüzeyi analizi yapılamamıştır. Eldeki veriler ışığında Ti-43Al-6Hf-2Nb alaşımının yüksek sıcaklık basma mukavemetinin Ti6Al4V alaşımına göre yaklaşık 1.75 kat fazla olduğu görülmüştür.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1. Sonuçlar

Bu çalışmada Ti, Al, Hf, Zr ve Nb elementleri kullanılarak Ti-Al alaşımları tasarlanmıştır. Çalışmanın temel amacı düşük yoğunluklu, yüksek mukavemetli, sünekliği geliştirilmiş ve havacılık ve uzay sanayinde kullanılabilecek Ti-Al bazlı alaşım elde etmektir. Alaşım tasarımı kapsamında yoğunluk fonksiyonel teorisi bazlı hesaplar Cambridge Sequential Total Energy Package (CASTEP) ile termofiziksel hesaplamalar ise Thermo-Calc yazılımı ile yapılmıştır. Ti-Al bazlı alaşımlar vakum indüksiyon ergitme prosesi ile üretilip, yaklaşık 25 mm boyunda 12,5 mm çapında ingotlar elde edilmiştir. Üretilen alaşımların yapısal karakterizasyonu elektron mikroskobu (SEM), X-ışını kırınımı (XRD), radyografik muayene ve yoğunluk ölçüm teknikleriyle; mekanik özelliklerin incelenmesi ise nanoindentasyon ve mikrosertlik metotlarıyla yapılmıştır.

Tezin ilk kısmında yapısal ve mekanik olarak kararlı uygun kompozisyonlar belirlemek amacıyla simülasyon çalışmaları yapılmıştır. Alaşım tasarımında $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ ara metalikleri baz alınarak önce ilgili fazlara Hf elementi eklenmiştir. Oluşum entalpi sonuçları, $Ti-(51-x)Al-xHf$ ve $Ti-(62-x)Al-xHf$ alaşımlarının daha kararlı olduğu gözlenmiştir. Elastik sabitler ve elastik modüllerin arttığı gözlenmiştir. Sünekliğin, Hf konsantrasyonu ağırlıkça %2.5'tan yüksek olduğunda arttığı gözlenmiştir. VCA yaklaşımı ile Hf konsantrasyonu ağırlıkça %4'e kadar çalışabilmektedir.

Hf elementi ile çalışılmasının ardından Zr elementinin $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımlarına etkisi çalışılmıştır. Oluşum entalpileri, Gibbs serbest enerjileri ve entropi değerlerine göre Zr katkılı $TiAl_2$ ve $TiAl_3$ alaşımları daha kararlı hale gelmiştir. Mekanik analizlerde, $Ti-(51-x)Al-xZr$ ve $Ti-(62-x)Al-xZr$ bileşiklerinin ağırlıkça %0 – 7.0 Zr katkılama aralığında mekanik olarak kararlı olduğu görülmüştür. Zr katkısı ağırlıkça %6'dan yüksek olduğunda alaşımlar teorik olarak sünek davranış göstermiştir. Zr ilavesi $TiAl_3$ intermetalik işlenebilirlik indeksini iyileştirirken, $TiAl_2$ alaşımında önemli bir değişiklik olmamıştır.

Hf ve Zr elementi ile çalışılmasının ardından Nb eklenmesi ile $Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb$, $Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb$, $Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb$, $Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb$ ve $Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb$ alaşımları çalışılmıştır.

Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alařımları % 0-4 Nb konsantrasyon aralıęında mekanik olarak kararlıdır. Modül deęerleri %2 Nb ilavesine kadar yaklaşık %10'luk artış göstermiř, bu kompozisyondan sonra bařlangıç deęerlerine yakın deęerlere kadar azalmıřtır. Ti-(48-x)Al-3Hf-xNb alařımları teorik olarak kırılın özelliđ göstermiřtir.

Ti-(45-x)Al-6Zr-xNb alařımı % 0-5 Nb aralıęı konsantrasyonunda mekanik olarak kararlıdır. Elastik modülleri %2 Nb ilavesine kadar önemli bir deęiřiklik göstermemiř, artan Nb konsantrasyonlarında artış eęilimi göstermiřtir. Ayrıca, %2 Nb ilavesinden sonra alařımın teorik süneklik deęerinin azaldıęı ve daha kırılın olduęu görölmüřtür.

Ti-(58-x)Al-4Hf-xNb alařımı % 0-2 Nb aralıęı konsantrasyonunda mekanik olarak kararlıdır. Artan Nb kompozisyonlarında alařım kararsız hale gelmiřtir. Kesme ve elastik modülleri %1 Nb ilavesine kadar artmıř, daha sonra azalmıřtır. Bulk modülü ise artan Nb konsantrasyonu ile artmıřtır. Alařım %2 Nb konsantrasyonu içerięine sahipken teorik olarak sünek davranıř göstermiřtir.

Ti-(58-x)Al-4Zr-xNb alařımı % 0-2 Nb konsantrasyonunda çalışılmıřtır. %2 Nb sonrası artan konsantrasyonlarda alařım mekanik olarak kararsız hale gelmiřtir. Kayma ve elastisite modülleri Nb konsantrasyonu arttıkça azalmıřtır. Bulk modülünde ise artan Nb konsantrasyonu karřısında önemli bir deęiřiklik olmamıřtır. Alařım %2 Nb konsantrasyonu içerięinde iken teorik olarak sünek davranıř göstermiřtir.

Ti-(57-x)Al-5Zr-xNb alařımı % 0-2 Nb aralıęı konsantrasyonunda mekanik olarak kararlıdır. Artan Nb kompozisyonlarında alařım kararsız hale gelmiřtir. Nb konsantrasyonu arttıkça bulk modülü deęiřmezken, kayma ve elastisite modülleri azalmıřtır. Ancak, alařım %2 Nb konsantrasyonu içerięinde kayma modülü deęeri çok azalmıřtır. Nb içerięi arttıkça teorik süneklik deęeri de artmıřtır.

