

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI TƏHSİL NAZİRLİYİ
AZƏRBAYCAN TEXNİKİ UNİVERSİTETİ
YÜKSƏK TƏHSİL İNSTİTUTU

Əlyazması hüququnda

Əlizadə Murad Süleyman oğlu

YÜKSƏK TEMPERATUR VƏ STRUKTUR TƏTBİQLƏRİ ÜÇÜN Ti-Al
ƏSASLI ÇOX KOMPONENTLİ İNTERMETALLARIN MODELLENMƏSİ,
DİZAYNI, SİNTEZİ VƏ XARAKTERİZƏ EDİLMƏSİ

mövzusunda

MAGİSTRİK DİSSERTASİYASI

İxtisas: Materialşünaslıq mühəndisliyi

İxtisaslaşma: 060601 – Materialşünaslıq və Materiallar texnologiyası

Elmi rəhbər: Prof. Dr. Əmdulla Mehrabov

BAKI-2024

AZƏRBAYCAN TEXNİKİ UNİVERSİTETİ
YÜKSƏK TƏHSİL İNSTİTUTU
MAGİSTRANTIN ANDI

“Yüksək temperatur və struktur tətbiqləri üçün Ti-Al əsaslı çoxkomponentli intermetalların modellənməsi,dizaynı,sintezi və xarakterizə edilməsi” mövzusunda təqdim etdiyim magistrlik dissertasiyasını elmi əxlaq normalarına və istinad qaydalarına tam riayət etməklə və istifadə etdiyim bütün mənbələri ədəbiyyat siyahısında əks etdirməklə yazdığımı and içirəm və magistrlik dissertasiyasının AzTU Kitabxana İnformasiya Mərkəzində saxlanması, həmin mərkəz tərəfindən AzTU Rəqəmsal Repozitoriyasına daxil edilərək repozitoriyanın veb saytında yerləşdirilməsinə icazə verirəm.

Əlizadə Murad Süleyman oğlu _____

Tarix:

XÜLASƏ

$Ti_{50}Al_{50-x}M_x$ ($x = 1$ at. %) intermetallarda müxtəlif M aşqar element atomlarının nizamlanma proseslərinin enerji, struktur xarakteristikaları və psevdo-klasterləşmə davranışları Monte Karlo simulyasiyası üsulu təhlil edilmişdir.

Atom nizamlanma enerjiləri psevdopotensial yaxınlaşmada elektron nəzəriyyə ilə üçüncü koordinasiya sferasına (KS) qədər γ -TiAl intermetallın anizotrop olan tetraqonal $L1_0$ tipli strukturu nəzərə alınaraq hesablanmışdır.

Hesablamaların nəticələri göstərir ki aşqar elementlərinin (M) kristal qəfəs düyün nöqtələrinə yerləşmə xüsusiyyətləri Ti-M və Al-M atom cütləri arasında nizamlanma enerjilərinin nisbi böyüklüyündən asılıdır.

M aşqar elementlərin psevdo-klaster davranışı üçün üç fərqli həll olunma rejimlərinin əmələ gəlməsi ehtimalının olduğu gösdərilmişdir: nizamsız həll olma (mod I), iki ölçüdə planar klasterləşmə (rejim II) və atomların üçölçülü (3-D) qruplaşması (rejim III).

Modelləmə və simulasya əsasında yerinə yetirilmiş nəzəri hesablamaların nəticələrinin ədəbiyyatda verilən experimental tədqiqatlarla uyğunluq gösdərdiyi isbat edilmişdir.

Açar sözlər: İntermetal birləşmələr, $Ti_{50}Al_{50-x}M_x$, Nizamlı strukturlar, Yaxın-məsafəli düzən, Modelləmə və simulasya

SUMMARY

Energetic, structural characteristics and pseudo-clustering behaviors of the ordering processes of various M alloying element atoms in $\text{Ti}_{50}\text{Al}_{50-x}\text{M}_x$ ($x = 1$ at. %) intermetallics were analyzed by the Monte Carlo simulation method.

The atomic ordering energies were calculated up to the third coordination sphere (CS) by electronic theory of multicomponent alloys in the pseudopotential approximation, taking into account the anisotropic nature of tetragonal L1_0 -type structure.

The results of the calculations show that the site occupancy characteristics (SRO) of alloying elements (M) at the sites of the crystal lattice depend on the relative magnitude of the ordering energies between Ti-M and Al-M atomic pairs.

It is shown that three distinct dissolution regimes are likely to occur for the pseudo-cluster behavior of M additives: disordered dissolution (mode I), planar clustering in two dimensions (mode II), and three-dimensional (3-D) clustering of atoms (mode III).

It has been proven that the results of the theoretical calculations performed on the basis of modeling and simulation are consistent with the experimental studies given in the literature.

Keywords: Intermetallic compounds, $\text{Ti}_{50}\text{Al}_{50-x}\text{M}_x$, Ordered structures, Short-range order, Modeling and simulation

İXTİSARLAR VƏ İŞARƏLƏR

UMN	- Uzaq məsafəli düzən
QMN	- Qısa məsafəli düzən
MK	- Monte Karlo
SHS	- Öz-özünə yayılan yüksək temperatur sintezi
VCS	- Həcmli yanma sintezi
TNM	- TiAl–Nb–Mo
RHIP	- Reaktiv isti izostatik presləmə

MÜNDƏRİCAT

<u>GİRİŞ</u>	8
<u>FƏSİL I. Ti-Al əsaslı intermetallidlər, TiAl, Ti₃Al və TiAl₃</u>	11
1.1 İntermetallid birləşmələr	11
1.2 Titan alüminidlər	14
1.3 TiAl intermetalın xassələri.....	17
1.4 Ti ₃ Al intermetalın xassələri.....	18
1.5 TiAl ₃ intermetalın xassələri.....	19
<u>FƏSİL II. Ti-Al-X əsaslı intermetallidlər</u>	21
2.1 Titan Alüminidlərin xassələrinə aşqar elementlərin əlavəsinin təsiri.....	21
<u>FƏSİL III. Ti-Al əsaslı intermetallidlərin nəzəri metodlarla dizaynı</u>	24
3.1 Ti-Al ərinti sistemi.....	24
3.2 Ti-Al-X ərintilərində atom nizamlanma enerjilərinin hesablanması.....	25
3.3 Ti-Al-X ərintilərində atomların nizamlanma proseslərinin Monte Karlo metodu ilə kompyuter simulyaları.....	29
3.4 Ti-Al-X ərintilərində X aşqar element atomlarının kristal qəfəs düyün nöqtələrinə yerləşmə xüsusiyyətləri.....	30
3.5 Ti-Al-X ərintilərində X aşqar element atomlarının klasterləşmə davranışları	32
<u>FƏSİL IV. Ti-Al əsaslı intermetallidlərin experimental metodlarla tədqiqi</u>	35
4.1 Ti-Al əsaslı intermetallidlərin sintez metodları.....	35
4.2 Ti-Al əsaslı intermetallidlərin fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələri.....	39
4.3 Ti-Al əsaslı intermetallidlərin tətbiq sahələri.....	48
Nəticələr və Təkliflər	49
İstifadə olunan ədəbiyyatların siyahısı	50

GİRİŞ

Mövzunun aktuallığı: Son illərdə intermetal birləşmələr yüksək temperatur və həssas/ekstremal mühütlərdə mühəndislik və struktur tətbiqləri üçün potensial materiallar kimi qəbul edilməkdədirlər. Aluminit əsaslı intermetallar nadir material xassələri və davranışları ilə struktur keramika materialları ilə ikincil bir fazla gücləndirilmiş bərk məhlullar arasında yerini tutan yeni sinif mühəndislik materialları hesab edilirlər. Ti-Al əsaslı intermetal ərintilər üzrə tədqiqatlar 1950-ci illərə aiddir və bundan sonra da davam etmişdir. Son illərdə yüksək temperatur xüsusiyyətlərinin inkişafı ilə γ -TiAl əsaslı ərintilər üçün təyyarə, avtomobil və elektrik istehsalı kimi yüksək texnologiyalı müxtəlif potensial sahələr aşkar edilmişdir. Bununla belə, Ti-Al əsaslı çox komponentli intermetalların fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələri idarə etmək üçün, atom sərhədi/səth enerjiləri, mikrostruktur xüsusiyyətləri, faza sabitliyi və faza ayrılması kimi mövzuların tədqiqi həm materiallar fizikasının, həm də materialşünaslıq elm və mühəndisliyinin ən aktual mövzuları hesab olunmaqdadır.

Tədqiqatın məqsədi və vəzifələri: İkili Ti-Al və çoxkomponentli Ti-Al-X-Y ərinti sistemlərində əmələ gələn (və ya formalaşacaq) nizamlı fazaların temperatur və tərkibə görə sabitlik diapazonlarının, nizam-nizam və nizam-nizamsızlıq faza çevrilmələrin xarakteristik xüsusiyyətlərinin və struktur-xassə əlaqələrinin müəyyən edilməsi üçün muasir nəzəri və experimental metodlarla tədqiqi və xarakteristikasına yönəldilmişdir.

Tədqiqatın predmeti və obyektı: Aluminitlərin unikal fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələri bu materiallarda baş verən müxtəlif uzun məsafəli nizamlı super qəfəslər (UMN), qısa məsafəli nizamlı strukturlar (QMN), nizam-nizam və nizam-nizamsızlıq faza çevrilmələrin səbəbinə görə yaranır. Buna görə də məlum olur ki, alüminidlərin struktur xassələri ərinti stexiometriyasından və əlavə edilən ərinti elementinin növündən asılı olaraq dəyişir.

Atom nöqtəyi-nəzərindən fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələrin inkişafı, ümumiyyətlə, normal kristal super qəfəsin mikronaltı həcmində ərinti elementi atomlarının paylanması, başqa sözlə, geniş temperatur diapazonlarında alüminidlərdə UMN və QMN yaranmasının enerji və struktur xüsusiyyətlərindən

asılıdır. Mövzu ilə əlaqəli müasir ədəbiyyatın analizi Ti-Al-X əsaslı ikili və üçlü intermetal ərintilərin uzun məsafəli nizamlı super qəfəs (UMN) və qısa məsafəli nizamlı struktur (QMN) xüsusiyyətləri, əlavə edilən X ərinti elementinin növü və miqdarından asılı olaraq dəyişdiyini gösdərir. Ti-Al-X intermetallarda ikili sistemə əlavə edilərək onların xassələrini yaxşılaşdıracaq ən uyğun X elementlərinin müəyyən edilməsi ən vacib məsələdir. Bunun üçün əvvəlcə kompyuter dəstəklili modelləmə və simulasya işləri yerinə yetirilərək bu elementlər müəyyən edilmişdir.

Elmi yeniliyin elementləri: Dissertasiya işində həm ikili, həm də çoxkomponentli ərintilərin statistik-mexaniki və statistik-termodinamik nəzəriyyələri ərintilərin elektron nəzəriyyəsinin psevdopotensial yanaşması ilə birləşdirilərək inkişaf etdirilmiş yeni metodlardan istifadə edilməklə modelləşdirmə və kompüter simulyasiyaları aparılmışdır. Kompüter simulyasiyaları üçün Monte-Karlo metodunun müxtəlif versiyalarından istifadə edilmişdir.

İşin Təcrübi əhəmiyyəti: Modelləmə və simulasya əsasında yerinə yetirilmiş nəzəri hesablamaların nəticələrinin Ti-47Al-3Cr-3Nb intermetal ərintisi üçün aparılmış experimental tədqiqatlarla uyğunluq gösdərdiyi görülmüşdür.

İşin həcmi: Dissertasiya işi girişdən, 4 bölmədən, nəticə, istifadə olunmuş ədəbiyyat siyahısından və əlavədən ibarətdir.

Müdafiə üçün təqdim edilən nəticələr: $Ti_{50}Al_{50-x}M_x$ ($x = 1$ at. %) intermetallarda müxtəlif M aşqar element atomlarının nizamlanma proseslərinin enerji, struktur xarakteristikaları və psevdo-klasterləşmə davranışları Monte Karlo simulyasiyası üsulu təhlil edilmişdir. Atom nizamlanma enerjiləri psevdopotensial yaxınlaşmada elektron nəzəriyyə ilə üçüncü koordinasiya sferasına (KS) qədər γ -TiAl intermetallın anizotrop olan tetraqonal $L1_0$ -tipli strukturu nəzərə alınaraq hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki aşqar elementlərinin (M) kristal qəfəs düyün nöqtələrinə yerləşmə xüsusiyyətləri Ti-M və Al-M atom cütləri arasında nizamlanma enerjilərinin nisbi böyüklüyündən asılıdır. M aşqar elementlərin psevdo-klaster davranışı üçün üç fərqli həll olunma rejimlərinin əmələ gəlməsi ehtimalının olduğu gösdərilmişdir: nizamsız həll olma (mod I), iki ölçüdə planar klasterləşmə (rejim II) və atomların üçölçülü (3-D) qruplaşması (rejim III). Modelləmə və

kompyuter hesablamaların nəticələri nəzərə alınmaqla Titan Alüminidlərinə M legirli elementlərin əlavəsinin fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələrinə təsirinin experimental olaraq yerinə yetirilmiş müxtəlif tədqiqatlarla geniş müqayisəsi aparılmışdır.

Nəticələrin aprobasiyası: verilmiş dissertasiya işinin əsas müddəaları Elmi-texniki konfransda məruzə edilmişdir.

1. Əlizadə, M (2024). Azərbaycan Texniki Universiteti Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 101- cü il dönümünə həsr olunmuş tələbə və gənc tədqiqatçıların “Mütərəqqi texnologiyalar və VIII Respublika elmi-texniki konfrans” Elmi-texniki konfrans, Bakı, 1-2 may 2024. (Sertifikatla təltif olunub).

Nəşrlər: Tədqiqatın əsas nəticələri konfrans materialında çap olunmaq üçün təqdim olunmuşdur.

FƏSİL I. TI-AL ƏSASLI INTERMETALLIDLƏR: Ti_3Al , $TiAl$ VƏ $TiAl_3$

1.1 İntermetallid birləşmələr

İntermetal birləşmələr yüksək temperaturda kimyəvi və mexaniki sabitlik tələb edən müxtəlif tətbiqlər üçün hazırlanmış materiallardır. Oksidləşdirici mühitdə və havada qızdırıldıqda intermetallar arasında alüminium tərkibli materialların, yəni alüminidlərin potensial çəki qənaətinə əlavə olaraq, onun səthində qoruyucu alüminium təbəqəsi əmələ gəlir. Bu birləşmələr yüksək ərimə nöqtəsinə, yaxşı korroziyaya davamlılığa və yüksək gücə malikdir və nisbətən aşağı sıxlıqlı materiallardır. Ən çox istifadə edilən alüminium əsaslı intermetal birləşmələr:

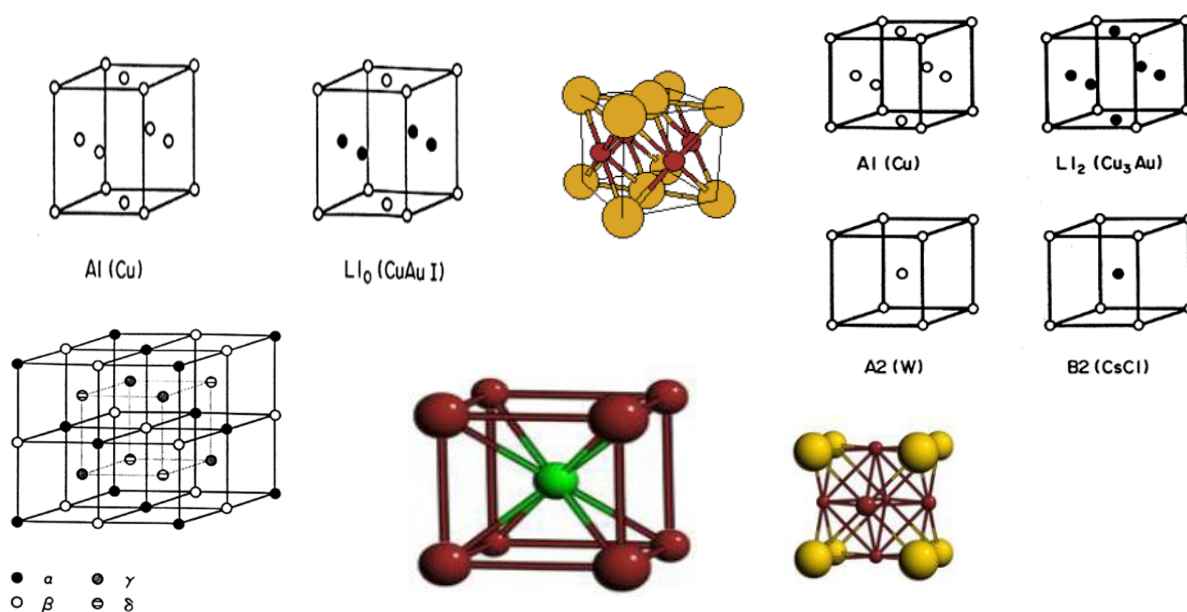
- Dəmir alüminidləri
- Nikel alüminidləri və
- Titan alüminidləridir.

Yüksək işləmə temperaturları üçün super ərintilər və ya poladlar kimi daha sıx struktur materiallarına alternativ olaraq Ni_3Al , $NiAl$, Fe_3Al , $FeAl$, Ti_3Al və $TiAl$ kimi alüminium əsaslı intermetal birləşmələr təqdim edilmişdir. Bu alüminidlərin xassələri Cədvəl 1.1-də, kristal qəfəs strukturları isə Şək.1.1-də verilmişdir. Bu tip ərintilər arasında dəmir alüminidləri həm aşağı material qiymətləri, həm də bu xüsusiyyətləri ilə diqqəti cəlb edir. (MEKHRABOV A.O., and AKDENİZ M.V)

İntermetal materialları: Alüminidlər

Alüminidlər	Kristal strukturu	Nizam-		Ərimə Temperaturu (°C)	Sıxlıq (g/cm ³)	Al miqdarı (at.%)
		nizamsızlıq faza keçid temperaturu (°C)				
FeAl	B2	1318		1330	5.56	23.3-54.9
Fe ₃ Al	D0 ₃	552		1540	6.72	23.6-34.1
NiAl	B2	1638		1638	5.86	30.9-58.2
Ni ₃ Al	L1 ₂	1390		1390	7.50	24.7-27.7
TiAl	L1 ₀	1440		1440	3.91	47.7-69.5
Ti ₃ Al	D0 ₁₉	1180		1180	4.20	22.4-38.4

Mənbə:(Erdem M. S., Akmandor S.)



Şək.1.1 Kristal qəfəs strukturları. Mənbə: (MEKHRABOV A.O. və AKDENİZ M.V)

Yüksək temperatur tətbiqləri üçün çox uyğun olan Ti-, Fe- və Ni-alüminidlər üzərində aparılan son araşdırmalarda ərinti və istehsal prosesini saxlayaraq kristal strukturlarını, mikrostruktur formasiyalarını, dənə strukturlarını və kompozisiyalarını yaxşılaşdırmaqla kövrəklik problemlərini aradan qaldırmaq üçün səylər göstərilir. proseslər nəzarət altındadır. Tərkibində kifayət qədər Al olan birləşmələrdə oksidləşdirici mühitdə səthdə yığıcam və qoruyucu alüminium oksidi (Al₂O₃) əmələ gəlir. İntermetalliklərin mexaniki xassələrinin, keramika və metallarla müqayisəsi Cədvəl 1.2-də verilmişdir.

Cədvəl 1.2

İntermetalliklərin mexaniki xassələrinin, keramika və metallarla müqayisəsi

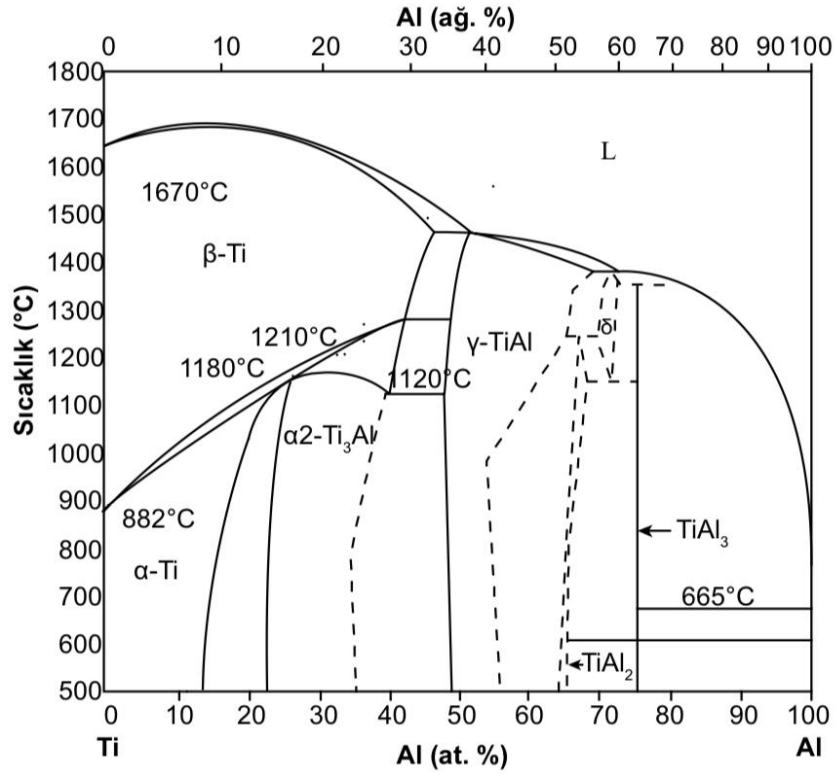
Metallar	İntermetallid birləşmələr	Keramikalar
Yüksək sıxlıq	Orta sıxlıq	Aşağı sıxlıq
Yaxşı plastiklik (Otaq temperaturunda)	Aşağı plastiklik (Otaq temperaturunda)	Plastikliyi yoxdur (Otaq temperaturunda)
Orta səviyyədə elastiklik modulu	Olduqca yüksək elastiklik modulu	Yüksək elastiklik modulu
Aşağı oksidləşmə müqaviməti (yüksək temperaturda)	Olduqca yüksək oksidləşmə müqaviməti (yüksək temperaturda)	Yüksək oksidləşmə müqaviməti (yüksək temperaturda)
Yüksək elektrik keçiriciliyi	Ümumi olaraq Yüksək elektrik keçiriciliyi	Aşağı elektrik keçiriciliyi

Olduqca aşağı müqavimət (Yüksək temperatur)	Yüksək müqavimət (Yüksək temperatur)	Çox yüksək müqavimət (Yüksək temperatur)
---	--------------------------------------	--

Mənbə: (MEKHRABOV A.O)

1.2 Titan alüminidlər

Ti-Al əsaslı intermetal ərintilər üzərində tədqiqatlar 1950-ci illərə təsadüf edir və sonrakı illərdə yüksək temperatur xüsusiyyətlərinin inkişafı ilə mümkün mühəndislik tətbiqlərində γ -TiAl ərintilərinin istifadəsi sual altına düşdü (LORIA, 2000). Bununla belə, materialşünaslığın hər bir sahəsində olduğu kimi, Ti-Al əsaslı intermetallara tətbiq olunan mühəndisliyin əsas qayğıları həmişə arzu olunan material xüsusiyyətlərini yaxşılaşdırmaq, materialın tutulacağı ətraf mühit şəraitinə müqavimətini artırmaq və ömrünü mümkün qədər uzatmaq. Bu narahatlıqları idarə etmək üçün ərintilər və bunun nəticəsində yaranan qəfəsə üstünlük vəziyyəti bu gün də mühəndislər tərəfindən intermetallıqda ən çox araşdırılan mövzular sırasındadır, çünki onlar fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələrə, sərhəd/səth enerjilərinə, mikrostruktur xüsusiyyətlərinə, faza sabitliyinə və ayrılmasına təsir göstərir (HAO et al., 2000). Bu səbəbdən, Al-zəngin, Al-yoxsul və stexiometrik γ -TiAl (Şək.1.2) ərintilərində kristal qəfəsdə ərinti elementlərinin qəfəs mövqeyi üstünlükləri həm eksperimental, həm də nəzəri cəhətdən dəfələrlə tədqiq edilmişdir (DANG et al., 2007).

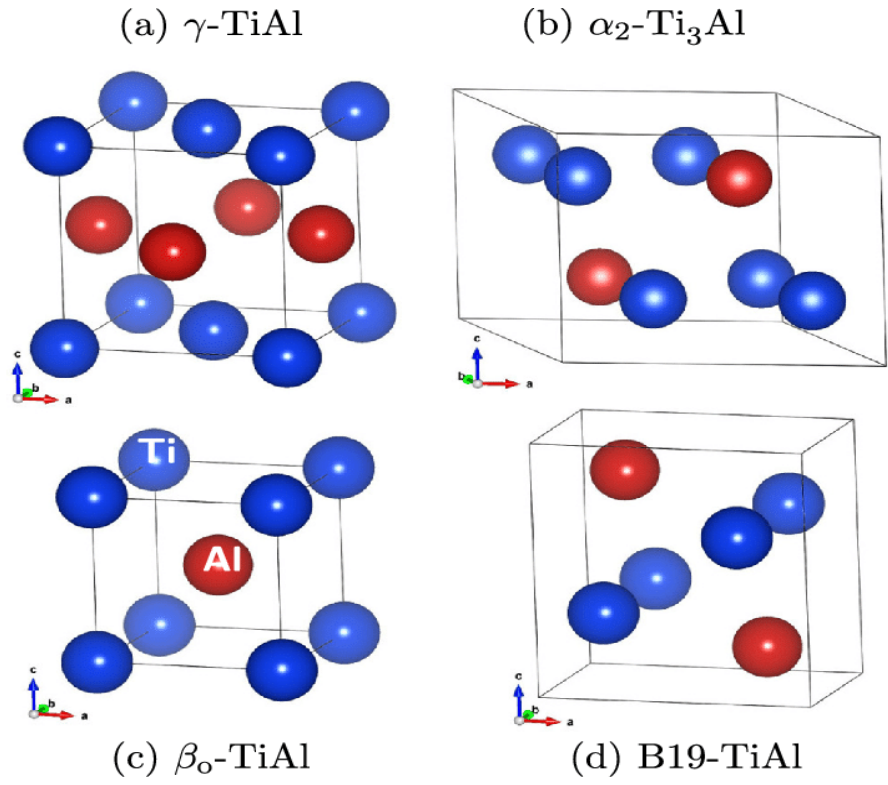


Şək.1.2 Ti-Al faz diaqramı

Mənbə: (WOODWARD, KAJIHARA, 1999)

Sirkonium, niobium və qallium kimi ərinti atomlarının $L1_0$ quruluşlu TiAl intermetalında hansı qəfəs mövqeyinə üstünlük verdiyinə dair ümumi bir fərziyyə olsa da (WOODWARD və KAJIHARA, 1999), bu günə qədər bildirilən tədqiqatlar, məsələn, xrom, manqan və vanadium element atomlarının mövqe seçimləri ilə bağlı ziddiyyətlidir məlumatlar var (WOLF et al., 1996). Titan alüminidləri kristal strukturları Şək.1.3-də, qəfəs parametrləri isə Cədvəl 1.3-də verilmişdir.

Bundan əlavə, mis, sink, gümüş, qızıl və s. γ -TiAl kimi elementlərin mövqe üstünlükləri heç vaxt öyrənilməmiş və ya adekvat şəkildə müzakirə edilməmişdir.



Şək.1.2.1 Titan alüminidləri kristal strukturları

Mənbə: (Kocaeli “Titanium Industries, INC.”)

Titan alüminid intermetalları xüsusilə yüksək möhkəmlik-çəki nisbəti və yüksək temperatur xüsusiyyətləri ilə diqqəti cəlb edir. Bununla belə, zəif qırılma möhkəmliyi, aşağı sünilik və kövrəklik kimi xüsusiyyətlərə malikdir. Alaşımli elementlərin (məsələn, B, Mn, Cr, V, Nb. və s.) əlavə edilməsi ilə birləşmələrin çeviklik dəyərləri yaxşılaşdırıldı.

Titan alüminidlərinin kristal strukturları və qəfəs parametrləri

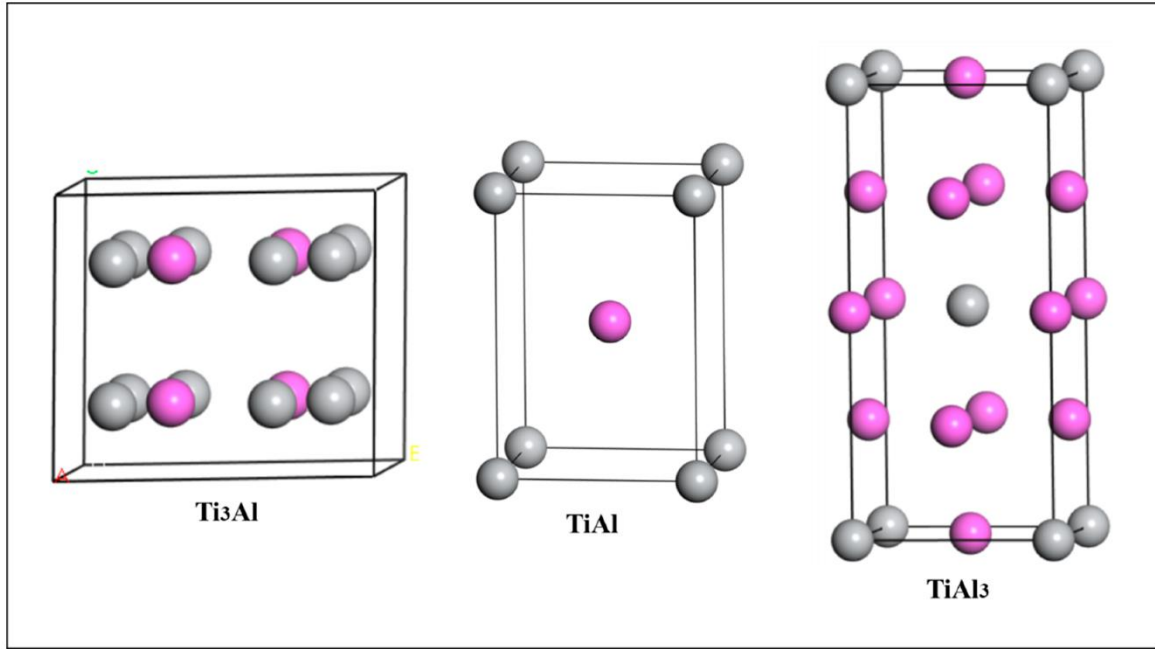
Faza	Tərkibi(al)	Pearson simvolu	Prototip	Qəfəs parametrləri
TiAl ₃ (HT)	74.5-75.0	<i>t</i> 8	TiAl ₃	$a = 0.3849$ $c = 0.8609$
TiAl ₃ (LT)	~75	<i>t</i> 32	...	$a = 0.3877$ $c = 3.3828$
Ti ₅ Al ₁₁	66-71	(a)	...	$a = 0.3953$ $c = 0.4104(b)$
TiAl ₂	66-67	<i>t</i> 24	HfGa ₂	$a = 0.3970$ $c = 2.4309$
Ti _{1-x} Al _{1+x}	63-65	<i>t</i> P4	AuCu	$a = 0.4030$ $c = 0.3955$
Ti ₃ Al ₅	62	<i>t</i> P32	Ti ₃ Al ₅	$a = 1.1293$ $c = 0.4038$
TiAl(γ)	50-62	<i>t</i> P4	AuCu	$a = 0.4000$ $c = 0.4075(c)$
Ti ₃ Al(α_2)	~20-39	<i>h</i> P8	Ni ₃ Sn	$a = 0.5782$ $c = 0.4629$