Teorik olarak çalışılmıř ve mukavemet-süneklik deęerleri uygun olan Ti-45Al-6Zr, Ti-44Al-6Zr-1Nb, Ti-43Al-6Zr-2Nb, Ti-56Al-5Zr-1Nb, Ti-56Al-4Zr-2Nb, Ti-56Al-4Hf-2Nb, Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımları ile Zr ile benzer özellik göstereceęi düşünölmüř olan ve Zr yerine Hf ilave edilen Ti-44Al-6Hf-1Nb, Ti-43Al-6Hf-2Nb alařımları vakum indüksiyon ergitme metodu ile üretilmiřtir.

Ti-56Al-4Zr-2Nb alařımının üretimi sonrası bakır kalıptan çıkarıldığında cüruf bölgesinden kırılmış bir şekilde olduđu görölmüřtür. İyapısında katılařma sonrasında $TiAl_3$ ve yarı kararlı Ti_5Al_{11} fazları gözlenmiřtir. Teorik ve deneysel elastik modöl ve sertlik deđerleri uyumlu olarak gözlenmiřtir.

Ti-56Al-4Hf-2Nb alařımının üretimi sonrası bakır kalıptan çıkarıldığında boşluklar sebebiyle kırılmış olduđu görölmüřtür. İyapısında sođuma sonrasında $TiAl_3$ ve yarı kararlı Ti_2Al_5 fazları gözlenmiřtir. VCA metoduyla yapılan alıřmada sanalda yaratılan atomun Hf mekanik özelliklerine yakın hesaplanmasına yol atıđından dolayı, teorik ve deneysel mekanik özellikleri arasında farklılıklar gözlenmiřtir.

Ti-56Al-4Hf-2Zr alařımının üretimi sonrası bakır kalıptan çıkarıldığında yüzey atlakları ve boşluklar sebebiyle kırılmış olduđu görölmüřtür. İyapısında katılařma sonrasında $TiAl_3$ ve yarı kararlı Ti_5Al_{11} fazları gözlenmiřtir. Ti-56Al-4Hf-2Nb alařımında aıklandığı üzere teorik ve deneysel mekanik özellikleri arasında farklılıklar gözlenmiřtir.

Ti-56Al-5Zr-1Nb alařımının üretimi sonrası bakır kalıptan çıkarıldığında yüzey atlakları ve boşluklar sebebiyle kırılmış olduđu görölmüřtür. İyapısında katılařma sonrasında $TiAl_3$ ve yarı kararlı Ti_2Al_5 fazları gözlenmiřtir. Teorik ve deneysel elastik modöl ve sertlik deđerleri uyumlu olarak gözlenmiřtir.

Ti-45Al-6Zr alařımının üretimi sonrası yapılan radyografik muayenede erimemiř malzeme, atlaklara ve boşluklara rastlanılmıřtır. İyapısında sođuma sonrasında $TiAl_2$, yarı kararlı Ti_3Al_5 ve $TiAl$ fazları gözlenmiřtir. Ayrıca, alařımda oksitlere rastlanılmıřtır. Teorik ve deneysel elastik modüllerinin uyumlu olduđu gözlenmiřtir. Sertlik deđerlerinde ise farklılıklar görölmüřtür.

Ti-44Al-6Zr-1Nb alařımının üretimi sonrası yapılan radyografik muayenede boşluklara rastlanılmıřtır. İyapısında sođuma sonrasında $TiAl_2$, yarı kararlı Ti_3Al_5 ve $TiAl$ fazları gözlenmiřtir. Ayrıca, alařımda oksitlere rastlanılmıřtır. Teorik ve deneysel elastik modüllerinin uyumlu olduđu, sertlik deđerlerinde ise sapmalar görölmüřtür.

Ti-43Al-6Zr-2Nb alařımının üretimi sonrası yapılan radyografik muayenede döküm boşluklarına rastlanılmıřtır. İyapısında sođuma sonrasında ötektik yapıda $TiAl_2$ ve $TiAl$

fazları gözlenmiştir. Ayrıca, alaşımda oksitlere rastlanmıştır. Teorik ve deneysel elastik modüllerinin uyumlu olduğu, sertlik değerlerinde ise farklılıklar görülmüştür.

Ti-44Al-6Hf-1Nb alaışımının üretimi sonrası yapılan radyografik muayenede erimemiş malzeme, çatlaklara ve boşluklara rastlanılmıştır. İyapısında soğuma sonrasında TiAl₂, yarı kararlı Ti₃Al₅ ve TiAl fazları gözlenmiştir. Ayrıca, alaşımda oksitlere rastlanmıştır. Deneysel elastik modül ve sertlik değerlerinin diğer alaşımların deneysel verileriyle uyumlu olduğu görülmüştür

Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının üretimi sonrası yapılan radyografik muayenede sadece döküm çekintisi olan bölgede yüzeysel kılcal çatlaklar görülmüştür. İyapısında katılaşıma sonrasında h-TiAl₂, r-TiAl₂ ve TiAl fazları gözlenmiştir. Deneysel elastik modül ve sertlik değerlerinin diğer alaşımların deneysel bulgularıyla uyumlu olduğu görülmüştür.

Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının üretilebilirlik tekrarlanabilirliğini görmek amacıyla 2 ingot üretimi daha yapılmıştır. Döküm sonrası uygulanan radyografik muayene sonucu malzemelerin hatasız şekilde üretilebildiği görülmüştür. 800 °C’de yapılan yüksek sıcaklık oksidasyon testlerinde Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının Ti6Al4V alaışımına göre önemli derecede yüksek sıcaklık oksidasyon direnci gösterdiği gözlenmiştir. Ayrıca, 800 °C’de yapılan yüksek sıcaklık basma testinde Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının basma mukavemetinin Ti6Al4V alaışımına göre yaklaşık 1.75 kat fazla olduğu görülmüştür.