Mənbə: (WOLF et al.,1996)

1.3 TiAl intermetalın xassələri

TiAl geniş tərkib diapazonuna malikdir və ərimə nöqtəsinə qədər sabitdir. Al tərkibinin həllolma hədləri arasında dəyişməsi Ti və ya Al bölgələrində artıq Ti və ya Al atomları ilə struktur pozuntularına səbəb olur və c/a nisbəti (məsələn, tetraqonal) minimum Al tərkibi üçün 1,01 və maksimum Al tərkibi üçün 1,03 arasında dəyişir. TiAl tetraqonal L1₀ kristal quruluşuna malikdir. Şəbəkə parametrləri c və nisbət (c/a) 1,015-dir. 3,76 qr/sm³ sıxlıq dəyəri ilə Ti əsaslı ərintilərdən və Ti₃Al birləşməsindən daha aşağı sıxlığa malikdir. Otaq temperaturunda stoxiometrik TiAl üçün Puasson nisbəti 0,23, kəsmə modulu 70 GPa, Young modulu isə 174 GPa olduğu müəyyən edilmişdir. Təxminən 500 MPa-dan 700 °C-ə qədər qırılma gücünə malikdir. TiAl ərintisinin mexaniki xassələri və korroziya davranışı Nb, Ta, Zr, W kimi ərinti elementləri ilə yaxşılaşdırıla bilər. TiAl-ın oksidləşmə müqaviməti, tərkibində daha yüksək Al tərkibinə görə Ti₃Al-dən daha yüksəkdir. Titan alüminidləri yüngüllüyi və digər fiziki, kimyəvi və mexaniki

xüsusiyyətləri ilə kosmik sənayedə struktur materialları kimi istifadə edilə bilən ideal strukturlardır.



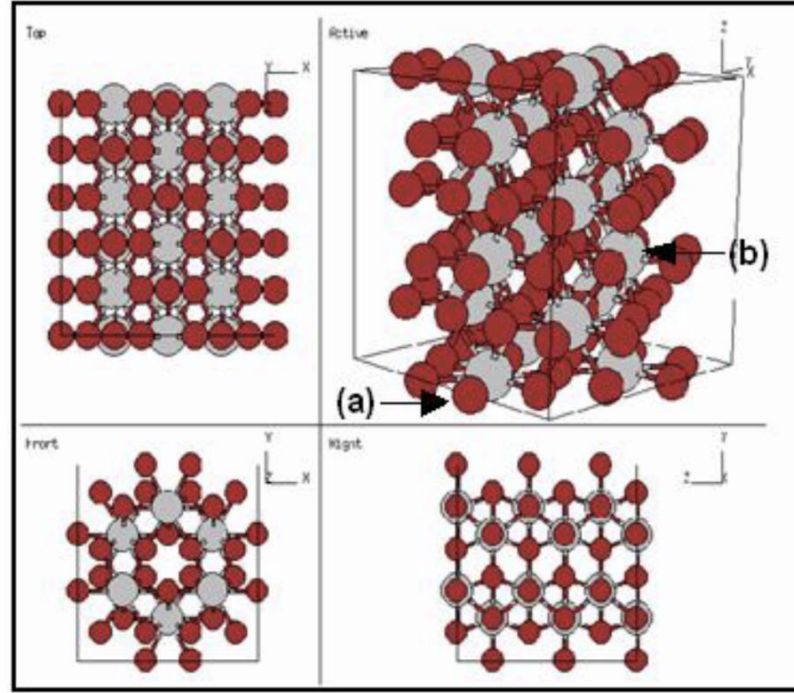
Şək.1.3 Ti-Al əsaslı intermetalların kristal qəfəs strukturları

Mənbə: (Pototzky P., Mailer H.J., Christ H.J.)

1.4 Ti₃Al intermetalın xassələri

Ti₃Al intermetalı D0₁₉ müntəzəm altıbucaqlı kristal quruluşa malikdir (Şək.1.4) və onun qəfəs parametrləri c və a nisbəti (c/a) 0,8-dir. Sıxlıq üçün ümumi qəbul edilən dəyər 4,2 q/sm³ təşkil edir. Otaq temperaturunda 26 % Al tərkibli Ti₃Al üçün Puasson nisbəti 0,29, Young modulu 149 GPa, kəsmə modulu 58 GPa olduğu müəyyən edilmişdir. Ti_pAl əsaslı ərintilər üçün Young modulu 100-145 Gpa, Ti əsaslı adi ərintilər üçün isə bu dəyər 96-110 GPa arasındadır. Ti₃Al birləşmələri aşağı sıxlıq və yüksək temperatur xüsusiyyətləri ilə diqqəti cəlb edir. Bununla belə, 600 °C-dən aşağı temperaturda praktiki olaraq heç bir deformasiya qabiliyyəti olmayan kövrək bir xarakterə malikdir. Yüksək temperaturda deformasiya qabiliyyəti artır. Qırılma gücü 600 °C-dən yuxarı təxminən 600 MPa-dır. Termal yumşalma yüksək temperaturda baş

verir, nəticədə mümkün plastik deformasiyadan sonra sınıq gücündən aşağı axma gücü olur. Ti_3Al əsaslı intermetaliklərin çeviklik və möhkəmlik xassələri mikro quruluşa nəzarət və əlavə ərinti elementlərinin əlavə edilməsi ilə yaxşılaşdırılır.



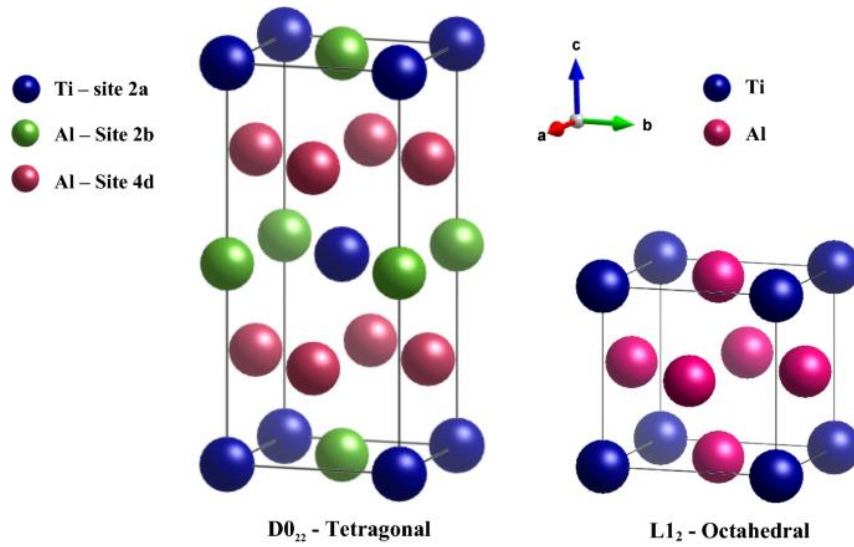
Şək.1.4 Ti_3Al alüminidlərinin kristal quruluşu (a) Ti, (b) Al

Mənbə: (Sciubba E, Menna L)

1.5 $TiAl_3$ intermetalın xassələri

$TiAl_3$ intermetalında $D0_{19}$ tetragonal və $L1_2$ oktahedral kristal strukturlarının olduğu görülmüşdür (Şək.1.5). Ti-Al intermetalikləri arasında $3,3 \text{ q/sm}^3$ sıxlığı olan $TiAl_3$ ən aşağı sıxlığı təqdim edir və eyni zamanda ən yaxşı korroziya müqaviməti ilə ən yüksək sərtliyə malikdir. Bununla belə, onların tətbiqi aşağı çeviklik ilə kəskin şəkildə məhdudlaşdırılır. Yeri gəlmişkən, onların elastikliyinə artırmaq üçün bir çox

sərtləşdirmə üsulları təklif edilmişdir və ən uğurlu strategiyalardan biri Al ilə kompozitin istehsalıdır.



Şək.1.5 TiAl₃ alüminidlərinin kristal quruluşu

Mənbə: (Clemens H, Mayer S.)

FƏSİL II. Ti-Al-X əsaslı intermetallidlər

2.1 Titan Alüminidlərin xassələrinə aşqar elementlərin əlavəsinin təsiri

Təyyarə və avtomobil sənayesindəki ən maraqlı problemlərdən biri yüksək gərginliklərə və temperaturalara tab gətirə bilən aşağı sıxlığı ilə xarakterizə olunan materialları tapmaqdır. Bu səbəbdən son onilliklər ərzində TiAl intermetal ərintiləri üzərində çoxlu tədqiqatlar aparılmışdır ki, onlar strukturları sayəsində yaxşı mexaniki xassələrə malikdirlər və düzgün şəkildə seçildikdə yüksək oksidləşmə müqavimətinə malikdirlər. Təəssüf ki, bu ərintilərin nizamlı quruluşu onları kövrək və emal etmək çətinləşdirir. Bu problemi aradan qaldırmaq üçün, dartılma xüsusiyyətləri və qırılma möhkəmliyi arasında ən yaxşı kompromis əldə etməyə imkan verən ən yaxşı ərinti tərkibinin və müalicəsinin seçilməsi üçün çoxlu səylər sərf edilmişdir. Mexaniki xassələr ərinti elementlərinin əlavə edilməsi, istilik müalicəsi və istiqamətli bərkimə üsulları ilə təkmilləşdirilmişdir. Bu ərintilərin mexaniki xassələrinin yaxşılaşdırılması β -bərkləşdirici adlanan ərintilərdən istifadə etməklə əldə edilmişdir ki, onlar asanlıqla qızdırılan və ümumiyyətlə, termomexaniki müalicələrlə işləyə bilirlər.

Turbin komponentlərinin istehsalı üçün ekstruziya və döymə üsulundan istifadə edilmişdir, lakin bu proses həqiqətən bahalıdır. Turbin qanadlarının istehsalı üçün istifadə edilən başqa bir proses daha aşağı texnoloji xərcləri ilə xarakterizə oluna bilən toz texnologiyasıdır. Ümumiyyətlə, istehsal prosesindən asılı olmayaraq, dupleks mikrostruktur daha yüksək möhkəmlik ilə xarakterizə olunur, tam lamelli mikrostruktur isə daha yüksək qırılma möhkəmliyi ilə birlikdə çatların yayılmasına və yorğunluğa daha yüksək müqavimət göstərir. (MEKHRABOV A.O.)

γ -TiAl əsaslı ərintilər ərintinin tərkibindən, bərkimə yolundan, soyutma sürətindən və seçilmiş istilik müalicəsi dövründən asılı olaraq bir neçə mikro struktur yaradır. Adı γ -TiAl əsaslı ərintilər hər biri fərqli mexaniki davranış göstərən beş müxtəlif mikrostruktura ilə xarakterizə edilə bilər. TiAl–Nb–Mo (TNM) ərintiləri kimi Al və Nb-nin mövcudluğuna görə 800°C-ə qədər yaxşı oksidləşmə müqaviməti nümayiş etdirən β -bərkləşdirici ərintilər tərəfindən əhəmiyyətli potensial göstərilmişdir.

Titan alüminidləri yüksək temperaturda qoruyucu Al_2O_3 deyil, TiO_2 əmələ gətirmə meyli ilə xarakterizə olunur. Bu tendensiya alüminidlərin maksimal istifadə temperaturunda oksidləşmə müqavimətini artırır və yüksək temperaturda kifayət qədər sürtünmə müqavimətini təmin edir. Bu alüminidlərin xüsusiyyətləri və onların super ərintilərlə müqayisəsi Cədvəl 2.1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2.1

Ti-alüminid ərintilərinin və super ərintilərin xüsusiyyətləri

	Geleneksel Ti alaşımları	Ti_3Al	TiAl	Nikel-esaslı süperalaşımlar
Yoğunluk, g/cm ³	4,5	4,1-4,7	3,7-3,9	8,3
Young modülü, MPa	96-100	100-145	160-176	206
Akma mukavemeti, MPa	380-1150	700-990	400-650	...
Çekme mukavemeti, MPa	480-1200	800-1140	450-800	...
Sürünmə limiti, °C	600	760	1000	1090
Oksidasyon limiti, °C	600	650	900	1090
Oda sıcaklığında süneklik, %	20	2-10	1-4	3-5
Yüksek sıcaklıkta süneklik, %	Yüksek	10-20	10-60	10-20
Kristal Yapı	HSP/HMK	DO_{19}	$L1_0$	YMK/ L_2

Mənbə:(MEKHRABOV A.O.)

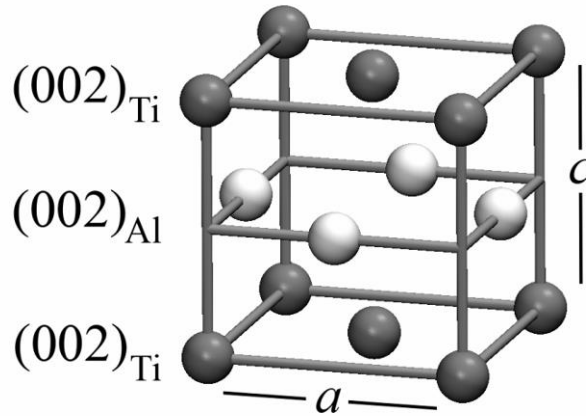
TiAl korroziya davranışını və mexaniki xassələri optimallaşdırmaq və idarə etmək üçün müxtəlif atom əvəzətləri və ara elementlərlə ərinti edilmişdir. Tədqiqatlarda V, Mn və Cr, Al və ya hər ikisi Al və Ti ilə, Nb, Ta, Zr, Mo və W isə Ti ilə əvəz olunur. Bu alaşımlı tədqiqatların üstünlük sahəsinə və TiAl qəfəsindəki tetraqonallığa təsirlərinin bu yaxınlarda eksperimental tapıntılarla qismən uyğunlaşdığı aşkar edilmişdir. Ti_3Al ilə müqayisədə onun elastik sabiti daha böyük və Puasson nisbəti daha kiçikdir. TiAl geniş tərkib paylanmasına malikdir və ərimə nöqtəsinə qədər sabitdir. Onun gücü və elastiklik xüsusiyyətləri Ti_3Al ərintilərinə bənzəyir. 700 °C-ə qədər praktiki olaraq heç bir deformasiya qabiliyyəti olmayan kövrəkdir və plastik deformasiya yalnız yüksək temperaturda müşahidə olunur. Binar Ti-Al sistemlərində $TiAl_3$ intermetaliklərinin əmələ gəlməsi bir çox tədqiqatçılar tərəfindən tədqiq

edilmişdir. Bu tədqiqatlar ümumiyyətlə titan alüminidlərinin dənə tənəmizləyici təsiri üzərində idi. Sistemin Al-zəngin küncündə, tərkibində təxminən 1,2 % Ti və 665 °C temperaturda, $L + \text{TiAl}_3 \leftrightarrow \alpha\text{-Al}$ peritektik reaksiya baş verir. TiAl intermetalları çəki ilə 36,5-37,5% Ti ehtiva edir və 3,37 q/sm³ sıxlığa malikdir. Al ilə böyük sıxlıq fərqinə görə TiAl₃ hissəcikləri maye Al-da dibə enməyə meyllidir. Yüksək temperaturdan yavaş soyutma qabıqlı hissəciklərə səbəb olur. Sürətli soyutma və yüksək istilik fərqləri iynə şəkilli hissəciklərin əmələ gəlməsinə səbəb olur. Müəyyən edilmişdir ki, ərinti nisbətən aşağı temperaturda istehsal edilərsə və yüksək Ti ehtiva edərsə, kubik şəkilli və uzun təbəqələrə qədər dəyişən bloklar əmələ gəlir. (MEKHRABOV A.O.)

FƏSİL III. Ti-Al əsaslı intermetallidlərin nəzəri metodlarla dizaynı

3.1 Ti-Al ərinti sistemi

Aluminitlərin unikal fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələri bu materiallarda baş verən müxtəlif uzun məsafəli nizamlı super qəfəslər (UMN), qısa məsafəli nizamlı strukturlar (QMN), nizam-nizam və nizam-nizamsızlıq faza çevrilmələrin səbəbinə görə yaranır. Buna görə də alüminidlərin struktur xassələri ərinti stexiometriyasından və əlavə edilən ərinti elementinin növündən asılı olaraq dəyişir. Atom nöqtəyi-nəzərindən fiziki-kimyəvi və mexaniki xassələrin inkişafı, ümumiyyətlə, normal kristal super qəfəsin mikronaltı həcmində ərinti elementi atomlarının paylanması, başqa sözlə, geniş temperatur diapazonlarında alüminidlərdə UMN və QMN yaranmasının enerji və struktur xüsusiyyətlərindən asılıdır. Bu mənada aluminitlərdə UMN strukturun qorunub saxlanması bildiyi temperaturlar, yüksək temperatur xüsusiyyətlərini saxlamaq üçün nizamlı-nizamlı və/yaxud nizamlı-nizamsız faza çevrilmə temperaturlarının dəyişməsi baxımından böyük əhəmiyyət kəsb edir.



Şək.3.1 $L1_0$ strukturlu γ -TiAl ərintinin sxematik qəfəs görünüşü. c/a nisbəti birdən böyükdür. Boz və ağ kürələr Ti və Al atomlarını təmsil edir.

Mənbə: (MEKHRABOV A.O.)

Dissertasiya işində, $Ti_{50}Al_{50-x}M_x$ ($x = 1$ at. %) intermetallarda müxtəlif M aşqar element atomlarının nizamlanma proseslərinin enerji, struktur xarakteristikaları, ərinti elementi atomlarının qəfəs mövqeyi üstünlükləri və psevdo-klasterləşmə davranışları nizamlanma enerjiden asılılığı diqqətə alan Monte Karlo simulyasiyası üsulu təhlil etməkdir. Atom nizamlanma enerjiləri psevdopotensial yaxınlaşmada elektron nəzəriyyə ilə üçüncü koordinasiya sferasına (KS) qədər γ -TiAl intermetallın anizotrop olan tetraqonal $L1_0$ -tipli strukturu nəzərə alınaraq hesablanmışdır.

3.2 Ti-Al-X erintilərində atom nizamlanma enerjilərinin hesablanması

$Ti_{50}Al_{50-x}M_x$ ($x = 1$ at. %) intermetallarda müxtəlif $M = Si, P, Sc, V, Cr, Fe, Ni, Ga, Pd, Mg, Y, Zr, Nb, Cd, Hf, Ta, W$ və Pt aşqar element atomlarının nizamlanma proseslərinin enerji, struktur xarakteristikaları və psevdo-klasterləşmə davranışlarını tədqiq etmək üçün kompyuter əsaslı Monte Carlo, Fortran, MatLab, Excell və s. kimi metodlarla modelləmə və simulasya işlemləri aparılmışdır. $L1_0$ -tipli strukturun tetraqonallığı nəzərə alınmaqla, üçüncü koordinasiya sferasına qədər Ti-Al, Ti-M və Al-M atom cütləri arasındakı nizamlanma enerjiləri hesablanmışdır. Müxtəlif M elementlər üçün nizamlanma enerjilərinin məsafə ilə dəyişimi nümunə olaraq Şək.3.2-də verilmişdir.

Ərintilərin statistik-mexaniki nəzəriyyəsinə əsaslanaraq, istənilən üçlü A-B-C ərintisi sistemində hər hansı seçilmiş atomun yaxınlığındakı daxili enerji birinci 1 koordinasiya sferasında atomların növləri nəzərə alınmaqla, Ising tipli Hamiltonian ilə hesablanır:

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

Burada $W_{AB}^{(l)}$, $W_{AC}^{(l)}$, $W_{BC}^{(l)}$ müvafiq olaraq 1-ci koordinasiya sferasında AB, AC və BC atom xətlərinin qismən düzülmə enerjiləri, S_i (S_j) isə -1, 0 və +1 götürə bilən əsas spin dəyişənidir -1, 0 və +1 1-ci koordinasiya sferasında $i(j)$ -ci qəfəs nöqtəsində

müvafiq olaraq A atomunun, B atomunun və ya C atomunun olmasına uyğundur. Bu model yalnız müxtəlif atomlar arasındakı qarşılıqlı təsirləri nəzərə alır və aydındır ki, qismən düzülmə enerjiləri tənzimləmə prosesində hərəkətverici qüvvədir. Bu mənada mənfi nizamlanan enerji dəyərləri sistemi nizamlı birləşmələrə yönəldir; Bunun səbəbi, nizamsızlıq və hətta yığılmalara səbəb olan müsbət tənzimləmə enerjilərindən fərqli olaraq, daxili enerjinin azalmasına səbəb olmasıdır. (MEKHRABOV A.O., AKDENİZ M.V)

Hamilton sistemi üçün verilmiş (1) tənliyindən görüldüyü kimi, hər hansı bir ərinti sistemində Hamiltonianı hesablamaq üçün müxtəlif koordinasiya sferalarında $W_{\alpha\alpha'}(R)$ qismən düzülmə enerjilərinin qiymətləri tələb olunur. Lakin ərintilərin bütün statistik-mexaniki və statistik-termodinamik nəzəriyyələrində müxtəlif atom cütləri arasında atomlararası qarşılıqlı təsir potensialları və/və ya qismən düzülmə enerjiləri nəzəriyyənin parametri olduğundan, onları bu nəzəriyyələr çərçivəsində hesablamaq mümkün deyil. Bu növ enerji parametrləri ərintilərin elektron nəzəriyyəsinin müxtəlif yanaşmalarından istifadə etməklə hesablanma bilər.

Pseudopotensial yanaşmadan istifadə edən çoxkomponentli ərintilərin elektron nəzəriyyəsi tədqiqatlarda işlənilib hazırlanmışdır və $W_{\alpha\alpha'}(R)$ qismən nizamlanma enerjilərinin hesablanması üçün aşağıdakı tənliklər verilmişdir:

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

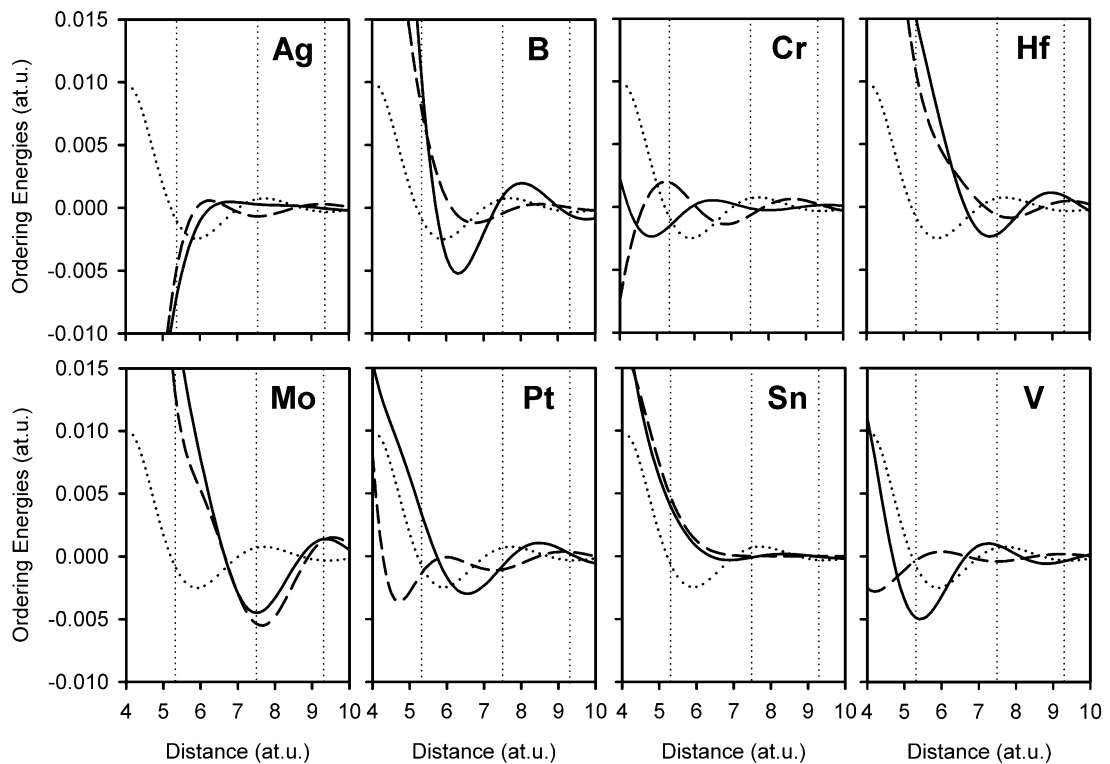
Burada,

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

(2) və (3) tənliklərində üçlü ərintinin orta atom həcmi; $\varepsilon(q)$ Hartri yaxınlaşmasında dielektrik sabiti; $\varepsilon^*(q)$ korrelyasiya və kommutasiya effektləri nəzərə alınmaqla dəyişdirilmiş dielektrik sabiti; $\omega_\alpha^0(q)$ və $\omega_{\alpha'}^0(q)$ müvafiq olaraq α və α' komponent

ionlarının qorunmamış psevdopotensial forma faktorlarıdır; $Z_{\alpha}^*(Z_{\alpha}')^*$, $\alpha(\alpha')$ komponent atomlarının effektiv valentliyidir; ξ Ewald parametridir.

TiAl ərintisi sistemində atom düzülüşü enerjilərinin hesablanması $L1_0$ tipli strukturun tetraqonallığı nəzərə alınmaqla, üçüncü koordinasiya sferasına qədər (2) və (3) tənliklərindən istifadə etməklə qismən düzülmə enerjiləri FORTRAN proqramı əsasında hesablanmışdır. Müxtəlif elementlər üçün nümunə qismən nizamlanma enerjiləri aşağıdakı şəkildə verilmişdir.



Şək.3.2 Ti-Al (nöqtəli çizgilər), Ti-M (kəsikli çizgilər) və Al-M (kəsiksiz çizgilər) çiftlərinin $Ti_{50}Al_{49}M_1$ ərintisindəki nizamlanma enerjilərinin məsafə ilə dəyişimi. Birinci, ikinci və üçüncü KS'lar soldan sağa sıralı olaraq şaquli nöqtəli çizgilər ilə göstərilmişdir.

Mənbə: (Acta Mater., 47, 3793, (1999)).

Hesablanmış nizamlanma enerjilərinin birinci koordinasiya sferasındakı dəyərləri Cədvəl 3.1-də verilmişdir.

Atom cütləri arasındakı nizamlanma enerji dəyərləri

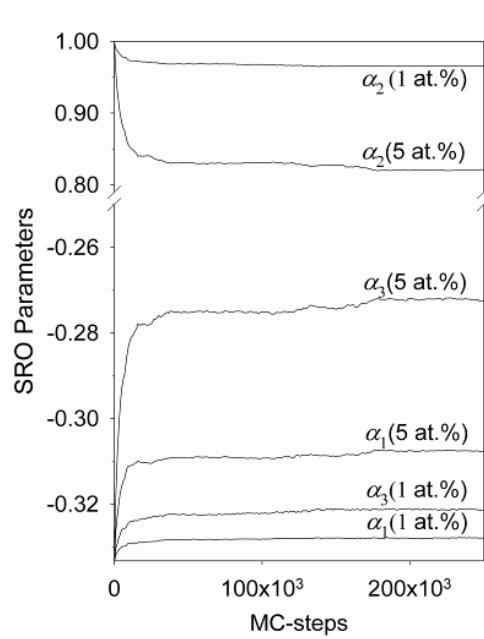
Birinci koordinasiya sferasındakı nizamlanma enerjiləri x 10 ⁻³ (at.e.v.)							
1 at. % M	ω_{Ti-Al}^1	ω_{Ti-M}^1	ω_{Al-M}^1	1 at. % M	ω_{Ti-Al}^1	ω_{Ti-M}^1	ω_{Al-M}^1
Ag	-0.812	-5.460	-7.599	P	-0.877	-0.785	1.835
Au	-0.813	-3.814	-0.363	Pd	-0.844	14.103	5.700
B	-0.899	7.814	10.236	Pt	-0.843	-1.302	3.213
Cd	-0.814	-1.794	1.108	Rh	-0.870	2.575	7.526
Co	-0.860	0.011	-2.620	Ru	-0.893	9.230	14.634
Cr	-0.879	1.931	-1.498	Sb	-0.840	8.631	8.280
Cu	-0.836	-3.186	-5.697	Sc	-0.820	0.995	-2.370
Fe	-0.879	1.047	-2.490	Si	-0.864	-1.422	0.292
Ga	-0.845	1.454	-0.757	Sn	-0.833	4.493	3.759
Ge	-0.852	0.057	0.157	Ta	-0.896	6.541	13.366
Hf	-0.854	10.690	14.880	Te	-0.846	4.748	5.991
In	-0.816	2.472	2.310	Tl	-0.805	1.287	-0.526
Mg	-0.807	-0.199	0.229	V	-0.913	-0.262	-4.908
Mn	-0.856	-0.171	-2.673	W	-0.927	16.122	22.162
Mo	-0.928	12.515	19.021	Y	-0.784	2.871	7.789
Nb	-0.896	6.966	13.899	Zn	-0.843	-1.324	-1.943
Ni	-0.861	-0.008	-2.643	Zr	-0.850	9.401	14.828

Mənbə: (Anık S., Sütataç, 1986)

3.3 Ti-Al-X erintilərində atomların nizamlanma proseslərinin Monte Karlo metodu ilə kompyuter simulyaları

Cowley-Warren qısa-məsafəli nizamlanma (SRO) parametrləri, α_1 (R_1), aşağıdakı tənliklə hesablanıb:

$$\alpha_{AB}(r_l) = 1 - \frac{P_{AB}^{ij}(r_l)}{2C_A C_B} = 1 - \frac{N_{AB}^l}{N_{Z_l} C_A C_B} \quad (4)$$



Şək.3.3 $Ti_{50}Al_{50-x}Mo_x$, ($x = 1$ və $x = 5$) ərinti sistemində α_1 , α_2 və α_3 qısa-məsafəli nizamlanma parametrlərinin MK addımına görə dəyişməsi

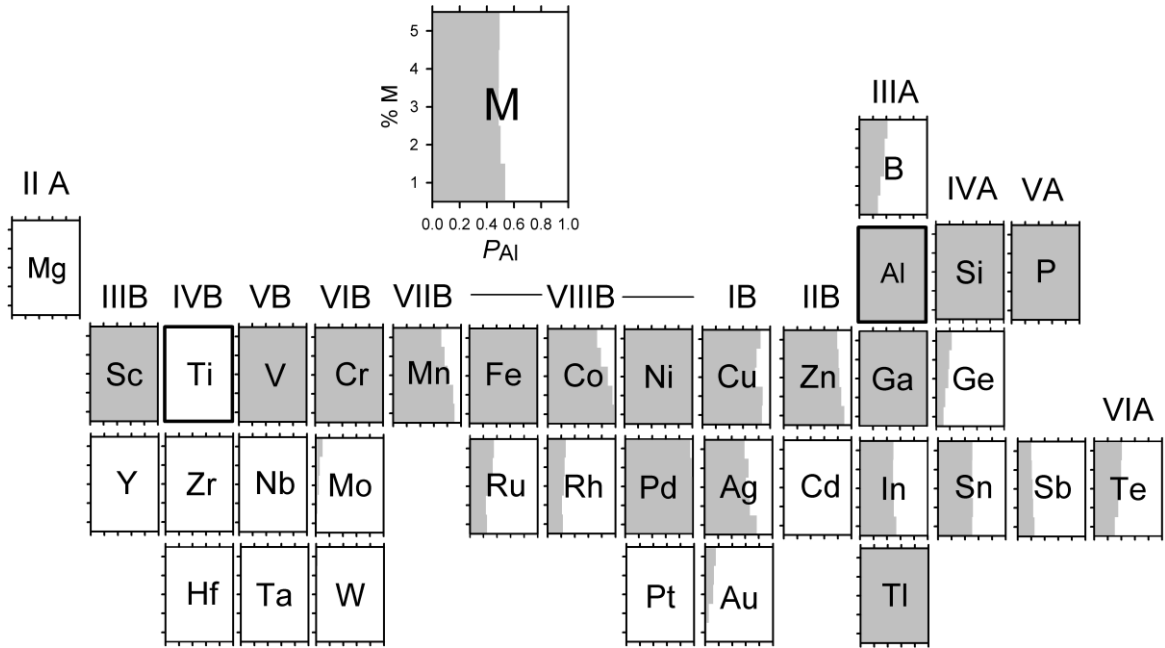
Mənbə: (AUSTIN C. M.)