5.2. Öneriler

Bu tez kapsamında TiAl₂ ve TiAl₃ bazlı intermetaliklere Hf, Zr ve Nb ilavesi yapılarak uygun kompozisyonlar bulunarak alaşım tasarımı, Thermo-Calc analizleri ve deneysel çalışmalar yapılarak havacılık ve uzay sanayinde kullanılmaya aday alaşım belirlenerek literatüre katkıda bulunulmuştur. Çalışmada elde edilen havacılık için önemli sayılabilecek en önemli bulgu üretilebilirlik ve yüksek sıcaklık özellikleri geliştirilmiş olan Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının üretilmesidir. Elde edilen veriler ışığında Ti-43Al-6Hf-2Nb alaışımının özelliklerini biraz daha geliştirebilecek ve yarı kararlı fazların çözülmesini sağlayacak vakum altında yüksek sıcaklıkta ve uzun süre fırında bekletilerek tavlama işlemi yapılabilir. Ayrıca, iyapının katmanlı TiAl-TiAl₂ fazlarını içerecek şekilde elde edilmesi amacıyla döküm yapılabilmesi için farklı bir kontrollü döküm sisteminde denemeler yapılabilir. Bu

alışmadaki sistematięe uygun olarak alařımın, yorulma, sürünme vb. davranışları içerecek şekilde alışmalar yapılabilir. Bu tez alışması kapsamında üzerinde durulmayan döküm ve işleme sonrası farklı gerilim giderme sıcaklıkları uygulanarak testler için daha iyi numuneler elde edilmesi sağlanabilir. Bu tez kapsamındaki bulguların nitelik ve nicelik açısından dięer alışmalara referans olabileceęi düşünölmektedir.





KAYNAKLAR

1. Cinca, N., Lima, C. R. C., and Guilemany, J. M. (2013). An overview of intermetallics research and application: Status of thermal spray coatings. *Journal of Materials Research and Technology*, 2(1), 75-86.
2. Aoki, K., and Izumi, O. (1979). Flow and fracture behaviour of Ni₃(Al·Ti) single crystals tested in tension. *Journal of Materials Science*, 14, 1800-1806.
3. Roth, R., Clark, J. P., and Field, F. R. (1994). The potential for CMCs to replace superalloys in engine exhaust ducts. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)* 46, 32-35.
4. Jiao, X., Liu, Y., Cai, X., Wang, J., and Feng, P. (2021). Progress of porous Al-containing intermetallics fabricated by combustion synthesis reactions: A review. *Journal of Materials Science*, 56, 11605-11630.
5. Clemens, H., and Smarsly, W. (2011). Light-weight intermetallic titanium aluminides—status of research and development. *Advanced Materials Research*, 278, 551-556.
6. Fu, C. L. (1990). Electronic, elastic, and fracture properties of trialuminide alloys: Al₃Sc and Al₃Ti. *Journal of Materials Research*, 5(5), 971-979.
7. Wu, X. (2006). Review of alloy and process development of TiAl alloys. *Intermetallics*, 14(10-11), 1114-1122.
8. Grytsiv, A., Rogl, P., Schmidt, H., Giester, G., Hundegger, P., Wiesinger, G., and Pomjakushin, V. (2004). Formation and crystal chemistry of cubic ternary phases with filled Th₆Mn₂₃-type and AuCu₃-type in the systems Ti–MVIII–Al. *Intermetallics*, 12(5), 563-577.
9. Emiralioğlu, A., and Ünal, R. (2022). Additive manufacturing of gamma titanium aluminide alloys: a review. *Journal of Materials Science*, 57(7), 4441-4466.
10. Genc, O., and Unal, R. (2022). Development of gamma titanium aluminide (γ -TiAl) alloys: A review. *Journal of Alloys and Compounds*, 929, 167262.
11. Shu, S., Qiu, F., Xing, B., Jin, S., Wang, J., and Jiang, Q. (2013). Effect of strain rate on the compression behavior of TiAl and TiAl–2Mn alloys fabricated by combustion synthesis and hot press consolidation. *Intermetallics*, 43, 24-28.
12. Kim, Y. W., and Dimiduk, D. M. (1991). Progress in the understanding of gamma titanium aluminides. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, 43, 40-47.
13. Kim, Y. W., and Boyer, R. R. (1991). *Microstructure/property relationships in titanium aluminides and alloys*. Proceedings of the Symposium, Fall Meeting of the Minerals, Metals, and Materials Society, Detroit, MI, Warrendale, PA (US).

14. Sato, T. O., and Huang, Y. C. (1960). The equilibrium diagram of the Ti-Al system. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, 1(1), 22-26.
15. Jaffee, R. I. (1958). The physical metallurgy of titanium alloys. *Progress in Metal Physics*, 7, 65-163.
16. Murray, J. L. (1987). *Monograph series on alloy phase diagrams: phase diagrams of binary titanium alloys*. Ohio: ASM International, Metals Park, 345.
17. Grytsiv, A., Rogl, P., Schmidt, H., and Giester, G. (2003). Constitution of the ternary system Al-Ru-Ti (aluminum-ruthenium-titanium). *Journal of Phase Equilibria*, 24, 511-527.
18. Raghavan, V. (2005). Al-Ti (aluminum-titanium) *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 26(2), 171.
19. Schuster, J. C., and Palm, M. (2006). Reassessment of the binary aluminum-titanium phase diagram. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 27, 255-277.
20. Brandes, E. A., and Brook, G. B. (Eds.). (2013). *Smithells metals reference book*. Bodmin UK: Elsevier, 22-84.
21. Nakano, T., Negishi, A., Hayashi, K., and Umakoshi, Y. (1999). Ordering process of Al₅Ti₃, h-Al₂Ti and r-Al₂Ti with fcc-based long-period superstructures in rapidly solidified Al-rich TiAl alloys. *Acta Materialia*, 47(4), 1091-1104.
22. Chowdhury, H., Altenbach, H., Krüger, M., and Naumenko, K. (2017). Reviewing the class of Al-rich Ti-Al alloys: modeling high temperature plastic anisotropy and asymmetry. *Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes*, 3, 1-20.
23. Soboyejo, W. O., Shen, W., Lou, J., Mercer, C., Sinha, V., and Soboyejo, A. B. O. (2004). A probabilistic framework for the modeling of fatigue in cast lamellar gamma-based titanium aluminides. *Mechanics of Materials*, 36(1-2), 177-197.
24. Soboyejo, W. O., Ye, F., and Srivatsan, T. S. (1997). The fatigue and fracture behavior of a gamma-titanium aluminide intermetallic: Influence of ductile phase reinforcement. *Engineering Fracture Mechanics*, 56(3), 379-395.
25. Loria, E. A. (2000). Gamma titanium aluminides as prospective structural materials. *Intermetallics*, 8(9-11), 1339-1345.
26. Das, G., Kestler, H., Clemens, H., and Bartolotta, P. A. (2004). Sheet gamma TiAl: status and opportunities. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, 56, 42-45.
27. Duan, B., Yang, Y., He, S., Feng, Q., Mao, L., Zhang, X., Jiao, L., Lu, X., Chen, G., and Li, C. (2022). History and development of γ -TiAl alloys and the effect of alloying elements on their phase transformations. *Journal of Alloys and Compounds*, 909, 164811.
28. Kim, Y. W. (1989). Intermetallic alloys based on gamma titanium aluminide. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, 41, 24-30.