SRO parametrlərinin tarazlıq dəyərlərinin müqayisəsi ilə $Ti_{50}Al_{50-x}Mo_x$, ($x = 1$ və $x = 5$) ərintiləri üçün kompozisiya effektini Şəkil 9-da asanlıqla görmək olar. Sistem tarazlığa gəldikdən sonra minimum dalğalanmalar üzərindən hər 10^3 MC-addımdan bir ortalamalar hesablanıb. Sistemin tarazlığa çatması üçün tələb olunan MC addımlarının sayı əlavə edilən ərinti elementindən asılı olaraq 10^4 ilə 10^7 arasında dəyişirdi. Hər bir simulyasiya üç dəfə təkrarlandı və mövqe işğal fraksiyaları bu simulyasiyaların ortalaması kimi götürüldü. (AUSTIN C. M.)

3.4 Ti-Al-X erintilərində X aşqar element atomlarının kristal qəfəs düyün nöqtələrinə yerləşmə xüsusiyyətləri

Dissertasiyada işində, γ -TiAl daxilində ərinti elementlərinin qəfəs mövqeyi üstünlüklərini müəyyən etmək üçün Monte Karlo simulyasiya üsulu tətbiq edilmişdir. Bu işdə geniş istifadə edilən və tətbiq edilən kanonik MC metodunda Ising tipli Hamiltonian Tənlik (1) istifadə olunur. Hər bir sistem $L1_0$ tipli qəfəs quruluşunda düzülmüş 8788 atomdan ibarətdir. TiAl kristalının 300 K-də tam nizamlı bir quruluşa malik olduğu güman edilirdi və simulyasiyalar bu fərziyyə ilə başlandı. Nəzərə alınan ən aşağı ərinti miqdarı 1% atom (at. 1%) idi. MC simulyasiyası üçün yaradılmış təsadüfi ədədlərin keyfiyyəti sistemin tarazlığa yaxınlaşması üçün çox vacib olduğundan, $2^{19377-1}$ son dərəcə yüksək təkrarlama dövrü olan Mersenne-Twister adlı çox güclü xarici psevdə-təsadüfi ədəd generatoru yaradılmışdır (MATSUMOTO və NISHIMURA).

TiAl ərintisi sistemində ərinti elementlərinin qəfəs mövqeyi üstünlükləri $Ti_{50}Al_{50-x}Mox$, ($x = 1, 2, 3, 4$ və 5) ərintisindəki M ərinti elementlərinin qəfəs mövqeyi üstünlükləri dövrü cədvəlin ekvivalenti ilə Şək.3.4-də verilmişdir.



Şək.3.4 $Ti_{50}Al_{50-x}Mo_x$, ($x = 1, 2, 3, 4$ və 5) M aşkar element atomlarının qəfəs mövqeyi üstünlükləri dövrü qaydada verilmişdir

Mənbə: (MATSUMOTO və NISHIMURA.)

Şəkildə aydın görüldüyü kimi, ərinti elementinin Al və/və ya Ti mövqələrinə üstünlük verməsi həm elementin növündən, həm də onun miqdarından asılıdır. Bununla belə, bəzi ərinti elementləri tamamilə Al ($M_{Al-site} = Si, P, Sc, V, Cr, Fe, Ni, Ga, Pd$ və Tl) və ya tamamilə Ti ($M_{Ti-site} = Mg, Y, Zr, Nb, Cd, Hf, Ta, W$ və Pt) mövqələrinə üstünlük verə bilər. Tədqiqatın tələbi olaraq ərintilərin elektron nəzəriyyəsində MC simulyasiyası və psevdopotensial yanaşmanın kombinasiyası ilə yaradılmış üsulla aşkar edilmişdir; $L1_0$ tipli müntəzəm γ -TiAl qəfəslərində M ərintisi elementlərinin mövqe üstünlüklərinin indiyə qədər bildirilmiş eksperimental və nəzəri tədqiqatlarla müqayisəsi metodun etibarlılığını sübut etmək baxımından vacibdir. Fe, Co və Ni elementləri üçün proqnozlaşdırılan mövqe üstünlükləri bildirilmiş eksperimental tədqiqatlarla uyğundur (SONG və digərləri, 2000). Bununla belə, $M = Mn, Cr$ və V əlavələri üçün Ti, Al və ya hər ikisinə üstünlük verdiyini bildirən tamamilə ziddiyyətli tədqiqatlar mövcuddur (REVIERE və digərləri, 1993). Bundan əlavə, müxtəlif tədqiqatlar Mo və W atomlarının hər iki qəfəs mövqeyinə üstünlük verdiyini bildirmişdir (JINLONG et al., 1992). Hazırkı simulyasiya tədqiqatımız göstərsə də, Sn

ərintisi elementi heç bir açıq tərkib asılılığı göstərmədən Al və Ti mövqələrində bərabər paylanır (HAO et al., 2000).

3.5 Ti-Al-X erintilərində X aşqar element atomlarının klasterləşmə davranışları

γ -TiAl intermetaliklərində ərinti elementlərinin digər mühüm paylanma xarakteri onların müxtəlif aqreqasiya davranışlarıdır. Nizamlanma enerjilərinin nisbi qiymətləri ilə müəyyən edilən qəfəs mövqeyi üstünlüklərinə əlavə olaraq, bu enerjilərin əlamətləri, əsasən birinci KS-da, TiAl matrisində M elementinin həll olunma rejimini də müəyyən edir. γ -Ti-Al-M intermetallarda üçüncü M aşqar elementlərinin hansı qəfəs düyün nöqtələrində paylanma xarakteri ilə yanaşı onların ərinti içərisindəki müxtəlif seqreqasiya davranışlarının tədqiqi də əhəmiyyət kəsb etməkdədir. M ərintisi elementləri üçün ümumi qəfəs mövqeyinin üstünlüyü və solvasiya rejimi xarakteri üçün psevdopotensial yanaşmada ərintilərin elektron nəzəriyyəsi ilə hesablanmış qismən nizamlanma enerjilərinin ümumi meyarları Cədvəl 3.2-də verilmişdir.

Cədvəl 3.2

M aşqar element atomları üçün ümumi qəfəs mövqeyinin üstünlüyü (Al, Ti və yaxud hər ikisi) və seqreqasiya rejimi kriteriyaları

Qəfəs Mövqeyi Şerti	Qəfəs Mövqeyi	Həll Olunma Şerti	Həll Olunma Modu
$\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$	Al	$\omega_{Al-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$	Al	$\omega_{Al-M}^1 < 0$	II
$\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$	Ti	$\omega_{Ti-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$	Ti	$\omega_{Ti-M}^1 < 0$	II

$\omega_{Al-M}^1 \square \omega_{Ti-M}^1$	Ti/Al	$\omega_{Al-M}^1 > 0$ ve $\omega_{Ti-M}^1 > 0$	I
$\omega_{Al-M}^1 \square \omega_{Ti-M}^1$	Ti/Al	$\omega_{Al-M}^1 < 0$ ve $\omega_{Ti-M}^1 < 0$	III

Mənbə: (METALL. MATER. TRANS. A VOL. 41A, 2010, 267-274)

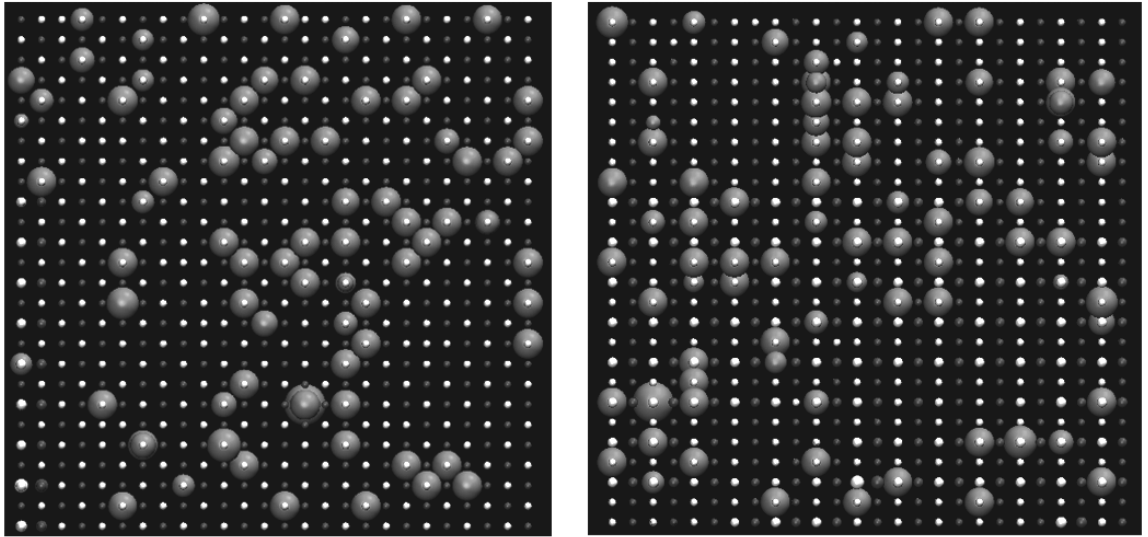
MC simulyasiyalarının nəticələri tədqiq edildikdə, ərinti elementlərinin üç fərqli həll rejimi nümayiş etdirə biləcəyi görüldü:

I təsadüfi həll (Rejim I)

II iki ölçülü (2D) müstəvi klasterləşdirmə (Rejim II)

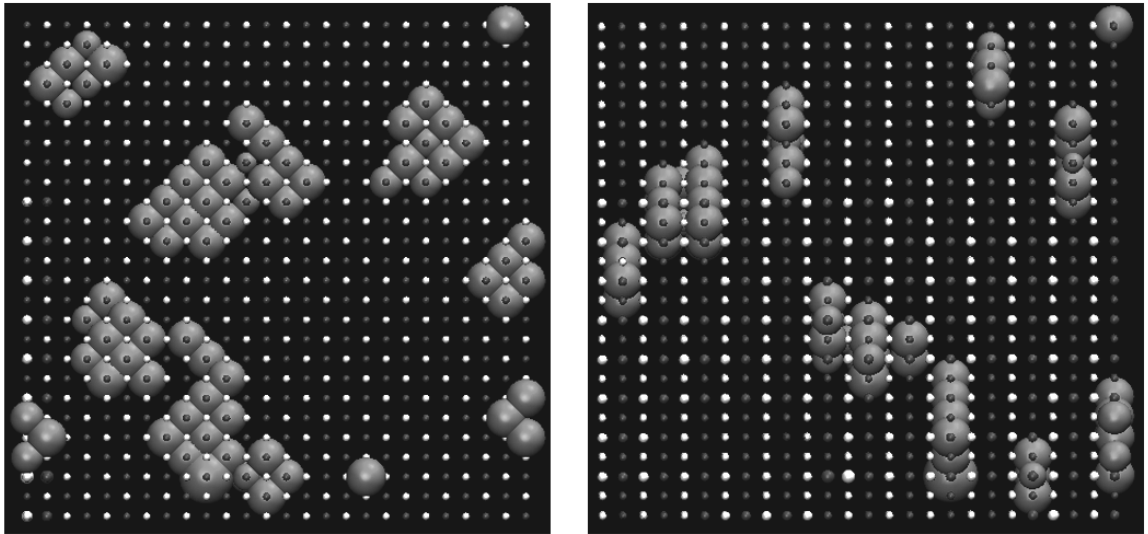
III üç ölçülü (3D) klasterləşdirmə (Rejim III)

Müxtəlif nümunələr üçün həll rejimləri Şək.3.5-3.5.2, Hf (I rejim), Cr (Rejim II) və Ag (Rejim III) elementləri üçün verilmişdir. Şək.3.5.1-dən aydın göründüyü kimi $\omega_{Al-M}^1 \gg \omega_{Ti-M}^1$ və $\omega_{Ti-M}^1 > 0$ şərtlərə cavab verən Hf atomları heç bir klasterləşmə əlaməti göstərmir. Bu kontekstdə bu meyarlara cavab verən Hf və digər M aşqar elementləri Ti-saytlarında təsadüfi paylanır (Rejim I). Bənzər bir davranış, yəni təsadüfi həll (Rejim I), Al mövqələrinə üstünlük verən M elementləri üçün də $\omega_{Ti-M}^1 \gg \omega_{Al-M}^1$ və $\omega_{Al-M}^1 > 0$ meyarlar yerinə yetirildikdə də etibarlıdır.



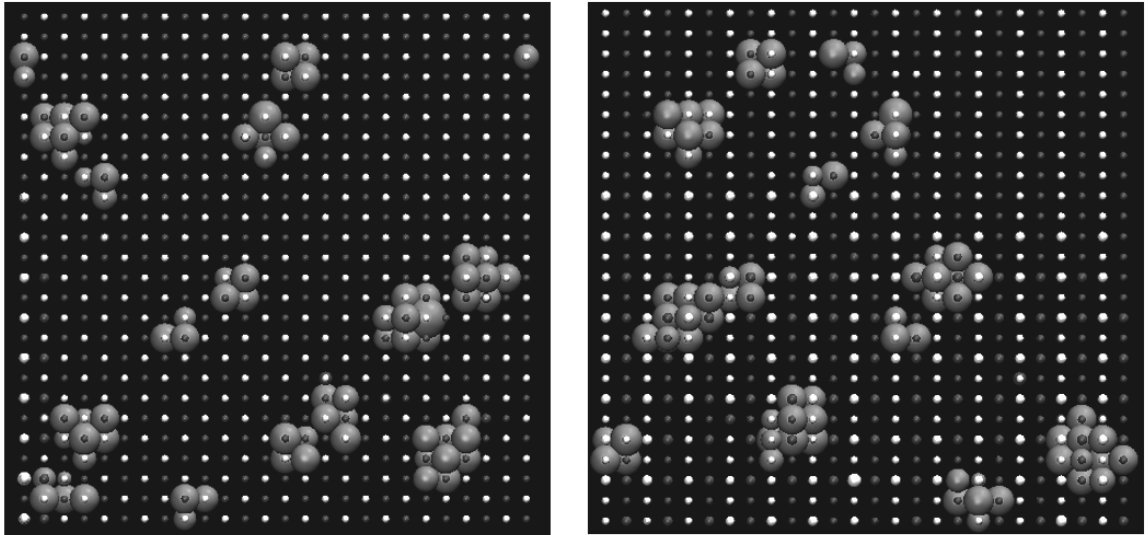
Şək.3.5 Hf atomları (böyük kürələr) heç bir klasterləşmə göstərmədən γ -TiAl-də həll olunur (Rejim I). Şəkillər [001] (soldakı şəkil) və [010] (sağ şəkil) istiqamətlərdən çəkilmişdir

Mənbə: (MEKHRABOV A.O. və AKDENİZ M.V.)