29. Kim, Y. Y. (1992). Microstructural evolution and mechanical properties of a forged gamma titanium aluminide alloy. *Acta Metallurgica et Materialia*, 40(6), 1121-1134.
30. Marketz, W. T., Fischer, F. D., Kauffmann, F., Dehm, G., Bidlingmaier, T., Wanner, A., and Clemens, H. (2002). On the role of twinning during room temperature deformation of γ -TiAl based alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 329, 177-183.
31. Kothari, K., Radhakrishnan, R., Wereley, N. M., and Sudarshan, T. S. (2007). Microstructure and mechanical properties of consolidated gamma titanium aluminides. *Powder Metallurgy*, 50(1), 21-27.
32. Niu, H. Z., Chen, Y. Y., Xiao, S. L., and Xu, L. J. (2012). Microstructure evolution and mechanical properties of a novel beta γ -TiAl alloy. *Intermetallics*, 31, 225-231.
33. Appel, F., Oehring, M., and Wagner, R. (2000). Novel design concepts for gamma-base titanium aluminide alloys. *Intermetallics*, 8(9-11), 1283-1312.
34. Kothari, K., Radhakrishnan, R., and Wereley, N. M. (2012). Advances in gamma titanium aluminides and their manufacturing techniques. *Progress in Aerospace Sciences*, 55, 1-16.
35. Clemens, H., Lorch, A., Eberhardt, N., Glatz, W., Knabl, W., and Kestler, H. (1999). Technology, properties and applications of intermetallic {gamma}-TiAl based alloys. *Zeitschrift für Metallkunde*, 90, 569-580.
36. Huang, S. C., and Hall, E. L. (1991). The effects of Cr additions to binary TiAl-base alloys. *Metallurgical Transactions A*, 22, 2619-2627.
37. Kim, Y. W. (1995). Effects of microstructure on the deformation and fracture of γ -TiAl alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 192, 519-533.
38. Zhang, N. L., and Sun, Z. P. (2016, March). *Effect of Cr on the microstructure and properties of high Nb-TiAl alloys prepared by hot-pressing sintering*. In International Conference on Materials Chemistry and Environmental Protection 2015, Sanya City, Atlantis Press, 1-4.
39. Wang, Y., Wang, J. N., Yang, J., and Zhang, B. (2005). Control of a fine-grained microstructure for cast high-Cr TiAl alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 392(1-2), 235-239.
40. Wang, Q., Ding, H., Zhang, H., Chen, R., Guo, J., and Fu, H. (2018). Influence of Mn addition on the microstructure and mechanical properties of a directionally solidified γ -TiAl alloy. *Materials Characterization*, 137, 133-141.
41. Jin, Y., Wang, J. N., Wang, Y., and Yang, J. (2004). Effect of Mn on formation of lamellar structure in a γ -TiAl alloy. *Materials Letters*, 58(29), 3756-3760.
42. Xu, X., Ding, H., Huang, H., Liang, H., Chen, R., Guo, J., and Fu, H. (2022). Effect of V on the microstructure and brittle-to-ductile transition of directionally solidified high-Nb TiAl alloy. *Intermetallics*, 142, 107455.

43. Wang, Q., Chen, R., Yang, Y., Guo, J., Su, Y., Ding, H., and Fu, H. (2018). Effects of V and B, Y additions on the microstructure and creep behaviour of high-Nb TiAl alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 747, 640-647.
44. Liu, C. T., Wright, J. L., and Deevi, S. C. (2002). Microstructures and properties of a hot-extruded TiAl containing no Cr. *Materials Science and Engineering: A*, 329, 416-423.
45. Singh, V., Mondal, C., Sarkar, R., Bhattacharjee, P. P., and Ghosal, P. (2020). Compressive creep behavior of a γ -TiAl based Ti-45Al-8Nb-2Cr-0.2 B alloy: the role of β (B2)-phase and concurrent phase transformations. *Materials Science and Engineering: A*, 774, 138891.
46. Huang, S. C., and Hall, E. L. (1990). Structures and properties of gamma-TiAl alloys containing interstitial elements. *Materials Research Society Online Proceedings Library*, 213, 827.
47. Kan, W., Chen, B., Jin, C., Peng, H., and Lin, J. (2018). Microstructure and mechanical properties of a high Nb-TiAl alloy fabricated by electron beam melting. *Materials & Design*, 160, 611-623.
48. Mathabathe, M. N., Bolokang, A. S., Govender, G., Mostert, R. J., and Siyasiya, C. W. (2018). The vacuum melted γ -TiAl (Nb, Cr, Si)-doped alloys and their cyclic oxidation properties. *Vacuum*, 154, 82-89.
49. Vojtěch, D., Popela, T., Kubásek, J., Maixner, J., and Novák, P. (2011). Comparison of Nb-and Ta-effectiveness for improvement of the cyclic oxidation resistance of TiAl-based intermetallics. *Intermetallics*, 19(4), 493-501.
50. Durda, E., and Przybylski, K. (2016). Oxidation behavior of Ti-46Al-8Nb alloy with boron and carbon addition under thermal cycling conditions. *Intermetallics*, 71, 51-56.
51. Noda, T., Okabe, M., Isobe, S., and Sayashi, M. (1995). Silicide precipitation strengthened TiAl. *Materials Science and Engineering: A*, 192, 774-779.
52. Laska, N., Braun, R., and Knittel, S. (2018). Oxidation behavior of protective Ti-Al-Cr based coatings applied on the γ -TiAl alloys Ti-48-2-2 and TNM-B1. *Surface and Coatings Technology*, 349, 347-356.
53. Liang, Z., Xiao, S., Yu, H., Li, Q., Zheng, Y., Xu, L., Xue, X., Tian, J. and Chen, Y. (2022). Enhanced high temperature tensile and creep properties of a β -solidified γ -TiAl alloy with the hybrid addition of C and Y₂O₃. *Intermetallics*, 150, 107698.
54. Wu, Z., Hu, R., Zhang, T., Zhang, F., Kou, H., and Li, J. (2017). Understanding the role of carbon atoms on microstructure and phase transformation of high Nb containing TiAl alloys. *Materials Characterization*, 124, 1-7.
55. Okamoto, H. (1993). Al-Ti (aluminum-titanium). *Journal of Phase Equilibria*, 14(1), 120-121.

56. Hu, D. (2016). Role of boron in TiAl alloy development: a review. *Rare Metals*, 35(1), 1-14.
57. Larsen, D. E., and Christodoulou, L. (1990). Effect of XD™ TiB₂ Volume Fraction on the Microstructure of a Cast Near-gamma titanium aluminide alloy. *Materials Research Society Online Proceedings Library*, 194, 285.
58. Huber, D., Clemens, H., and Stockinger, M. (2012). Near conventional forging of an advanced TiAl alloy. *Materials Research Society Online Proceedings Library*, 1516, 23-28.
59. Hu, D. W., and Wu, X. H. (2010). Tensile ductility of cast TiAl alloys. *Materials Science Forum*, 638, 1336-1341.
60. Hu, D., Blenkinsop, P. A., and Loretto, M. H. Alpha phase decomposition during continuous cooling in Ti₄₈Al₂Cr₂Nb alloys with and without boron addition. *The Ninth World Conference on Titanium*, 99, 290-297.
61. Chan, K. S., and Kim, Y. W. (1995). Effects of lamellae spacing and colony size on the fracture resistance of a fully-lamellar TiAl alloy. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43(2), 439-451.
62. de Farias Azevedo, C. R., and Flower, H. M. (1999). Microstructure and phase relationships in Ti–Al–Si system. *Materials Science and Technology*, 15(8), 869-877.
63. Wu, J. S., Beaven, P. A., and Wagner, R. (1990). The Ti₃ (Al, Si)+ Ti₅ (Si, Al) β Eutectic Reaction in the Ti-Al-Si system. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 24(1), 207-212.
64. Guan, Z. Q., Pfullmann, T., Oehring, M., and Bormann, R. (1997). Phase formation during ball milling and subsequent thermal decomposition of Ti–Al–Si powder blends. *Journal of Alloys and Compounds*, 252(1-2), 245-251.
65. Novák, P., Kříž, J., Průša, F., Kubásek, J., Marek, I., Michalcová, A., Voděrová, M., and Vojtěch, D. (2013). Structure and properties of Ti–Al–Si-X alloys produced by SHS method. *Intermetallics*, 39, 11-19.
66. Li, X. Y., Taniguchi, S., Matsunaga, Y., Nakagawa, K., and Fujita, K. (2003). Influence of siliconizing on the oxidation behavior of a γ -TiAl based alloy. *Intermetallics*, 11(2), 143-150.
67. Song, Y., Yang, R., Li, D., Hu, Z. Q., and Guo, Z. X. (2000). A first principles study of the influence of alloying elements on TiAl: site preference. *Intermetallics*, 8(5-6), 563-568.
68. Cheng, T. T., Willis, M. R., & Jones, I. P. (1999). Effects of major alloying additions on the microstructure and mechanical properties of γ -TiAl. *Intermetallics*, 7(1), 89-99.
69. Kong, F., Chen, Y., and Tian, J. (2004). Effect of yttrium on microstructure and mechanical properties of Ti-43Al-9V alloy. *Chinese Journal of Rare Metals*, 28, 357-360.