Şək.3.5.1 Cr atomları (böyük kürələr) γ -TiAl-də planar aqreqasiya göstərir (Rejim II). Şəkillər [001] (soldakı şəkil) və [010] (sağ şəkil) istiqamətlərdən çəkilmişdir

Mənbə:(MEKHRABOV A.O. Və AKDENİZ M.V.)



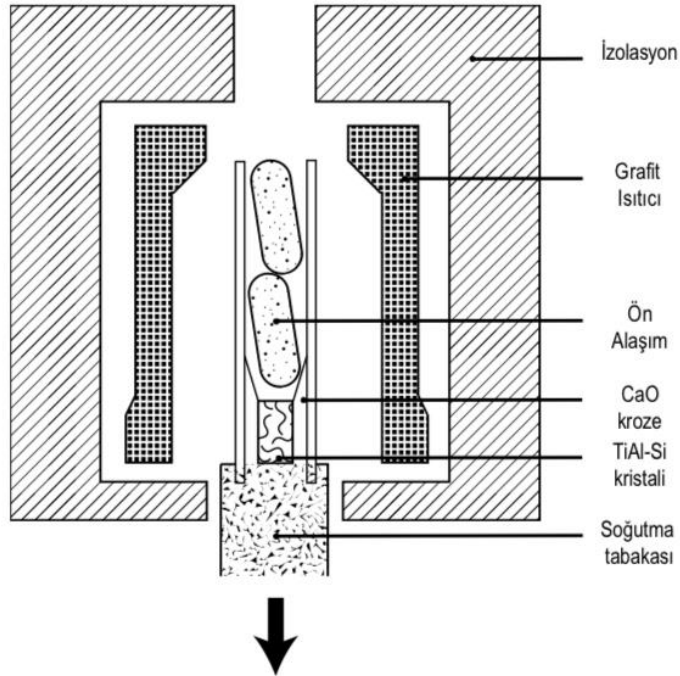
Şek.3.5.2 γ -TiAl-da Ag atomları (böyük kürələr) üç ölçülü seqreqasiya göstərir (Rejim III). Şəkillər [001] (soldakı şəkil) və [010] (sağ şəkil) istiqamətlərindən çəkilmişdir.

Mənbə: (MEKHRABOV A.O. və AKDENİZ M.V.)

FƏSİL IV. Ti-Al əsəşli intermetallidlərin experimental metodlarla tədqiqi

4.1 Ti-Al əsəşli intermetallidlərin sintez metodları

Titan və alüminium reaktiv metallar olduğundan, ərimə prosesi vakuum mühitində həyata keçirilir. Ümumiyyətlə, vakuum qövs sobaları, induksiya sobaları və oxşar üsullarla hazırlanmış sobalar istifadə olunur. Son sistemə misal olaraq TiAl istehsalında istifadə edilən vakuum mühitində əridilmə metodudur. Bu əritmə üsulunda tökmə üçün hazırlanmış nümunələr sobada tige adlanan keramika qabda yerləşdirilir. Ocaqda anod və katod elektrodları arasında baş verən elektrik cərəyanı ionlaşmış qaz və ya qaz plazmasındakı elektronlar vasitəsilə bu iki elektrod arasındakı materiala ötürülür. Bu cərəyanla sobada ərimə əldə edilir. Bu ərimə üsulunda istifadə olunan cihazın en kəsiyi Şək.4.1-də göstərilmişdir.



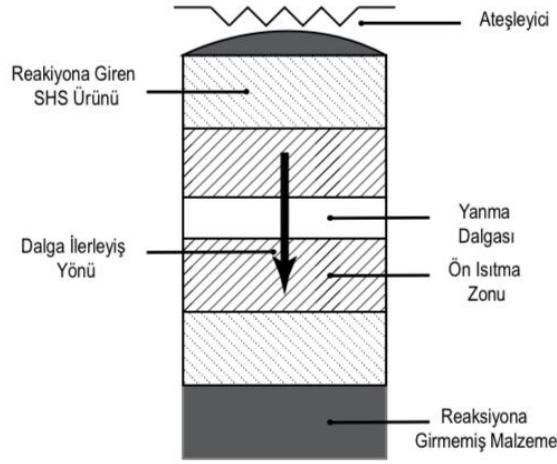
Şək.4.1 İntermetalların istehsal üsulları

Mənbə:(WOODWARD C.)

Öz-özünə yayılan yüksək temperatur sintezi (SHS)

Öz-özünə yayılan yüksək temperatur sintezində (SHS) və həcmli yanma sintezində (VCS) ilkin reaktivlər və əldə edilən məhsul bərk formada olur.

Bu üsulda reaktivlər silindrik şəkildə sıxılır. Sonra nümunələr ekzotermik reaksiyaya başlamaq üçün volfram rulonu və ya lazer kimi xarici vasitələrlə yerli (SHS) və ya homogen (VCS) qızdırılır. SHS metodunun xarakteristikası ondan ibarətdir ki, reaksiya lokal olaraq başladıqdan sonra dalğa reaksiyası heterojen reaktiv qarışığının içərisindən özünü gücləndirməklə gedir. İlk reaksiya soba kimi xarici istilik mənbəyindən istifadə etməklə başlanır. Ekzotermik reaksiya nəticəsində ayrılan istilik miqdarı kifayət qədər yüksəkdir və istilik əmələ gəlmə sürəti istilik yayılmasından daha yüksəkdir. Alışma temperaturuna qədər qızdırılan bölgədə reaksiya meydana gələn ekzotermik reaksiya istiliyi sayəsində xarici istilik mənbəyinə ehtiyac olmadan öz-özünə davam edən dalğa şəklində davam edir və yaranan dalğa alovlanan hissədən hərəkət edir, nümunə digər hissəyə köçürülür və bir neçə saniyə ilə bir neçə dəqiqə ərzində tamamlanır. Dalğanın ön hissəsindəki temperatur çox yüksək dəyərlərə (~2000–4000 °C) çatır. SHS metodunun xüsusiyyəti ondan ibarətdir ki, nümunə bir tərəfdən alovlanırsa, reaksiya otaq temperaturunda belə kortəbii şəkildə davam edə bilər. Xarici istilik mənbəyinin ilkin reaksiyaya başlamaqdan başqa heç bir funksiyası yoxdur. Reaksiya nəticəsində ayrılan istilik qonşu təbəqəni alovlanma temperaturuna yüksəltməklə reaksiyanı işə salır və beləliklə, bu alovlanma dalğası nümunənin içindən keçərək reaktivləri istehlak edərək məhsula çevrilir. SHS metodunda toz kompaktında dalğaların yayılması Şək.4.1.1-də sxematik şəkildə göstərilmişdir. SHS metodunun əsas prinsiplərini aşağıdakı kimi sadalamaq olar: özünü dəstəkləyən və sürətlə irəliləyən dalğa reaksiyası sayəsində istənilən tərkibə və quruluşa malik məhsul əldə etmək; başlanğıcda qismən istifadə edilən xarici istiliyin ekzotermik reaksiya nəticəsində buraxılan daxili istiliklə dəstəklənməsi. (WOODWARD C., Kajihara S., və digərləri) Ekzotermik istilik buraxma sürəti və keçiriciliyindəki fərqlər məhsulların strukturunu və tərkibini, çevrilmə dərəcəsini, temperaturu və sürəti idarə edir.



Şək.4.1.1 SHS metodunda toz kompaktında dalğaların yayılması

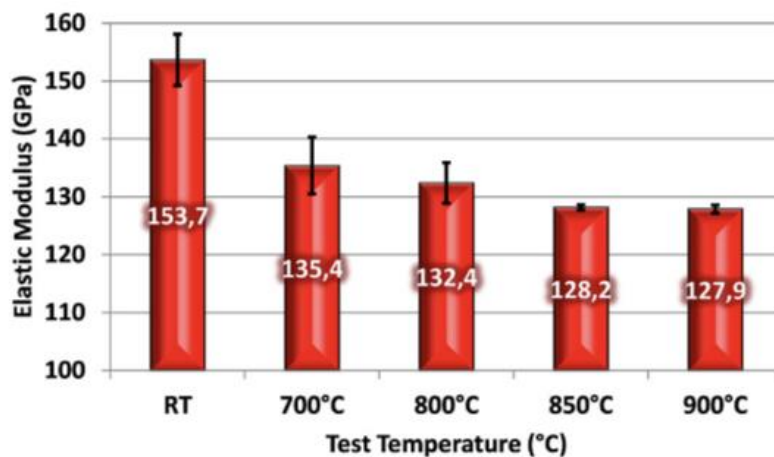
Mənbə: (WOODWARD C., Kajihara S.Z..)

Yanma sintezi ilə istehsal olunan məhsullar ümumiyyətlə məsaməli olur. Gözeneklilik bir çox amillərdən qaynaqlana bilər; Kirkendall və Frenkel effekti, qaz əmələ gəlməsi, molar həcm dəyişiklikləri və ya ilkin məsaməlilik. Reaktiv sinterləmənin ən mühüm faydası, birbaşa elementar tozlardan sıx intermetal və keramika birləşmələri, ərintiləri və ya kompozit materialları əldə etməkdir. Yanma sintezi nəticəsində əldə edilən məhsullarda məsaməliliyin əmələ gəlməsi reaktiv sinterləmə zamanı xarici təzyiğin tətbiqi və/və ya reaktiv isti presləmə (RHP, Reaktiv İsti presləmə) və ya reaktiv isti izostatik basma (RHIP, Reaktiv İsti İzostatik Presləmə) zamanı reaksiyaya diqqətli nəzarət etməklə aradan qaldırıla bilər. Prosesdə alovlanma iki alt modelə bölünür: Birincisi, öz-özünə yayılan yüksək temperatur sintezi (SHS) kimi müəyyən edilir. Burada kompakt formada olan reaktivlər qızdırılan bir rulondan istifadə edərək alovlanır, reaksiya nəticəsində reaksiya reaktivlərin yanması ilə dalğalar şəklində davam edir və nümunələr alınır. Birinci reaksiya xarici istilik mənbəyindən (məsələn, müqavimətlə qızdırılan rulondan) istifadə edilir. Reaksiya, alovlanma temperaturuna qədər qızdırılan bitişik təbəqədəki reaksiya istiliyindən istifadə etməklə öz-özünə davam edir və reaksiya xarici istilik mənbəyinə ehtiyac olmadan davam edir. İkinci alovlanma nümunəsi termal partlayış və ya eyni vaxtda yanma kimi təsvir olunur. Kompaktın bütün həcmi partlama temperaturuna qədər

qızdırılır (sobada), bütün reaktiv tozlar kortəbii olaraq son məhsula çevrilir. Hər iki alovlanma modeli keçmişdə nikel alüminium oksidinə uğurla tətbiq edilmişdir. Reaksiyaya girən maddələrin stoxiometrik nisbəti, əlavə olunan aşqarların miqdarı, proses atmosferi, reaktivlərin hissəcik ölçüsü, xam kompaktların diametri və sıxlığı baş verən reaksiyalara təsir göstərir. Yanma sintezinin bəzi üstünlükləri və mənfi cəhətləri aşağıdakılardır: qısa emal müddəti, yüksək isitmə sürəti və yüksək temperatur ilə xarakterizə edilən yanma sintezi üsulu ənənəvi keramika üsulları ilə müqayisədə daha aşağı istehsal maya dəyəri sayəsində material istehsalı üçün texnoloji baxımdan çox cəlbedicidir. (Pulci G, Tului M.)

4.2 Ti-Al əsaslı intermetallidlərin fiziki-kimyavi və mexaniki xassələri

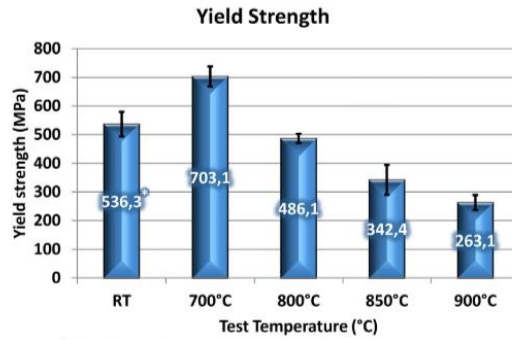
TiAl intermetal ərintiləri üçün ən cəlbedici tətbiqlərin yüksək temperaturda işləyən mexaniki komponentlərin istehsalı olduğunu nəzərə alaraq, dörd nöqtəli əyilmə sınaqları otaq temperaturunda və 700-900 ° C temperatur diapazonunda aparılmışdır. Temperaturun Young moduluna təsirinin qiymətləndirilməsi, tökmə ərintilərinin axma gücü və əyilmə gücü ölçülmüşdür. Şək.4.2-də görüldüyü kimi, temperatur, dəyəri otaq temperaturunda təxminən 154 GPa-dan 900°C-də təxminən 128 GPa-a qədər azalan elastik modula təsir edir. (REVIERE R.D., Chen X.F.)