70. Kim, Y. W. (1994). Ordered intermetallic alloys, part III: gamma titanium aluminides. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, 46, 30-39.
71. Bewlay, B. P., Nag, S., Suzuki, A., and Weimer, M. J. (2016). TiAl alloys in commercial aircraft engines. *Materials at High Temperatures*, 33(4-5), 549-559.
72. Dobatkin, V. I., and Anoshkin, N. F. (1999). Comparison of macrosegregation in titanium and aluminium alloy ingots. *Materials Science and Engineering: A*, 263(2), 224-229.
73. Neumeier, S., Bresler, J., Zenk, C., Haußmann, L., Stark, A., Pyczak, F., and Göken, M. (2021). Partitioning behavior of Nb, Ta, and Zr in fully lamellar γ/α_2 titanium aluminides and its effect on the lattice misfit and creep behavior. *Advanced Engineering Materials*, 23(11), 2100156.
74. Zhang, C., Hou, H., Zhao, Y., Yang, X., and Han, P. (2017). Effect of Zr, Hf, and Sn additives on elastic properties of α_2 -Ti₃Al phase by first-principles calculations. *Journal of Wuhan University of Technology- Materials Science Edition*, 32(4), 944-950.
75. Ponchel, A., Hug, G., and Jaouen, M. (2001). Study of the local atomic strain field in a Zr-doped TiAl intermetallic alloy by EXAFS and ab initio FLAPW calculations. *Ultramicroscopy*, 86(3-4), 265-272.
76. Pathak, A. (2019). A first principles calculation of site occupancy of the B2 phase in Ti₂AlX (X= V, Cr, Fe, Mo, Ta, Nb, Zr, Hf and Re) intermetallics. *Chinese Journal of Physics*, 60, 339-344.
77. Muellauer, J., Oehring, M., and Appel, F. (2007). Effects of Hf on the microstructure and mechanical properties of TiAl base alloys. *Materials Science Forum*, 539, 1501-1506.
78. Imayev, V. M., Ganeev, A. A., Trofimov, D. M., Parkhimovich, N. J., and Imayev, R. M. (2021). Effect of Nb, Zr and Zr+ Hf on the microstructure and mechanical properties of β -solidifying γ -TiAl alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 817, 141388.
79. Xu, R., Li, M., and Zhao, Y. (2022). A review of microstructure control and mechanical performance optimization of γ -TiAl alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 932, 167611.
80. Fermi, E. (1927). Statistical method to determine some properties of atoms. *Zeitschrift für Physik*, 6(602-607), 5.
81. Fermi, E. (1928). Eine statistische methode zur bestimmung einiger eigenschaften des atoms und ihre anwendung auf die theorie des periodischen systems der elemente. *Zeitschrift für Physik*, 48(1-2), 73-79.
82. Hohenberg, P., and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136, 864-871.

83. Kohn, W., and Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133.
84. Jones, R. O., and Gunnarsson, O. (1989). The density functional formalism, its applications and prospects. *Reviews of Modern Physics*, 61(3), 689.
85. Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical review A*, 38(6), 3098.
86. Bellaiche, L., and Vanderbilt, D. (2000). Virtual crystal approximation revisited: Application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites. *Physical Review B*, 61(12), 7877.
87. Li, W., Yin, Y., Xu, Q., Zhou, J., Nan, H., Ji, X., Shen, X., Feng, X., Yu, W., Tu, Z. and Pang, N. (2019). Tensile behavior of γ/α_2 interface system in lamellar TiAl alloy via molecular dynamics. *Computational Materials Science*, 159, 397-402.
88. Li, W., Yin, Y., Xu, Q., Zhou, J., Nan, H., Ji, X., Shen, X., Feng, X., Yu, W., Tu, Z. and Pang, N. (2019). Tensile behavior of γ/α_2 interface system in lamellar TiAl alloy via molecular dynamics. *Computational Materials Science*, 159, 397-402.
89. Kattner, U. R. (2016). The Calphad method and its role in material and process development. *Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineracao*, 13(1), 3-15.
90. Shi, R., and Luo, A. A. (2018). Applications of CALPHAD modeling and databases in advanced lightweight metallic materials. *Calphad*, 62, 1-17.
91. Ding, X., Zhang, L., He, J., Zhang, F., Feng, X., Nan, H., Lin, J., and Kim, Y. W. (2019). As-cast microstructure characteristics dependent on solidification mode in TiAl-Nb alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 809, 151862.
92. Liu, Z. G., Chai, L. H., and Chen, Y. Y. (2010). Effect of cooling rate and Y element on the microstructure of rapidly solidified TiAl alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 504, S491-S495.
93. Schloffer, M., Iqbal, F., Gabrisch, H., Schwaighofer, E., Schimansky, F. P., Mayer, S., Stark, A., Lippmann, T., Göken, M., Pyczak, F., and Clemens, H. (2012). Microstructure development and hardness of a powder metallurgical multi phase γ -TiAl based alloy. *Intermetallics*, 22, 231-240.
94. Ma, Y., Cuiuri, D., Hoye, N., Li, H., and Pan, Z. (2015). The effect of location on the microstructure and mechanical properties of titanium aluminides produced by additive layer manufacturing using in-situ alloying and gas tungsten arc welding. *Materials Science and Engineering: A*, 631, 230-240.
95. Karimi-Sibaki, E., Kharicha, A., Wu, M., Ludwig, A., and Bohacek, J. (2020). A parametric study of the vacuum arc remelting (VAR) process: Effects of arc radius, side-arcing, and gas cooling. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 51, 222-235.

96. Güther, V., Rothe, C., Winter, S., and Clemens, H. (2010). Metallurgy, microstructure and properties of intermetallic TiAl ingots. *Berg-und Hüttenmännische Monatshefte*, 7(155), 325-329.
97. Schafföner, S., Aneziris, C. G., Berek, H., Hubáľková, J., Rotmann, B., and Friedrich, B. (2015). Corrosion behavior of calcium zirconate refractories in contact with titanium aluminide melts. *Journal of the European Ceramic Society*, 35(3), 1097-1106.
98. Sakamoto, K., Yoshikawa, K., Kusamichi, T., and Onoye, T. (1992). Changes in oxygen contents of titanium aluminides by vacuum induction, cold crucible induction and electron beam melting. *Materials and Design*, 186, 108295.
99. Fashu, S., Lototsky, M., Davids, M. W., Pickering, L., Linkov, V., Tai, S., Renheng, T., Fangming, X., Fursikov, P. V., and Tarasov, B. P. (2020). A review on crucibles for induction melting of titanium alloys. *Materials & Design*, 186, 108295.
100. Zou, C., Li, J., Zhu, L., Zhang, Y., Yao, G., Tang, B., Wang, J., Kou, H., Song, H., and Wang, W. Y. (2021). Electronic structures and properties of TiAl/Ti₂AlNb heterogeneous interfaces: A comprehensive first-principles study. *Intermetallics*, 133, 107173.
101. Voisin, T., Monchoux, J. P., Clemens, H., and Couret, A. (2012). First investigations on a TNM TiAl alloy processed by spark plasma sintering. *Materials Research Society Online Proceedings Library*, 1516, 17-22.
102. Froes, F. H., Mashl, S. J., Hebeisen, J. C., Moxson, V. S., and Duz, V. A. (2004). The technologies of titanium powder metallurgy. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS)*, 56, 46-48.
103. Salvadori, A., Lee, S., Gillman, A., Matouš, K., Shuck, C., Mukasyan, A., Beason, M. T., Gunduz, I. E., and Son, S. F. (2017). Numerical and experimental analysis of the Young's modulus of cold compacted powder materials. *Mechanics of Materials*, 112, 56-70.
104. Martins, D., Grumbach, F., Simoulin, A., Sallot, P., Mocellin, K., Bellet, M., and Estournès, C. (2018). Spark plasma sintering of a commercial TiAl 48-2-2 powder: Densification and creep analysis. *Materials Science and Engineering: A*, 711, 313-316.
105. Muley, A. V., Aravindan, S., and Singh, I. P. (2015). Nano and hybrid aluminum based metal matrix composites: an overview. *Manufacturing Review*, 2, 15.
106. Terauchi, S., Teraoka, T., Shinkuma, T., Sugimoto, T., and Ahida, Y. (2001). *Development of production technology by metallic powder injection molding for TiAl-Type intermetallic compound with high efficiency*. In 15th International Plansee Seminar, G. Kneringer, P. Rödhammer and H. Wildner, (Eds.), Plansee Hoildgin AG, Reutle, 610-624.
107. Appel, F. (2012). *Phase transformations and recrystallization processes during synthesis*. In Processing and Service of TiAl Alloys, Intech Open Science, Croatia, 225-266.

108. Duarte, L. I., Ramos, A. S., Vieira, M. F., Viana, F., Vieira, M. T., & Koçak, M. (2006). Solid-state diffusion bonding of gamma-TiAl alloys using Ti/Al thin films as interlayers. *Intermetallics*, 14(10-11), 1151-1156.
109. Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865.
110. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 41(11), 7892.
111. Rappe, A. M., Rabe, K. M., Kaxiras, E., and Joannopoulos, J. D. (1991). Erratum: Optimized pseudopotentials [phys. rev. b 41, 1227 (1990)]. *Physical Review B*, 44(23), 13175.
112. Monkhorst, H. J., and Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13(12), 5188.
113. Jian, Y., Huang, Z., Xing, J., Sun, L., Liu, Y., and Gao, P. (2019). Phase stability, mechanical properties and electronic structures of TiAl binary compounds by first principles calculations. *Materials Chemistry and Physics*, 221, 311-321.
114. Desai, P. D. (1987). Thermodynamic properties of selected binary aluminum alloy systems. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 16, 109–124.
115. Aguilar, C., Martin, P., Pio, E., Salvo, C., and Neves, G. O. (2021). Materials analysis applying thermodynamic (MAAT) software: A friendly and free tool to analyze the formation of solid solutions, amorphous phases and intermetallic compounds. *Computer Physics Communications*, 259, 107573.
116. Wang, J., Shang, S. L., Wang, Y., Mei, Z. G., Liang, Y. F., Du, Y., and Liu, Z. K. (2011). First-principles calculations of binary Al compounds: Enthalpies of formation and elastic properties. *Calphad*, 35(4), 562-573.
117. Born, M., Huang, K., and Lax, M. (1955). Dynamical theory of crystal lattices. *American Journal of Physics*, 23(7), 474-474.
118. Patil, S. K. R., Khare, S. V., Tuttle, B. R., Bording, J. K., and Kodambaka, S. (2006). Mechanical stability of possible structures of PtN investigated using first-principles calculations. *Physical Review B*, 73(10), 104118.
119. Robertson, J. H. (1985). Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices by J. F. Nye. *Acta Crystallographica Section A*, 41, 624.
120. Wu, Z. J., Zhao, E. J., Xiang, H. P., Hao, X. F., Liu, X. J., and Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard Ir N₂ and Ir N₃ from first principles. *Physical Review B*, 76(5), 054115.
121. Li, Y., Gao, Y., Xiao, B., Min, T., Fan, Z., Ma, S., and Xu, L. (2010). Theoretical study on the stability, elasticity, hardness and electronic structures of W–C binary compounds. *Journal of Alloys and Compounds*, 502(1), 28-37.

122. Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843.
123. Mermer, E., Çinici, H., Uğur, G. and Ünal, R (2022). Structural, elastic and mechanical properties of Hf-doped TiAl₂ and α -TiAl₃ intermetallic compounds: first-principle calculations. *The European Physical Journal B*, 95(5), 83.
124. Miedema, A. R., De Chatel, P. F., and De Boer, F. R. (1980). Cohesion in alloys—fundamentals of a semi-empirical model. *Physica B+ C*, 100(1), 1-28.
125. Bakker, H., Zhou, G. F., and Yang, H. (1995). Mechanically driven disorder and phase transformations in alloys. *Progress in Materials Science*, 39(3), 159-241.
126. Nakamura, M., and Kimura, K. (1991). Elastic constants of TiAl₃ and ZrAl₃ single crystals. *Journal of Materials Science*, 26, 2208-2214.
127. Zhao, Y., Qi, L., Jin, Y., Wang, K., Tian, J., and Han, P. (2015). The structural, elastic, electronic properties and Debye temperature of D022-Ni₃V under pressure from first-principles. *Journal of Alloys and Compounds*, 647, 1104-1110.
128. Tanaka, K. (1996). Single-crystal elastic constants of gamma-TiAl. *Philosophical Magazine Letters*, 73(2), 71-78.
129. Chu, F., Mitchell, T. E., Majumdar, B., Miracle, D., Nandy, T. K., and Banerjee, D. (1997). Elastic properties of the O phase in Ti-Al-Nb alloys. *Intermetallics*, 5(2), 147-156.
130. Tschoegl, N. W., Knauss, W. G., and Emri, I. (2002). Poisson's ratio in linear viscoelasticity—a critical review. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 6, 3-51.
131. Kube, C. M. (2016). Elastic anisotropy of crystals. *American Institute of Physics Advances*, 6(9), 095209.
132. Liao, M., Liu, Y., Min, L., Lai, Z., Han, T., Yang, D., and Zhu, J. (2018). Alloying effect on phase stability, elastic and thermodynamic properties of Nb-Ti-V-Zr high entropy alloy. *Intermetallics*, 101, 152-164.
133. Sun, Z., Music, D., Ahuja, R., and Schneider, J. M. (2005). Theoretical investigation of the bonding and elastic properties of nanolayered ternary nitrides. *Physical Review B*, 71(19), 193402.
134. Güler, E., Güler, M., Uğur, G. and Uğur, Ş. (2021). A first-principles study for the elastic and mechanical properties of Ti₆₄, Ti₆₂42 and Ti₆₂46 alloys. *The European Physical Journal B*, 94(11), 222.
135. Güler, E., Uğur, Ş., Güler, M. and Uğur, G. (2022). Exploring the elastic, mechanical and anisotropic response of Ti-5Al-XSn alloys through DFT calculations. *Chinese Journal of Physics*, 77, 151-160.