Şək.4.2 Gərginliyə qarşı deformasiyanın nümayəndəsi ayriləri şkalası

Mənbə: (RHIP, Reaktiv İsti İzostatik Presləmə)

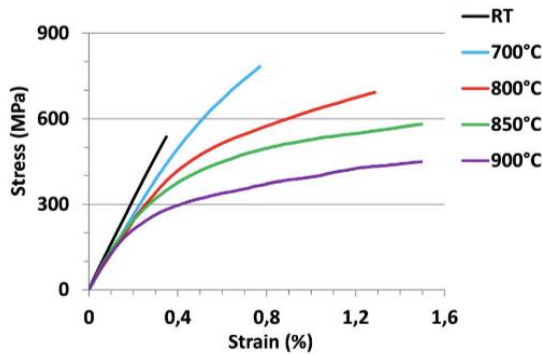
Şək.4.2-də dörd nöqtəli əyilmə testləri vasitəsilə müxtəlif temperaturlarda əldə edilən gərginliyə qarşı deformasiyanın nümayəndəsi ayriləri göstərilir. Aydındır ki, otaq temperaturunda, sınaqdan keçirilmiş ərintinin davranışı həqiqətən kövrəkdir və temperaturun artması ilə ərintinin çəvikliyi yüksək temperatur diapazonunda güc itkisi ilə artır. Bu şəkildən görüldüyü kimi, tədqiq olunan ərintinin davranışı 800 °C-də çəvik olur. Otaq temperaturu testinə gəldikdə, nümunələr daha aşağı güclə xarakterizə olunur. Bunun səbəbi, ərintinin otaq temperaturunda kövrək olması və mikrobüzülmə boşluqları kimi kəsiklərin mövcudluğunda qırılmaya çox həssas olmasıdır



Dörd nöqtəli əyilmə sınaqlarından əldə edilən temperaturla qarşı məhsuldarlıq gücü

Mənbə: (RHIP, Reaktiv İsti İzostatik Presləmə)

Müxtəlif temperaturlarda aparılan dörd nöqtəli əyilmə testlərindən əldə edilən gərginliyə qarşı deformasiya ayriləri edilən nümunələr birbaşa mərkəzdənqaçma



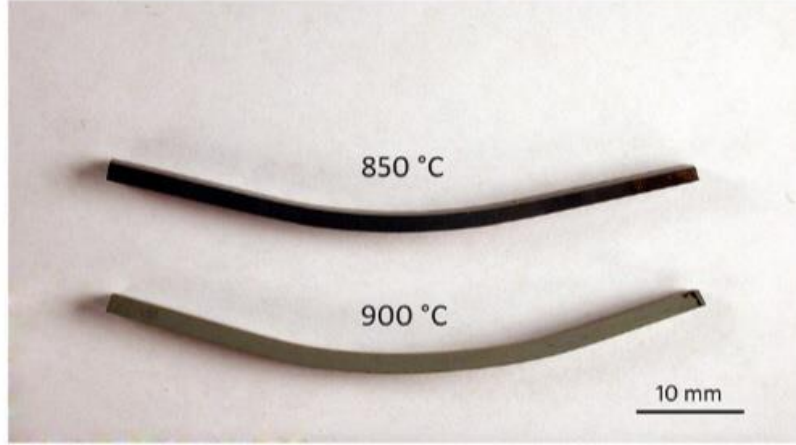
tökmə üsulu ilə istehsal edilmişdir və buna görə də yüksək səth/həcm nisbətini nəzərə alaraq qüsursuz nümunə əldə etmək həqiqətən çətindir. Şək.4.2.1 sınaq temperaturundan asılı olaraq Rp0.1 məhsuldarlıq gücü göstərilir. Biz bu parametreyə

istinad etmək qərarına gəldik, çünki bir çox hallarda sınaqdan keçirilmiş nümunələrin qırılmaya qədər plastik deformasiyası 0,2%-dən kiçik olur və buna görə də Rp0.2 dəyərini hesablamaq mümkün olmur. Şəkil X-da müşahidə olunduğu kimi, artıq izah edildiyi kimi, büzülmə qüsurlarının olması səbəbindən otaq temperaturunda məhsuldarlıq 700°C-də olandan aşağıdır. 700-dən 900°C-ə qədər yüksək temperatur intervalında məhsuldarlıq temperaturun artması ilə azalır: 700 °C-də Rp0.1 dəyəri 703 MPa, 900°C-də isə 263 MPa-dır. (MARRA F, BLASI C.)

Bu məlumatları müqayisə edərək ədəbiyyatda mövcud olanlardan (Inui H. və Ito K. və digərləri) görünə bilər ki, elastik modullar olduqca oxşar olsa da, tədqiq edilmiş temperatur intervalında nümunələrimizi xarakterizə edən məhsuldarlıq gücü tökmə və HIP üçün ədəbiyyatda bildirildəndən daha yüksəkdir. Ərintilər və o, ilk növbədə β -transus temperaturundan yuxarı istilik müalicəsinə, sonra isə 900 °C-də stabilləşdirmə işinə məruz qalan nümunələr üçün ədəbiyyatda əldə edilən dəyərə yaxındır. Bu, tökmə və HIP-ed ərintilərinin qaba və uzunsov taxıllara malik olduğunu, istehsal etdiyimiz ərintinin isə heç bir üstünlük istiqaməti olmayan incə qatlı koloniyalarla xarakterizə olunan mikro quruluşa malik olduğunu nəzərə alaraq izah edilə bilər.

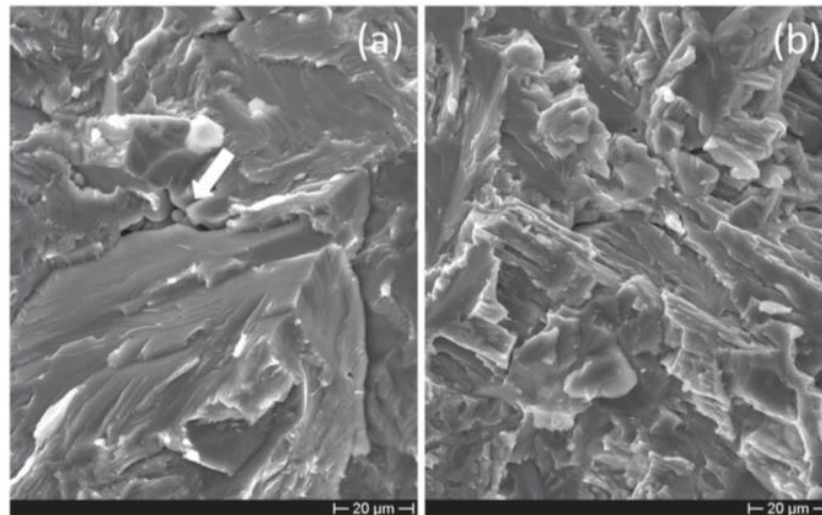
Yüksək temperatur sınaqlarına gəldikdə, 850 və 900 °C-də sınaqdan keçirilmiş nümunələr dörd nöqtəli əyilmə sınağı zamanı son qırılmaya çatmadan əyilir (Şəkil 18). Bu, yüksək temperaturda nümunənin plastik deformasiyası ilə əlaqədardır. Tədqiq olunan ərintinin yüksək temperaturda plastikliyi sürüşmə və twinning sistemlərinin asanlıqla aktivləşdirilə biləcəyi γ faza bölgələrinin olması ilə gücləndirilir. Bu mülahizələrə baxmayaraq, sınıq səthlərinin SEM analizləri bütün sınaqdan keçirilmiş temperaturlarda qırılma mexanizminin transqranulyar olduğunu vurğuladı. Bildirilmiş SEM mikroqrafikləri həmçinin taxılların içərisində qırılmanın həm translamellar, həm də interlamelyar qırıqları əhatə edən qarışıq mexanizmlə yayıldığını vurğulayır. 800, 850 və 900 °C-də aparılan mexaniki sınaqlardan sonra, sınaqdan keçirilmiş nümunələr

üzərində aparılan mikrostruktur tədqiqatları yüksək temperaturda qalıcılığına görə mikrostruktur dəyişikliklərini vurğulamamışdır. (BAIAMONTE L, MARRA F.)



Şək.4.2.1 850 və 900 ° C-də dörd nöqtəli əyilmə testi ilə sınaqdan keçirilmiş nümunələrin plastik deformasiyasını göstərən makroqraf

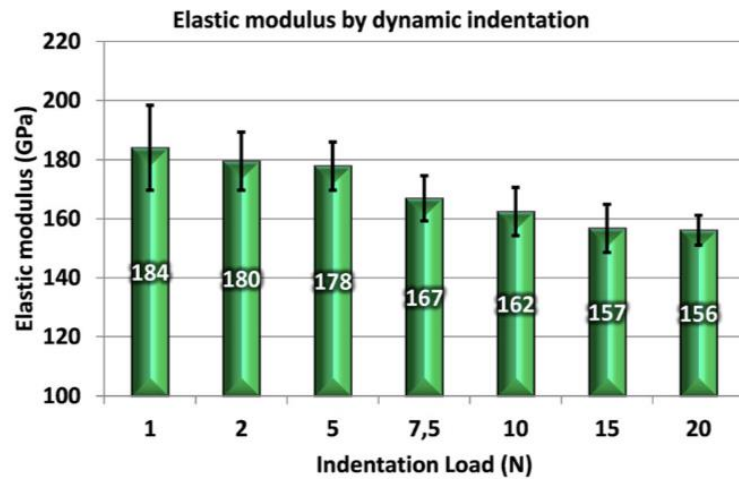
Mənbə: (Esslinger J., "Titanium in Aero Engines")



Şək.4.2.2 Otaq temperaturunda (a) və 800° C-də (b) ərintinin qırılma səthinin morfolojiyasını göstərən SEM mikroqrafiyası. Ağ ox mikrobüzülmə boşluğunu göstərir

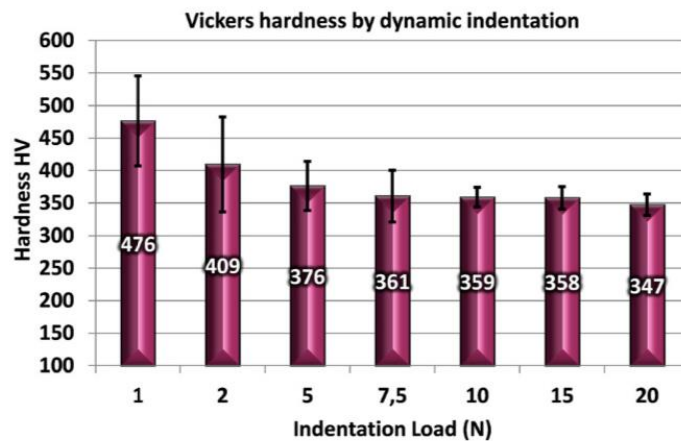
Mənbə: (Esslinger J.,“Titanium in Aero Engines”)

Otaq temperaturunda mikrosərtliyin və Young modulunun dəyərləri dinamik girinti vasitəsi ilə qiymətləndirilmişdir. Şək.4.2.1 və 4.2.2-ni müşahidə etməklə aydın olur ki, tətbiq olunan yükün artması ilə verilənlərin yayılması azalır. Bu, ərinti mikrostrukturunun dupleks quruluş olması səbəbindən tətbiq olunan yükü azaltmaqla sınaq nəticələrinin ya lamel struktur komponentinin, ya da γ fazasının mikrosərtliyini verə biləcəyini nəzərə alaraq izah edilə bilər.



Şək.4.2.3 Girinti sınağı nəticələrinin təhlilindən əldə edilən Elastiklik modulu dəyərləri

Mənbə: (Helm D., Roder O.)



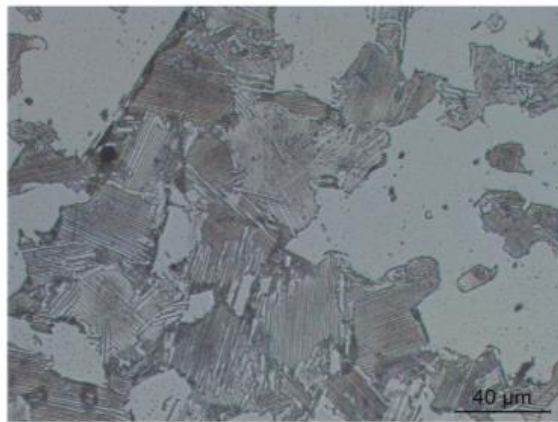
Şək.4.2.4 Girinti sınağı nəticələrinin təhlilindən əldə edilən girinti yükünün funksiyası kimi materialın sərtliyi.Mənbə: (Helm D., Roder O.)

Dinamik girinti məlumatları tətbiq olunan sınaq yükünün artması ilə, yəni girinti ölçüsünün artması ilə görünən mikrosərtlik dəyərlərinin azaldığını göstərir: girinti ölçüsü effekti kimi tanınan bu fenomen, kiçik girintilərə xas olan böyük deformasiya qradientlərinin xüsusilə mikrometraltı dərinlik rejimində gücləndirilmiş sərtləşməyə səbəb olan dislokasiyalardır. Bununla belə, 10-20 N yük diapazonunda dinamik girinti testlərindən əldə edilən sərtlik dəyərləri (Şək.4.2.3) Vickers-ə olduqca yaxındır.

Həmçinin elastik modul tətbiq olunan yükü artırmaqla azalır (Şək.4.2.2): bunu nəzərə almaqla izah etmək olar ki, yükü artırmaqla (və nəticədə girinti həcmi) ölçmələr mikrobüzücü məsamələrin mövcudluğundan getdikcə daha çox təsirlənir, Young modulunun dəyərinin azalmasına səbəb olur. Burada yenə də məlumatların daha etibarlı göründüyü 10-20 N yük diapazonunda əldə edilən elastik modul dörd nöqtəli əyilmə testləri ilə hesablanana çox yaxındır.(Helm D., Roder O.)

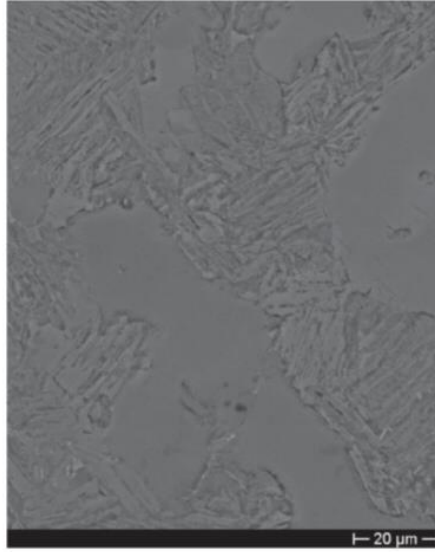
Ti-47Al-3Cr-3Nb (at.-%) ərintinin mexaniki davranışı həm otaqda, həm də yüksək temperaturda qiymətləndirilmişdir. İstehsal olunan ərintinin mikro strukturu lamellar ($\gamma + \alpha_2$) koloniyaları arasında paylanmış monofazlı γ dənələrinin incə dispersiyası ilə xarakterizə olunur. Tökmə nümunələri dörd nöqtəli əyilmə sınaqlarına məruz qalmışdır. Otaq temperaturunda nəticələrən azı 10-20 N diapazonunda olan girinti yükləri üçün dinamik girinti sınaqlarından əldə edilənlərlə yaxşı uyğunluq təşkil edir. Yüksək temperaturda əldə edilən nəticələr vurğuladı ki, ərinti otaq temperaturunda kifayət qədər kövrək görünsə də, onun çevikliyi temperaturun artması ilə əhəmiyyətli dərəcədə artır. Üstəlik, məhsuldarlıq gücü və Young modulu hətta 900 °C-də kifayət qədər yüksək dəyərləri saxlayır ki, bu da HIP və istilik müalicəsindən sonra eyni sinif ərintiləri üçün ədəbiyyatda bildirilənlərlə müqayisə edilə bilər. Bu nəticələr əsasında demək olar ki, yaxşı olan tökmə ərintisi performansını tökmə prosesini təkmilləşdirməklə və deməli, büzülmə qüsurlarını azaltmaqla daha da yaxşılaşdırmaq olar.(KIM Y-W, KIM S-L.)

Tədqiq olunan ərintinin tərkibi TiAl metallararası ərintilərin mexaniki davranışına ərinti elementlərinin təsirinin müəyyən edilməsinə yönəlmiş geniş tədqiqat kampaniyasının nəticələri nəzərə alınmaqla seçilmişdir. Həm yüksək temperaturda oksidləşməyə davamlılığı, həm də qırılma möhkəmliyini yaxşılaşdırmaq üçün adətən bu ərintilərə əlavə edilən Cr və Nb miqdarı diqqətlə seçilməlidir. Əslində, Cr və Nb β -sabitləşdirici elementlərdir və β fazası TiAl ərintilərinin termomexaniki emalını asanlaşdırsa da, sübut edilmişdir ki, həm dənə sərhədlərində çökən qaba β hissəcikləri, həm də lamelli interfeyslərdən əmələ gələn β faza azalır, ərintinin otaq temperaturunda çevikliyinə və qırılma möhkəmliyinə təsir gösdərir. Bu mülahizələrə əsasən, məqbul oksidləşmə müqaviməti və qırılma möhkəmliyi əldə etmək üçün ərintinin tərkibi seçilmişdir. Mexanik sınaqlar üçün lazım olan nümunələri hazırlamaq üçün bir neçə TiAlCrNb nümunəsi tökülmüşdür. Onların atom % ilə ifadə olunan orta tərkibi 44,2 Al, 49,9 Ti, 3,2 Cr, 2,7 Nb təşkil edir. Bu ərintilərin qırılma dayanıqlığı təxminən 22 MPa \sqrt{m} [4] təşkil edir ki, bu da ərintilərin bu sinfi üçün kifayət qədər yüksək qiymətdir. Şək.4.2.5 və şək.4.2.6-da əldə edilmiş ərintinin tökmə vəziyyətində optik və SEM mikroqrafikləri göstərilir. Hər iki şəkildən də görüldüyü kimi, ərinti dupleks mikrostruktur ilə xarakterizə olunur. Lamelli ($\gamma + \alpha_2$) koloniyalar arasında monofazlı γ dənələrinin incə dispersiyası görünür. Bəzən digər müəlliflər tərəfindən müşahidə edilən β fazası istehsalda aşkar edilməmişdir. (APPEL F.)



Şək.4.2.5 Tökmə ərintinin optik mikroqrafiyası (Keller reagenti ilə işlənmiş).

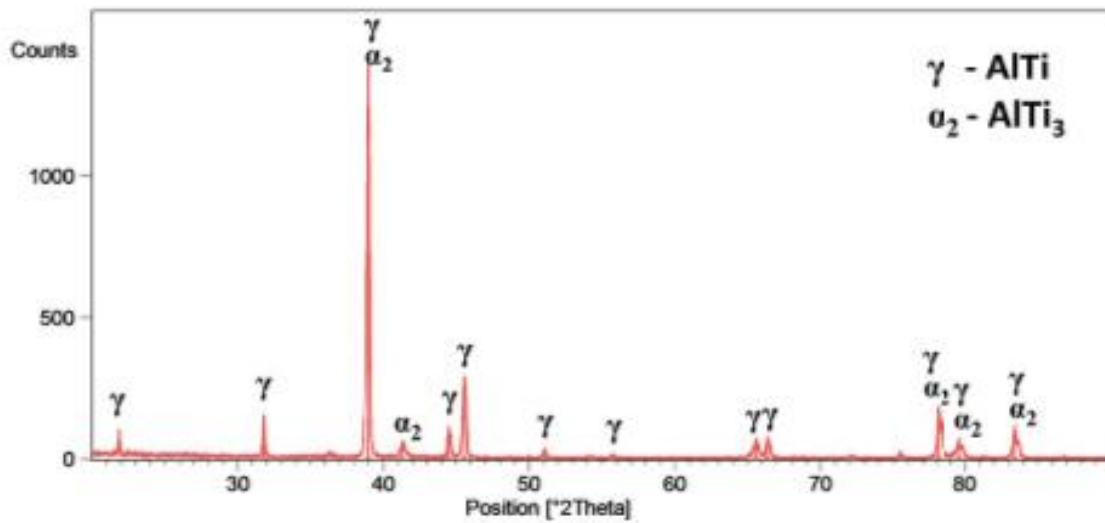
Mənbə: (APPEL F.)



Şək.4.2.6 Tökmə ərintinin SEM mikroqrafiyası (Keller reagenti ilə işlənmiş).

Mənbə: (APPEL F.)

Şəkil-də əldə edilmiş tipik rentgen şüalarının difraksiya nümunəsi göstərilir. Göründüyü kimi, yalnız γ və α_2 faza pikləri müəyyən edilmişdir.



Şək.4.2.7 Tökmə ərintinin rentgen şüalarının difraksiya nümunəsi

Mənbə: (Niu HZ., Chen YY.)

HV10 sərtlik ölçmələri bütün nümunələr üzərində aparılıb və orta sərtlik dəyəri 335 olub. Daha az Al tərkibli ərintinin sınaqdan keçirilməsi nəticəsində 365 dəyəri aşkar edilib. Bu onunla əsaslandırılır ki, bu halda ərintinin mikrostrukturunun digər ərintilərlə müqayisədə lamelli ($\gamma+\alpha_2$) koloniyalarının daha yüksək faizi ilə xarakterizə olunur. (Niu HZ, Chen YY və digərləri)

4.3 Ti-Al əsaslı intermetallidlərin tətbiq sahələri

Son onilliklərdə edilən bütün inkişafalara baxmayaraq, γ -TiAl əsaslı ərintilərin gələcəyi aeromühərrik tətbiqləri üçün daha yüksək xidmət temperaturlarına (750–900 °C) çatmağa imkan verən material/proses birləşməsinin tapılması imkanından asılıdır. Ti-Al əsaslı intermetallid ərintilərinin mikro strukturu isti ekstruziya və isti döymə kimi isti formalaşdırma əməliyyatları və sonra çox addımlı istilik müalicəsi ilə tənzimləyə bilər. Yüksək Nb β -bərkidici fazalı ərintilər də əhəmiyyətli maraq doğurmuşdur: əslində onlar TNM ərintilərinə nisbətən daha yüksək miqdarda Al, Nb və Mo ehtiva edir, nəticədə daha yüksək oksidləşmə müqaviməti və yüksək iş temperaturu gösdərir. Digər tərəfdən, bu ərintilər yerüstü nəqliyyat vasitələrinin mühərrik tətbiqləri üçün də həqiqətən perspektivlidir. Onlar 2013-cü ildən başlayaraq F-1 və motoGP yarış avtomobillərində istifadə olunan egzoz klapanlarının istehsalı üçün kommersiya baxımından istifadə edilmişdir, lakin bu komponentlərin geniş miqyaslı istehsalı yalnız etibarlı bir ərinti və onların qənaətli istehsalına imkan verən sadə istehsal prosesinin inkişafı ilə mümkün olacaq. Avtomobil sənayesində daha az kritik komponentlər tələb edən seriyalı hissələrin ucuz üsullarla istehsalı üçün TiAl intermetal ərintilərinin qırılma möhkəmliyinin və korroziyaya davamlılığının artırılması istiqamətlərdə tədqiqatlar davam etməkdədir.

Nəticələr və Təkliflər

γ -Ti-Al-M intermetallarda üçüncü M ərinti elementlərinin hansı qəfəs düyün nöqtələrində paylanma xarakteri ilə yanaşı onların ərinti içərisindəki müxtəlif seqreqasiya davranışlarının tədqiqi də əhəmiyyət kəsb etməkdədir. Qəfəs mövqeyi üstünlüklərinin nizamlanma enerjilərinin nisbi qiymətləri ilə müəyyən edilməsinə əlavə olaraq, bu enerjilərin işretləri (mənfi və ya müsbət), TiAl struktur matrisində M elementlərinin həll olunma rejimini də müəyyən edir. Dissertasiya işində γ -TiAl-da ərinti elementlərinin qəfəs mövqeyi üstünlüklərini müəyyən etmək üçün Monte Karlo simulyasiya metodu tətbiq edilmişdir. M ərintisi elementləri üçün ümumi qəfəs mövqeyinin üstünlüyü və seqreqasiya rejimi xarakteri üçün psevdopotensial yanaşmada ərintilərin elektron nəzəriyyəsi ilə hesablanmış nizamlanma enerjilərinin işarətləri və dəyərləri əsasında ümumi kriteriyaları müəyyən edilmişdir.

Monte Karlo simulyasiyalarının nəticələri tədqiq edildikdə M aşqar elementlərin psevdoklaster davranışı üçün üç fərqli həll olunma rejimlərinin əmələ gəlməsi ehtimalının olduğu görülmüşdür: nizamsız həll olma (Rejim I), iki ölçüdə müstəvi klasterləşmə (Rejim II) və atomların üçölçülü (3-D) qruplaşması (Rejim III).

Modelləmə və simulasya əsasında yerinə yetirilmiş nəzəri hesablamaların nəticələrinin ədəbiyyatda verilən experimental tədqiqatlarla uyğunluq gösdərdiyi isbat edilmişdir.

İstifadə olunan ədəbiyyatların siyahısı

- AYKOL M., MEKHRABOV A.O., and AKDENİZ M.V., Site Selection and Pseudo Clustering Behaviors of Alloying Elements in Aluminum-Lean γ -TiAl Intermetallics, METALL. MATER. TRANS. A VOL. 41A, 2010, 267-274
- ANTON D.L., Shah D.M., Duhl D.N, Giamei A.F, Selecting High-Temperature Structural Intermetallic Compounds: The Engineering Approach, JOM, 12-17, (1989)
- AUSTIN C. M. and Kelly, T. J., in Structural Intermetallics, ed. Darolia R., Lewandowski J. J., Liu C.T., Martin P. L., Miracle D. B. and Nathal. M. V., TMS, Warrendale, PA, (1993), pp: 143.
- AUSTIN C. M., Kelly, T. J., McAllister, K. G. And Chesnutt, J. C., in Structural Intermetallics 1997, ed. Nathal M. V., Darolia R., Liu C. T., Martin P. L., Miracle, R. Wagner D. B. and Yamaguchi M., TMS, Warrendale, PA, (1997), pp: 413.
- APPEL F, Oehring M, Paul JDH, et al. Physical aspects of hot-working γ -based titanium aluminides. Inter- metallics. 2004;12;791–802.
- APPEL F, Paul JDH, Oehring M, et al. Physical metal- lurgy of high Nb-containing TiAl alloys. Zeitschrift für Metallkunde. 2004;95;585–591.
- BOLZ S, OEHRIG M, Lindemann J, et al. Microstructure and mechanical properties of a forged β -solidifying γ TiAl alloy in different heat treatment conditions. Inter- metallics. 2015;58;71–83.
- Anık S., Sütataç M., “Titanium ve alaşımlarının kaynak kabiliyeti” Mühendis ve Makina Dergisi, cilt 27, sayı:318, Temmuz 1986

- BROTZU A, Capata R, Felli F, et al. Preliminary design, modeling, production and first evaluation tests of a Ti- Al Gas turbine blade. *J Eng Mater.* 2017;139;031005. doi:10.1115/1.4035894.
- BAIAMONTE L, MARRA F, PULCI G, et al. High temperature mechanical characterization of plasma-sprayed zirconia–yttria from conventional and nanostructured powders. *Surf Coat Technol.* 2015;277;289–298.
- CAPATA R, Sciubba E, Menna L, et al. Design, prototyping and preliminary testing of A TI-AL gas turbine blade (2015) ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Proceedings (IMECE), 6A-2015.
- DAHAR MS, Mohsen Seifi S, Bewlay BP, et al. Effects of test orientation on fracture and fatigue crack growth behavior of third generation as-cast Ti–48Al–2Nb–2Cr. *Intermetallics.* 2015;57;73–82.
- DI GIROLAMO G, MARRA F, BLASI C, et al. High- temperature mechanical behavior of plasma sprayed lanthanum zirconate coatings. *Ceram Int.* 2014;40; 11433–11436.
- ERDEM M.S., AYDIN K., GAZ TÜRBİNLİ UÇAK MOTORLARINDA TİTANYUM ALAŞIMLARININ KULLANIMI, *Mühendis ve Makina*, 2006; 47(558);44-53.
- Ezugwu E.O., “Titanium Alloys and Their Machinability AReview”, *Journal of Materials Processing Technology*, Oct 1995.
- Erdem M. S., Akmandor S., “Uçak Motoru ve Elektrojen Gruplarındaki Gaz Türbini Teknolojisindeki İlerlemeler, Malzeme, Yüzey Teknolojisi ve İmalat Süreçlerindeki Gelişmeler Bölüm 1-2” *Mühendis ve Makina Dergisi*, Ocak-Şubat 2004 sayı 528-529.
- Esslinger J., “Titanium in Aero Engines” MTU Aero Engines Munich, Germany <http://www.mtu.de>
- İpekoğlu G., Koçak M., Çam G., “Difüzyon Kaynaklı TiAl Alaşımının İy yapı ve Mekanik Özelliklerinin İncelenmesi”, *Kaynak Teknolojisi IV. Ulusal Kongresi Bildiriler Kitabı*, Yayın No: E2003/339, Ekim 2003, Kocaeli “Titanium Industries, INC.” <http://www.titanium.com>

- Pototzky P., Mailer H.J., Christ H.J., “Thermomechanical Fatigue Behavior of the High-Temperature Titanium Alloy IMI 834”, Metallurgical and Materials Transactions, volume 29A, Dec 1998.
- Helm D., Roder O., Lütjering S., “Recent Developments in the Production, Application and Research of Titanium Alloys in Germany”, MTU Aero Engines Munich, Germany
- LORIA E.A., Gamma Titanium Aluminides as Prospective Structural Materials, Intermetallics, 8, 1339, (2000).
- REVIERE R.D., Chen X.F., Oliver B.F., Brooks C.R., Dunlap J.R., Substitution Behavior of Mn, Cr, and Zr in Ternary and Quaternary Alloys of TiAl, Mater. Sci. Eng., A172, 95, (1993).
- SONG Y., Guo Z.X., Yang R., First principles Studies of TiAl-based Alloys, J. Light Met., 2, 115, (2002).
- SONG Y., Yang R., Li D., Hu Z.Q., Guo Z.X., A First Principles Study of the Influence of Alloying Elements on TiAl: Site Preference, Intermetallics, 8, 563, (2000).
- WOLF W., Podloucky R., Rogl P., Erschbaumer H., Atomic Modelling of Nb, V, Cr and Mn Substitutions in Gamma-TiAl .2. Electronic Structure and Site Preference, Intermetallics, 4, 201, (1996).
- SCHWAIGHOFER E, Clemens H, Mayer S, et al. Microstructural design and mechanical properties of a cast and heat-treated intermetallic multi-phase γ -TiAl based alloy. Intermetallics. 2014;44;128–140.
- FAN J, LIU J, TIAN S, et al. Effect of solidification parameters on microstructural characteristics and mechanical properties of directionally solidified binary TiAl alloy. J Alloy Compd. 2015;650;8–14.
- YOSHIHARAM, Miura K., Effects of Nb addition on oxidation behavior of TiAl. Intermetallics. 1995;3;357–363.
- LIN JP, ZHAO LL, Li GY, et al. Effect of Nb on oxidation behavior of high Nb containing TiAl alloys. Intermetallics. 2011;19;131–136.

- XIN J, ZHANG L, GE G, et al. Characterization of microstructure evolution in β - γ TiAl alloy containing high content of Niobium using constitutive equation and power dissipation map. *Mater Des.* 2016;107;406–415.
- NIU HZ, Chen YY, Xiao SL, et al. Microstructure evolution and mechanical properties of a novel beta γ -TiAl alloy. *Intermetallics.* 2012;31;225–231.
- KIM Y-W, KIM S-L. Advances in gammalloy materials–processes–application technology: successes, dilemmas, and future. *JOM.* 2018;70;553–560.
- Standard Test Method for Flexural Strength of Advanced Ceramics at Ambient Temperature; ASTM C1161-13; ASTM International: West Conshohocken, PA, USA, 2013.
- Standard Test Method for Flexural Strength of Advanced Ceramics at Elevated Temperatures; ASTM C1211-13; ASTM International: West Conshohocken, PA, USA, 2013.
- PULCI G, TULUI M, Tirillò J, et al. High temperature mechanical behavior of UHTC coatings for thermal protection of re-entry vehicles. *J Therm Spray Technol.* 2011;20;139–144.
- WOODWARD C., Kajihara S., Density of Thermal Vacancies in Gamma-Ti-Al-M, M = Si, Cr, Nb, Mo, Ta or W, *Acta Mater.* 1999; 47; 3793-3798
- YAMAGUCHI M., Inui H. ve Ito K., High-temperature structural intermetallics. *Acta Mater.*, 2000; 48;307-322