136. Naher, M. I., and Naqib, S. H. (2021). An ab-initio study on structural, elastic, electronic, bonding, thermal, and optical properties of topological Weyl semimetal TaX (X= P, As). *Scientific Reports*, 11(1), 1-21.
137. Hadi, M. A., Rayhan, M. A., Naqib, S. H., Chroneos, A., & Islam, A. K. M. A. (2019). Structural, elastic, thermal and lattice dynamic properties of new 321 MAX phases. *Computational Materials Science*, 170, 109144.
138. Hadi, M. A., Islam, M. N., and Babu, M. H. (2018). Cubic perovskite Pb (Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O₃: a damage tolerant, machinable, and thermal barrier coating material. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 74(1), 71-81.
139. Mermer, E., Çinici, H., Uğur, G., & Ünal, R. (2022). An ab initio study on phase stability, elastic and mechanical properties of Zr-doped TiAl₂ and α -TiAl₃ intermetallics. *Europhysics Letters*, 140(3), 36004.
140. Kim, Y. K., Kim, H. K., Jung, W. S., and Lee, B. J. (2016). Atomistic modeling of the Ti–Al binary system. *Computational Materials Science*, 119, 1-8.
141. Villars, P., and Calvert, L. D. (1986). Pearson's handbook of crystallographic data for intermediate phases. *Materials Research Society Bulletin*, 4-5.
142. Ouadah, O., Merad, G., and Abdelkader, H. S. (2021). Atomistic modelling of the γ -TiAl/ α 2-Ti3Al interfacial properties affected by solutes. *Materials Chemistry and Physics*, 257, 123434.
143. Chen, R. R., Zhao, X. Y., Yong, Y. A. N. G., Guo, J. J., Ding, H. S., Su, Y. Q., and Fu, H. Z. (2018). Effect of Zr on microstructure and mechanical properties of binary TiAl alloys. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 28(9), 1724-1734.
144. Silverston, D. A., Siday, R. E., Silverston, D. A., Frank, F. C., and Stroh, A. N. (1952). Related content. *The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate*, 2, 349.
145. Ouadah, O., Merad, G., and Abdelkader, H. S. (2021). Effect of co-alloying elements on the structural stability, elastic, ductility and thermodynamic properties of TiAl intermetallic compound. *Solid State Communications*, 337, 114438.
146. Chen, H., Li, X., Chen, Z., Zhang, R., Ma, X., Zheng, F., Ma, Z., Pan, F. and Lin, X. (2019). Investigation on electronic structures and mechanical properties of Nb–doped TiAl₂ intermetallic compound. *Journal of Alloys and Compounds*, 780, 41-48.
147. Pang, X., Chen, X., Yang, J., Pang, M., Yang, W., and Zhan, Y. (2019). Influence of Nb concentration on the structure, stability, and electronic and mechanical properties of D022 Al₃Ti by first-principles calculations and experiments. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 131, 243-253.
148. Jiang, C. (2008). First-principles study of site occupancy of dilute 3d, 4d and 5d transition metal solutes in L10 TiAl. *Acta Materialia*, 56(20), 6224-6231.
149. Brotzu, A., Felli, F., and Pilone, D. (2014). Effect of alloying elements on the behaviour of TiAl-based alloys. *Intermetallics*, 54, 176-180.

150. Palm, M., Zhang, L. C., Stein, F., & Sauthoff, G. (2002). Phases and phase equilibria in the Al-rich part of the Al–Ti system above 900 C. *Intermetallics*, 10(6), 523-540.
151. Braun, J., and Ellner, M. (2001). Phase equilibria investigations on the aluminum-rich part of the binary system Ti–Al. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32, 1037-1047.
152. Školáková, A., Pinc, J., and Novák, P. (2022). The preferential formation of Ni_2Al_3 , Fe_2Al_5 , and Ti_2Al_5 phases in aluminide systems. *Materials Chemistry and Physics*, 280, 125859.
153. Zhang, L. C., Palm, M., Stein, F., and Sauthoff, G. (2001). Formation of lamellar microstructures in Al-rich TiAl alloys between 900 and 1100 C. *Intermetallics*, 9(3), 229-238.
154. Qu, S. J., Tang, S. Q., Feng, A. H., Feng, C., Shen, J., and Chen, D. L. (2018). Microstructural evolution and high-temperature oxidation mechanisms of a titanium aluminide based alloy. *Acta Materialia*, 148, 300-310.
155. Pan, Y., Lu, X., Hayat, M. D., Yang, F., Liu, C., Li, Y., Li, X., Xu, W., Qu, X. and Cao, P. (2020). Effect of Sn addition on the high-temperature oxidation behavior of high Nb-containing TiAl alloys. *Corrosion Science*, 166, 108449.



Gazili olmak ayrıcalıktır